
Software

Modflow-2000

Nieuw!!!

Wat gebeurt er als de brandweer een nieuwe spuitwagen in gebruik neemt? Dan is er feest in het dorp! Want een vakman houdt van zijn/haar gereedschap. Wie van zijn werk houdt, kan genieten van de instrumenten waarmee het tot stand wordt gebracht.

Het is alleen de vraag of dat voor de computergebruiker ook nog geldt. Weliswaar ziet een computer er op hoofdlijnen nog ongeveer uit als een jaar of vijftien geleden, van binnen zijn die dingen al diverse malen overhoop gehaald. Om een computer te bedienen heb ik me resp. VAX/VMS, MS-DOS, Windows 3.11 en Windows 95/98 eigen moeten maken. Voor teksten ben ik begonnen met een editor waarin WordMarc-tekens moesten worden aangebracht, vervolgens kwamen WP-5.1, WP voor Windows 5.2 en 6.1, Word 95 en 97.

Dat zijn vijf pakketten in vijftien jaar, en ik begin me alweer zorgen te maken of ik met het niet-aanschaffen van Office-2000 de boot ga missen. En dan heb ik het nog niet eens over spreadsheets, mailservers, teken- en presentatieprogramma's en internet-browsers.

Een doorstroomtijd van een paar jaar is te kort om liefde voor een instrument te ontwikkelen. Bovendien gebruikt 90 % van de mensen -ondanks alle nieuwe versies van tekstverwerkers en spreadsheets- op hoofdlijnen dezelfde opties als een jaar of tien geleden. De nieuwste opties van de programma's worden het minst gebruikt. Toch laten we ons telkens opnieuw voortjagen door software-bedrijven om telkens met de nieuwste versies mee te gaan.

Korte MODFLOW-historie

In die voortjakkerende wereld was MODFLOW jarenlang een bakken in de zee, een rots in de branding. De eerste versie werd uitgebracht op 28 december 1983 (waarschijnlijk omdat het immer zeurende

afdelingshoofd op kerstvakantie was). In 1987 kwam de eerste aanpassing die geheel in software-stijl MODFLOW-88 werd genoemd, waarvan ik nooit heb geweten dat het een andere versie was. In 1993 werden er vervolgens wat nieuwe routines toegevoegd, en hoewel ik met een aantal van die nieuwe routines erg blij was (vooral de Pre-conditional Conjugate Gradient-optie, waarmee een probleem opeens drie keer zo snel draaide als met de SIP-module), is dat in mijn beleving toch een beetje het begin van de aftakeling van het programma. Het programma bleek niet meer uniform, je moest altijd kijken welke versie je voor een bepaald probleem had gebruikt, en het programma bevatte steeds meer opties die de meesten nooit gebruikten.

In 1996 kwam er een aanpassing die voor mijn gevoel van destijds overbodig was. De invoerbestanden hoefden niet langer strikt geformatteerd te zijn, maar de doorgewinterde gebruiker had dat probleem al lang omzeild, en nieuwe gebruikers begonnen al gebruik te maken van grafische schillen. Het was eigenlijk een MS-DOS-aanpassing terwijl iedereen allang onder Windows werkte.

Ook de eerste poging in 1993 om MODFLOW te integreren met automatische kalibratie slaagde niet: het leverde een gedrocht van een programma op (MODFLOWP). Ook de handleiding was voor mij niet om door te komen. Van andere hydrologen hoorde ik dat het vrijwel onmogelijk bleek om met het programma het einde van de berekening te halen. Omdat er een hanteerbaar alternatief was (PEST), is MODFLOWP nooit van de grond gekomen. Wie bovendien wilde werken volgens MODFLOW-96 kon geen gebruik maken van MODFLOWP, omdat dat nog volgens MODFLOW-88 werkte.

Wat nu weer???

Het moge dan ook duidelijk zijn dat ik geen gat in de lucht sprong toen ik via internet hoorde dat er een nieuwe versie van MODFLOW was: MODFLOW-2000. Uiteraard allemaal gratis te downloaden, inclusief documentatie, een manier van werken waar in Nederland alleen nog maar over gesproken wordt.

Maar goed, blij of niet blij, die nieuwe versie is er, en in de recente traditie van voortjakkeren heb ik dezelfde dag nog alles gedownload: een .exe-bestand van 2,85 Mb (terwijl er stond dat het 1,4 Mb zou zijn) en twee pdf-bestanden voor de documentatie. Het .exe blijkt een self-extracting bestand te zijn, dat ook de documentatie bevat, dus die had ik niet apart hoeven over te halen. Maar verder bevat het bestand alles: gecompileerde programma's en broncodes, handleiding, conversie-programma's en testproblemen. De programma's zijn gecompileerd met de Lahey Fortran 90 compiler, wat onder meer betekent dat het geheugen dynamische gealloceerd wordt: er zijn dus geen software-bepaalde grenzen aan de omvang van een modelnetwerk.

Wat kan MODFLOW-2000?

MODFLOW-2000 kan nog steeds wat het oude MODFLOW ook kon: potentialen uitrekenen binnen een eindige-differentie netwerk. Per cel wordt de waterbalans bepaald, en die kunnen weer cumulatief worden gepresenteerd. De meeste packages zijn vrijwel ongewijzigd: RIV, DRN, GHB, EVT, WEL en RCH zijn niet fundamenteel anders. Wel is er een mogelijkheid toegevoegd om vaste potentialen variabel in de tijd op te geven. Ook de oplosmethoden (SIP, SOR, PCG en DE4) klinken bekend in de oren.

Voornaamste verandering is dat MODFLOW nu geïntegreerd is met MOC3D (stoftransport) en MODFLOWP (automatische kalibratie). Het is zelfs mogelijk om het gevoeligheidsproces door meerdere compu-

ters in een netwerk te laten uitvoeren, een voorziening die ook door PEST wordt geboden. Om dat allemaal mogelijk te maken is de structuur iets gewijzigd. Er worden binnen het programma voortaan processen onderscheiden, en het ouderwetse berekenen van potentialen is één zo'n proces (Ground Water Flow Process). Daaromheen is het kalibratie-proces gebouwd, opgedeeld in drie processen. Het laatste proces is dan het stoftransport, maar dat zit om voor mij onverklaarbare redenen buiten het kalibratie-proces. Wie het stoftransport wil kalibreren moet dus alsnog van PEST gebruik maken.

Een tweede belangrijke verandering is dat het voortaan mogelijk is om invoer niet alleen direct met tabellen vol getallen in te verzorgen, maar ook met behulp van parameterwaarden door het programma te laten berekenen. De meest eenvoudige optie is in dat verband dat de diktes van de pakketten worden ingevoerd, de k-waarde middels een 'parameter' wordt ingevoerd, en de kD-waarde door het programma wordt berekend. Maar het kan ook complexer: als een pakket uit meerdere afzettingen bestaat, kunnen die nu ook afzonderlijk worden ingevoerd, waarna MODFLOW zelf de uiteindelijke kD-waarden uitrekent. Dat kan ook voor de DRN- en RIV-pakketten, zodat het bijvoorbeeld mogelijk is om met primaire, secundaire en nog verder gedetailleerde slotenstelsels te werken. De clou is natuurlijk dat die parameters afzonderlijk te kalibreren zijn, en dat geeft wel heel veel flexibiliteit. Ook zijn er zones te definiëren, zodat bijvoorbeeld de grondwateraanvulling onder bosgebieden onderscheiden kan worden van de grondwateraanvulling onder stedelijke of agrarische gebieden, die bovendien afzonderlijk te kalibreren zijn.

Een derde majeure aanpassing is de toevoeging van het LPF-package. Tot dusver dienden kD- en (reciproke van de) c-waarden via

het BCF-package te worden ingevoerd. Dat kan nog steeds, maar er is nu ook een alternatief. Het LPF-package definieert eigenlijk alleen de k-waarden, zowel in horizontale als in verticale richting, die worden gekoppeld aan de dikte van de lagen. Dat levert een voor ons soms wat onhandige situatie op: in Nederland hechten we erg aan homogene pakketten, en op basis daarvan zijn de pompproeven uitgewerkt. Dat betekent dat we met c-waarden werken, en pas bij de stromingsberekeningen de dikte van de lagen in beschouwing nemen. Een homogene c-waarde met een variabele dikte moet dus eerst gedeeld worden door de dikte, waarna MODFLOW het weer met elkaar vermenigvuldigt.

Alles bij elkaar heeft dit er toe geleid dat de invoer iets anders gestructureerd is. De discretisatie van het model is nu opgenomen in een aparte invoerfile, en ook de invoer van het BAS-bestand is gewijzigd. De invoerbestanden zijn dus niet één op één uitwisselbaar.

Dat is op zich een heldere keuze. Een gegeven situatie kan nieuwe ontwikkelingen behoorlijk in de weg zitten, en wie in zo'n situatie een stap vooruit wil doen, moet soms het verleden loslaten. Aan de andere kant wordt het wel moeilijk om in te schatten waar het programma nu staat. Ons wordt meegedeeld dat vanwege de iets andere manier van schematiseren de vroeger toegevoegde packages niet allemaal meer zullen werken.

Storender is de waarschuwing dat packages die werken voor het gwf-process (de potentiaalberekening) niet noodzakelijkerwijs aansluiten bij andere processen (bijvoorbeeld de kalibratie). Zo blijkt bij een bepaalde manier van middeling van doorlatendheden gevoeligheidsanalyse en dus kalibratie niet mogelijk. Daar wordt niet verder op ingegaan: 'this is beyond the scope of this report', staat er dan in de handleiding.

De handleiding

De gebruiker wordt via twee bijgevoegde documenten geïnformeerd over opbouw en gebruik van het programma. De ene handleiding heeft betrekking op het GroundwaterFlow Process (de potentiaalberekeningen) en de andere op het kalibratieproces. Er is geen handleiding van het MOC3D-deel bijgevoegd.

Voornaamste euvel is dat USGS het niet nodig vindt om alle achtergronden vanaf het begin te herhalen. Dat betekent dat de basis handleiding nu uit vijf rapporten bestaat. Daarmee ben je er nog niet: de aanpassingen in de BCF-bestanden zijn beschreven in twee afzonderlijke rapporten, en de toegevoegde opties in nog eens acht rapporten. Wie inhoudelijk het programma wil doorgronden moet dus minstens vijftien rapporten in de juiste tijdsvolgorde kennen, en wordt daarnaast doorverwezen naar rapporten van Konikow e.a. en Hill. Ik snap wel dat dat het makkelijkst is voor degenen die moeten documenteren, maar het is een ernstige handicap voor de gebruiker. Ik heb niet getest of alle rapporten via Internet te downloaden zijn, maar ik vermoed dat dat geen probleem is.

Conversie

Ik besluit om MODFLOW-2000 uit te testen op een model dat ik in 1997 eerst handmatig gekalibreerd heb en later met PEST nog eens heb nagerekend. Er wordt een conversie-programma bijgeleverd om bestaande BAS- en BCF-invoer om te bouwen naar de nieuwe structuur. 'After conversion MODFLOW-2000 should produce the same results as MODFLOW-96 produced', merkt de handleiding fijntjes op. Het conversie-programmaatje loopt echter vast, en het wordt mij niet duidelijk waarom. Het BAS-bestand wordt wel feilloos aangepast, maar in het nieuwe BCF-bestand komt onzin te

staan. Er zit dus niets anders op dan de aanpassingen met de hand aan te brengen. Daarbij is het mijn beurt om een aantal fouten te maken, maar zodra die onderkend en gecorrigeerd zijn, loopt MODFLOW-2000 als een zonnetje.

Groundwater Flow Process...

Het opstarten van het programma verloopt op dezelfde manier als MODFLOW-96: met een bestand waarin de namen van alle invoerbestanden zijn vermeld, met de mogelijkheden om in 'batch' te werken. De invoer van de netwerkconfiguratie middels een discretisatie-bestand oogt uiteindelijk logischer dan in de oude situatie, al is het nu nog even wennen.

...en verder

Maar goed, MODFLOW-2000 kan meer, het kan nu ook automatisch kalibreren, en dat moet ik dus ook proberen. Ik besluit om het stap-voor-stap op te zetten, vooral ook omdat MODFLOW automatische kalibratie beschouwt als drie processen die los van elkaar te draaien zijn: vergelijking met metingen, gevoeligheidsanalyse en parameter-optimalisatie.

Eerst wil ik gemeten waarden vergelijken met berekende. Ik heb alleen gemeten potentialen, maar MODFLOW kan ook fluxen aan, afkomstig van rivieren, drainage, of vaste potentialen (GHB of vaste potentialen uit de BAS-file).

Ik pak de tweede handleiding erbij, en struikel over de wolligheid en warrigheid van de tekst. In de eerste invoerregel moet ik al allerlei keuzes maken voor de postprocessing. Ik word door- en terugverwezen binnen het rapport en naar eerdere publicaties, en dat werkt niet prettig. Een mens wil tegenwoordig aan de slag en snel resultaat zien, en dus verschijnen er in alle handlei-

dingen hoofdstukken 'Getting Started'. Dat ontbreekt hier: de eerste regel luidt dat er verschillende manieren zijn voor invoer, en dus moet je de tekst doorspitten voordat je iets kunt doen. Het duurde meer dan een uur voordat ik begreep hoe de grondwaterstanden ingevoerd moeten worden, terwijl je toch zou denken dat je klaar zou moeten zijn als je x, y, z, tijd en meetwaarde invult. Er worden onder meer zaken naar de (commerciële) preprocessors toegeschoven, die mijns inziens net zo goed in het programma zelf opgelost had kunnen worden.

Uiteindelijk lukt het wel om resultaten te krijgen die zo goed als identiek zijn aan die van eerdere berekeningen, waarna ik besluit het Sensitivity-proces te betreden. Daarvoor moet ik eerst mijn model herdefiniëren met behulp van parameters. Nu wordt dat onderdeel ook weer niet erg helder omschreven in de handleiding. Ik besluit helemaal terug te gaan in de handleiding. Op blz. 4 wordt het werken met parameters aangekondigd, en er wordt verwezen naar een paragraaf die op blz. 12 begint. Daar wordt onderscheid gemaakt naar laaggegevens (zoals kD- en c-waarden) en listgegevens (zoals RIV- en DRN-bestanden). Ik wil kalibreren op een kD-waarde, dus ik moet de laaggegevens hebben. Dan komt er een eerste adder onder het gras vandaan: als ik voor één laag de kD-waarde met behulp van parameters laat berekenen, moet ik voor alle lagen de kD-waarde met behulp van parameters opgeven. Vervolgens word ik doorgesluist naar de volgende paragraaf.

Als er gebruik gemaakt wordt van parameters, worden de celwaarden berekend als het produkt van de parameterwaarde, en een 'cell-multiplier'. In mijn geval zou de parameter de k-waarde zijn, en de D-waarde de multiplier. Het blijkt dat niet elke grootheid met parameters beschreven kan worden. Welke grootheden wel en welke niet met parameters beschreven kunnen worden, blijft hier in het ongewisse: men verwijst

naar de invoerbeschrijving van de afzonderlijke packages. Heel geleidelijk word ik zo op het idee gebracht dat het BCF-pakket niet met parameters, en dus niet met automatische kalibratie kan werken. Dat is op zich al raar, en helemaal dat het nergens expliciet vermeld staat. Pas op dit punt ontdek ik dat ik gedwongen ben om gebruik te maken van het nieuwe LPF-bestand, en dus moet ik mijn BCF-bestand hiernaar omwerken. Dat is best lastig, aangezien de beschrijving van het LPF-package wel deugt, die van het Multiplier-bestand ook, maar de interactie nergens lekker beschreven wordt. Ook begrijp ik niet waarom het werken met parameters nu persé niet met het BCF-bestand kan, überhaupt begrijp ik niet waarom het multiplier-bestand niet binnen de data-bestanden zelf geïntegreerd kon worden. Als je er eenmaal mee kunt werken zal alles best vanzelfsprekend worden, maar voor de eerste keer is het puzzelen, met de handleiding op vier plaatsen tegelijk open.

Al met al lukt het niet helemaal om het oude model één op één naar de nieuwe bestanden te converteren, voornamelijk omdat ik mezelf voor deze test de tijd niet meer gun. Zodra ik in de buurt zit, besluit ik de exacte conversie te laten schieten, en te kijken of er in de gegeven situatie een optimale k-waarde berekend kan worden. Op dit punt aangekomen geef ik ook de hoop op de handleiding te doorgronden. Ik vul waarden in waarvan ik niet kan nagaan wat ze betekenen en wat voor invloed ze op het proces hebben. De berekening start goed op, past de k-waarde aan, en loopt vervolgens vast: register stack dump, verder geen informatie. Ook het spelen met getalswaarden waarvan ik de betekenis niet kan inschatten, geeft geen verandering: steeds op dezelfde plaats crasht het programma zonder nadere mededelingen over het hoe en waarom.

Conclusies

Waar de MODFLOW-96 toch vooral een buitenkant-update was, is MODFLOW-2000 een poging om het programma geschikt te maken voor modernere modelberekeningen, die zwaarder en meestal 3-D zijn. Ook de integratie met andere 'processen' is toe te juichen, maar ik moet nog zien of die integratie wel gelukt is. De handleiding is in ieder geval niet geïntegreerd, en dat is een veeg teken. De processen zijn onderling ook niet geïntegreerd. Zo kun je de optimalisatie niet toepassen op het stoftransport, en mogen bepaalde middelingsopties niet gebruikt worden als je wilt kalibreren. De versnipperde beschrijving van alle routines, en nu ook van de afzonderlijke processen, zou zich wel eens kunnen ontwikkelen tot een ernstige zwakte van het programma.

Voor mensen die het programma sinds 1984 gebruiken is het misschien allemaal nog wel te volgen. Voor nieuwe gebruikers lijkt het me een ondoordringbaar woud van USGS-rapporten, waar je maar net de goede boom moet zien te vinden. Dat maakt het genereren van invoer-bestanden tot een puzzel, waar een hydroloog niet op elk moment zin in heeft. Dat wordt versterkt doordat de beschrijvingen van de nieuwste toevoegingen mijns inziens niet uitblinken in helderheid.

Waar het programma dus een belangrijke stap doet om mee te gaan in de tijd, worden de drempels om met het programma om te gaan alleen maar hoger. Voor mensen die het programma vaak gebruiken zal dat bezwaar op termijn wegvallen tegen de toegenomen functionaliteit, maar beginnende modelleers zou ik dit programma onderhand niet meer aanraden.

MODFLOW-2000 zou dus best een echte verbetering kunnen zijn, al zal dat in de praktijk moeten blijken.

Harry Boukes

Naschrift:

Naar aanleiding van mijn bevindingen ontstond er een discussie via Internet. De reactie van John Doherty wil ik de lezer niet onthouden:

"As the author of PEST I'd like to make a small contribution to the strand that has started up regarding MODFLOW-2000 and PEST. I have played with MODFLOW-2000 and am very impressed by it. It appears to be quite a powerful package and, given the complexity of what it is trying to achieve, appears to do it very well. Time and usage will tell if there are any bugs, but I'm sure that, if there are, the USGS will fix these as soon as they are identified.

One of the great benefits of using MODFLOW-2000 is that it calculates sensitivities internally whereas PEST must do this on the basis of repeated model runs by the finite difference method (there is no other choice for a model-independent optimiser such as PEST.) The fact that MODFLOW-2000 sensitivities are calculated so accurately improves the parameter estimation process dramatically. MODFLOW-2000 also prints out a stunning array of statistics in conjunction with the optimisation process (persoonlijk weet ik niet of dat voor niet-statistici altijd een voordeel is; HB), and allows the user to propagate parameter uncertainty to model predictive uncertainty. While this methodology is based on certain linearity assumptions, it is nevertheless useful in many cases.

However, in spite of all of the good things about MODFLOW-2000, I think that PEST will continue to find some place in the MODFLOW calibration context for at least the following reasons:

- 1 With PEST a user will be able to calibrate MODFLOW in conjunction with another

model such as MT3DMS or a recharge model or river model. This adds enormous flexibility to the calibration process, particularly in complex modelling environments.

- 2 PEST allows rigid enforcement of parameter upper and lower bounds whereas MODFLOW-2000 does not. While there is some argument about the importance of this, I consider it a very good thing. Furthermore, PEST's bound-enforcement algorithm is unique and powerful - bringing stability to the parameter estimation process as it enforces the bounds.
- 3 With its powerful non-linear predictive analyser, PEST allows a user to conduct true nonlinear predictive analysis as part of the calibration/model deployment process. This is very useful when modelling contaminant fate and transport for reasons such as remediation design, monitoring network design, or in undertaking capture zone analysis, especially if accompanied by flexible methods of spatial parameter definition.
- 4 PEST's new "regularisation mode" allows smoothness and/or geostatistical constraints to be imposed on spatially complex parameter distributions, this lending a great deal of stability to the parameter estimation process as it enforces geological realism into spatially complex modelling domains. The PEST inversion algorithm is very robust. In difficult cases (eg involving cell drying/rewetting) I've found that PEST can often "break through" to a solution in numerically difficult territory where other parameter estimators languish.
- 5 PEST offers the possibility of user-intervention in difficult cases to keep the optimisation process moving in difficult numerical situations.

My suspicion is that the inversion algorithm of MODFLOW-2000 is still a little weak. I see that it has been improved a little - but

not enough, I think, to be able to keep going when the going gets tough. MODFLOWP and MODFLOW-2000 are really built for estimating a small number of parameters. There things are almost linear and a lot of the statistics which they use is applicable. PEST is built for handling more highly parameterised models. There the statistics are inapplicable because things aren't even nearly linear. Also, the inversion algorithm of MODFLOW-2000 will (I suspect) just not be able to handle such difficult cases. PEST's inversion algorithm is "built for trouble"

MODFLOW-2000 users will have the option of using PEST if they want to. A MODFLOW-2000-to-PEST translator will soon be available so that once a MODFLOW-2000 set of input files has been generated, a set of PEST input files can be generated automatically. These can then be used as a basis for introducing other models into a joint calibration process or of simply using PEST to calibrate MODFLOW-2000.

Furthermore, the latest version of PEST (vs 6) will actually be able to make use of internal MODFLOW-2000-calculated sensitivities; a slightly modified version of MODFLOW-2000 will be available which will pass its sensitivity matrix to PEST. This will be useable whether you are calibrating just a MODFLOW-2000 model or a MODFLOW-2000 model in conjunction with another model such as a recharge, river or transport model. Thus the advantages of MODFLOW-2000 will be combined with those of PEST.

So with the availability of MODFLOW-2000 and the upgraded PEST, the groundwater modeller will have tools of unprecedented power for model calibration/predictive analysis at his/her disposal."

John Doherty