

Gebiedsgericht grondwaterbeheer in het Rotterdamse Havengebied: toepassing van iMOD-WQ en HydroConnect

GIJS JANSSEN, JARNO VERKAIK, JOHAN VALSTAR, ANNEMIEKE MARSMAN,
SOPHIE VERMOOTEN, JAN-WILLEM MEERTENS & BERT DE DOELDER

De afgelopen jaren heeft Deltares gewerkt aan het mogelijk maken van waterkwaliteitsmodellering en modellering van dichtheidsafhankelijke stroming en transport met iMOD. De code waarmee dit kan heet iMOD-WQ. De eerste toepassing hiervan was ter ondersteuning van de gebiedsgerichte grondwateraanpak (GGA) in het Rotterdamse Havengebied. In dat (nog steeds lopende) project wordt ook gebruik gemaakt van de workflow manager HydroConnect, een andere relatief recente modelleerinnovatie. HydroConnect faciliteert in dit project het gebruik van het ontwikkelde modelinstrument en de uit te voeren "modellentrein" door meerdere partijen. In dit artikel wordt de toepassing van beide innovaties binnen GGA in het Rotterdamse Havengebied toegelicht.

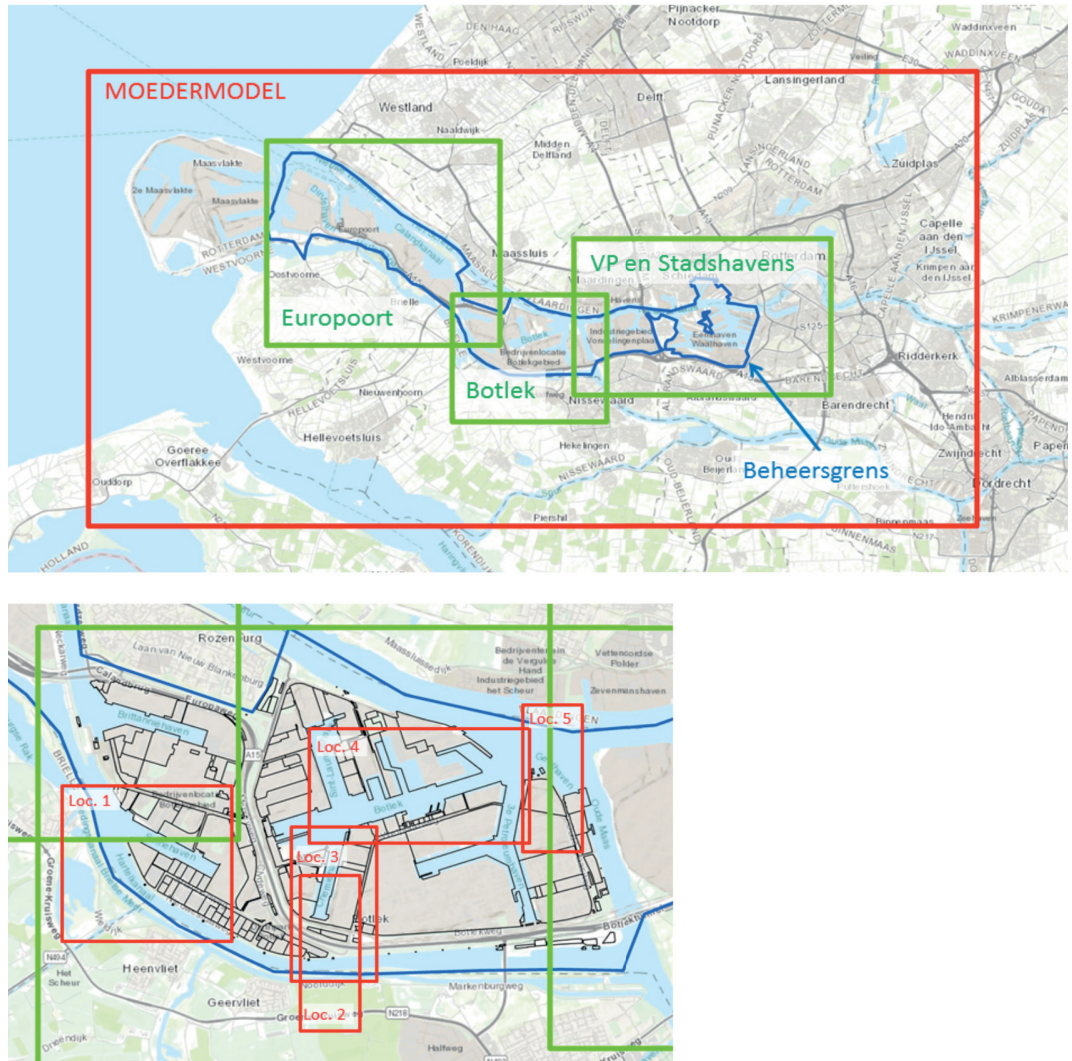
Software

Inleiding

In het Rotterdamse havengebied zijn door langdurige en grootschalige industriële activiteiten de bodem en het grondwater verontreinigd geraakt. In het kader van het door de EU gesubsidieerde onderzoeksproject WELCOME is een methodiek ontwikkeld om risico- en gebiedsgericht de grootschalige verontreinigingsproblematiek kosteneffectief en duurzaam aan te pakken. De haven van Rotterdam was een case in dat project. Het idee achter de ontwikkelde methode is om af te stappen van een locatiegerichte benadering, waarbij elk bedrijf ervoor dient te zorgen dat de verontreinigingen de locatiegrens niet passeren (wat opgeteld voor alle locaties zeer kostbaar zou zijn, zowel wat betreft sanering als monitoring). De locatiegerichte benadering zou vervangen worden door een gebiedsgerichte aanpak, waarin op basis van gedeelde verantwoordelijkheid een effectief maatregelenpakket wordt ontworpen en geïmplementeerd, dat er toe moet leiden dat de verontreinigingen de beheersgrenzen (afbeelding 1) niet passeren. Naast dat de monitoring veel efficiënter ingericht kan worden, geeft de gebiedsgerichte aanpak veel meer ruimte voor het gebruik van de ondergrond als "reactorvat", waarin natuurlijke afbraak plaats kan vinden en waardoor de saneringsdruk verminderd wordt. Dit leidt tot een duurzame en goedkopere oplossing.

Een centraal onderdeel van de ontwikkelde aanpak is een grondwatermodel, welke de risico's van de grondwaterverontreinigingen op de receptoren (diep grondwater, oppervlaktewater, gebied rondom het havengebied) en de effecten van maatregelen goed in beeld kan brengen. Dat is de start geweest van de ontwikkeling van een modelinstrumentarium voor het havengebied. Dit modelinstrumentarium heeft de

naam CARROT gekregen, wat staat voor Coordinated Approach Remediation Rotterdam (Valstar e.a., 2018). In dit modelinstrumentarium is gebruik gemaakt van twee modelleerinnovaties van de laatste jaren, te weten iMOD-WQ en HydroConnect. In dit artikel worden beide innovaties toegelicht en het gebruik ervan binnen CARROT besproken.



Afbeelding 1 Locatiegrenzen, gebiedsgrens en modeldomeinen in het Rotterdamse Havengebied. Boven: het overkoepelende "moedermodel" en de drie deelmodellen voor grondwaterstroming. VP = Vondelingenplaat. Onder: de ligging van enkele transportmodellen binnen het Botlek-deelmodel.

Het CARROT-model

Afbeelding 1 toont het modelgebied. Het totale modelgebied beslaat een oppervlakte van $47 \times 25.5 = 1198.5 \text{ km}^2$. De rekenresolutie van dit "moedermodel" is $50 \times 50 \text{ m}$. Binnen dit grovere model zijn drie submodellen gedefinieerd: Botlek, Europoort en Stadshavens. De submodellen hebben een rekenresolutie van $10 \times 10 \text{ m}$.

en ontlenen hun randvoorwaarden aan het grovere moedermodel. Binnen deze submodellen worden de stoftransportberekeningen apart voor elke deelnemende bedrijfslocatie uitgevoerd, op een modeldomein dat is afgestemd op de te verwachten verspreiding van de voor de betreffende locatie gemodelleerde verontreinigingen binnen de gesimuleerde periode (doorgaans 100 jaar).

Het model bestaat uit 128 modellagen met ruimtelijk constante diktes. De top van het model bevindt zich op 7.5 m +NAP en de onderkant van het model op -277 m +NAP. De modellaagdikte tot -50 m +NAP (de diepte van GeoTOP) is 0.5 m, en neemt daaronder geleidelijk toe tot maximaal 60 m. De hydrologische parameterisering van de bovenste 50 m is gebaseerd op GeoTOP, lokaal verbeterd aan de hand van aanvullende boringen en sonderingen.

Voor data-acquisitie en -verwerking omtrent oppervlaktewater, drainage, stijghoogte-randvoorwaarden, winningen, reactiviteitsparameters et cetera wordt hier verwezen naar het achtergrondrapport (Valstar e.a., 2018).

De resultaten van het grondwatermodel maken het mogelijk voor belanghebbenden, zoals de gemeente Rotterdam, het havenbedrijf en de bedrijven in het havengebied, om:

- een strategie en bijbehorende maatregelen voor beheersing van de verontreinigingen te bepalen. De resultaten geven inzicht in de mogelijke verspreiding over de locatiegrens, richting de gebiedsgrens en in de diepte. Daarnaast geven de resultaten inzicht in de termijn waarop dit te verwachten is. Op basis daarvan kan worden ingeschat of bronverwijdering of een andere maatregel als zinvol kan worden beschouwd. Maatregelen kunnen ook doorgerekend worden met het model om de effectiviteit van de maatregel in te schatten.
- de monitoring in te richten. De resultaten laten zien in welke richting en hoe snel de verontreiniging met het grondwater beweegt. Deze informatie kan gebruikt worden om het monitoringsnetwerk slim in te richten op de locaties waar volgens het model de verontreiniging naartoe beweegt. Deze monitoring levert vervolgens weer data op om het model te verbeteren.

Wat is iMOD-WQ?

Sinds 2006 ontwikkelt Deltares vrijwel alle grondwaterstromingsmodellen in de iMOD-omgeving (Vermeulen e.a., 2018). Voor grondwaterkwaliteitsberekeningen was het daarna nog lang noodzakelijk om te werken met de "standaardversies" van de bij MODFLOW aansluitende codes als MT3DMS en RT3D. De voordelen van iMOD (knippen/schalen, werken met een runfile, het gebruik van de GUI, et cetera) waren daardoor niet beschikbaar voor transportberekeningen, en men was in feite gedwongen om in twee "omgevingen" te werken, met verschillende bestandsformaten en een verschillende set aan tools voor pre- en postprocessing.

In 2012 is, in opdracht van de Gemeente Rotterdam en omwille van het in dit artikel verder beschreven CARROT-model, een eerste versie ontwikkeld van MT3DMS (v5.3, Zheng (2010)) in de iMOD-omgeving, op de werkvloer iMOD-MT3DMS genoemd. iMOD-MT3DMS maakt gebruik van een eigen runfile waarin op een efficiënte wijze (met keywords en macro's) de invoer van alle packages wordt opgegeven, en maakt gebruik van iMOD-formaten (met name .IDF en .IPF bestanden) voor de in- en

uitvoer. Doordat de code de fluxen-IDF's accepteert die iMODFLOW genereert, ontstond er een naadloze aansluiting van de transportmodellering op de stromingsberekeningen in de iMOD-omgeving.

Later heeft Deltares, net als MT3DMS, de code van SEAWAT (v4, Langevin e.a., 2008), voor dichtheidsafhankelijke stroming en transport, uitgebreid met een runfile en ondersteuning van iMOD-formaten. iMOD-MT3DMS en iMOD-SEAWAT zijn vervolgens samengebracht in één code genaamd iMOD-WQ (waarbij WQ staat voor Water Quality). Met deze code kunnen SEAWAT berekeningen worden uitgevoerd, inclusief reactief transport. Tevens kunnen stand-alone MT3DMS- en RT3D-berekeningen worden uitgevoerd, waarbij de waterfluxen afkomstig zijn van een separate iMOD-FLOW-simulatie of een iMOD-WQ-simulatie in de SEAWAT-modus. Verder kan er met iMOD-SEAWAT, net als iMODFLOW, parallel worden gerekend met de Parallel Krylov Package (PKS) om rekentijden significant te reduceren (Verkaik e.a., 2015).

Gebruik van iMOD-WQ binnen CARROT

In CARROT wordt iMOD-WQ op twee manieren gebruikt. Ten eerste wordt iMOD-WQ ingezet voor SEAWAT-berekeningen, om de transportmodellen te kunnen voorzien van berekende fluxen waarin rekening gehouden is met dichtheidsstroming. Dit betreft dus SEAWAT-berekeningen voor het "moedermodel" en de deelmodellen voor Botlek, Europoort en Vondelingenplaat tot Stadshavens.

Ten tweede wordt iMOD-WQ gebruikt voor de berekeningen van de verspreiding van de gemodelleerde verontreinigingen. iMOD-WQ wordt dan in de "standalone MT3DMS" modus ingezet.

Om modellen en rekentijden beheersbaar te houden, wordt stapsgewijs neergeschaald vanaf het moedermodel tot de kleine transportmodellen. Uiteraard worden alle modellen opgebouwd vanuit één enkele database met data op de meest fijne schaal om het beheer en onderhoud zo efficiënt mogelijk te doen. Tot nu toe zijn binnen de Gebiedsgerichte Aanpak twaalf locaties gemodelleerd. Zouden dat allemaal daadwerkelijk afzonderlijke modelletjes zijn, met hun eigen database, dan zou het beheer en onderhoud van al die modellen al snel lastig en inefficiënt worden. Het opzetten van een transportmodel voor een nieuwe locatie zou bovendien steeds een hoop werk zijn. Met iMOD-WQ kunnen modelgebied en rekenresolutie, net zoals bij iMODFLOW, opgegeven worden in de runfile.

Voor enkele locaties wordt naast MT3DMS-functionaliteit ook gebruikt gemaakt van de RT3D-functionaliteit. Dit zijn de locaties waarvoor de afbraakketen $PER \rightarrow TRI \rightarrow CIS \rightarrow VC$ gemodelleerd wordt. De productie van de ene stof uit de afbraak van een andere stof kan niet met MT3DMS gesimuleerd worden. In iMOD-WQ is een aparte package opgenomen voor de RT3D-functionaliteit, te weten de UDR (User-Defined Reaction) package. In de betreffende subroutine kan de gebruiker elke willekeurige reactiemodule zelf coderen. RT3D kent een vergelijkbare optie. In geval van CARROT is de "user-defined reaction" dus bovengenoemde afbraakketen.

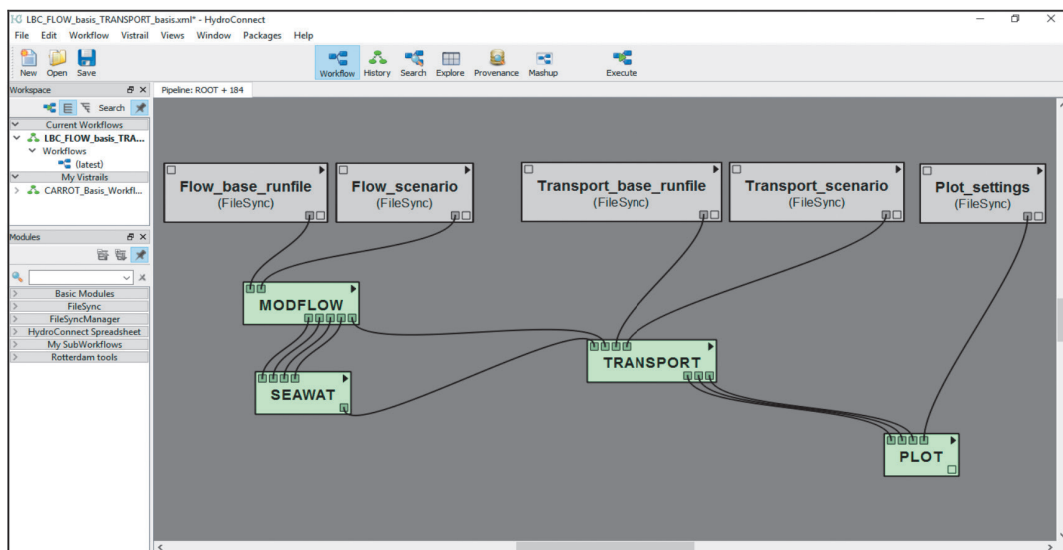
Gebruik van HydroConnect voor aansturing van het CARROT-model

In 2018 is een serverplatform opgezet om het modelinstrumentarium te kunnen delen met de bedrijven en andere stakeholders uit de gebieden. Het doel is dat de

gemeente Rotterdam, het havenbedrijf, DCMR, de bedrijven en hun adviseurs gebruik kunnen maken van het model om bijvoorbeeld de effectiviteit van een maatregel uit te rekenen of een vergelijking te maken tussen de modelvoorspelling en de gemeten concentraties (ter optimalisatie van het model). Om dit gebruik van het modelinstrumentarium te faciliteren, met name voor gebruikers die minder bekend zijn met iMOD en de gebruikte modelcodes, is een HydroConnect-applicatie opgezet om het model aan te sturen.

HydroConnect is een grafische schil, gebaseerd op de open-source workflow manager VisTrails, dat gebruik maakt van een speciaal ontwikkelde versiebeheer-module (FileSync) die efficiënt is voor grote datasets. Het doel van HydroConnect is het op een consistente en reproduceerbare wijze vastleggen en ontsluiten van bewerkingen (scripts) en onderliggende data in de vorm van (interactieve) workflows/stroomdiagrammen. Hierbij kan de gebruiker op zijn/haar lokale reken-pc zowel de workflows als data "synchronizeren" met een remote data server waar de meest recente data staan. HydroConnect is in 2012 als open-source software ontwikkeld in het kader van het Nationaal Modellen en Datacentrum (NMDC) en is sindsdien toegepast voor de MIPWA en AZURE grondwatermodellen (vooral nog alleen workflows) en voor het NHI (vooral nog alleen data).

Binnen CARROT wordt HydroConnect voornamelijk enkel ingezet als workflow manager en als scenariomanager, zonder nog aan geautomatiseerd versiebeheer te doen. Als workflow manager regelt HydroConnect binnen CARROT de automatische uitvoering van de modellentrein (met noodzakelijke tussenstappen), gevolgd door geautomatiseerde visualisatie van de modelresultaten (zie afbeelding 2).



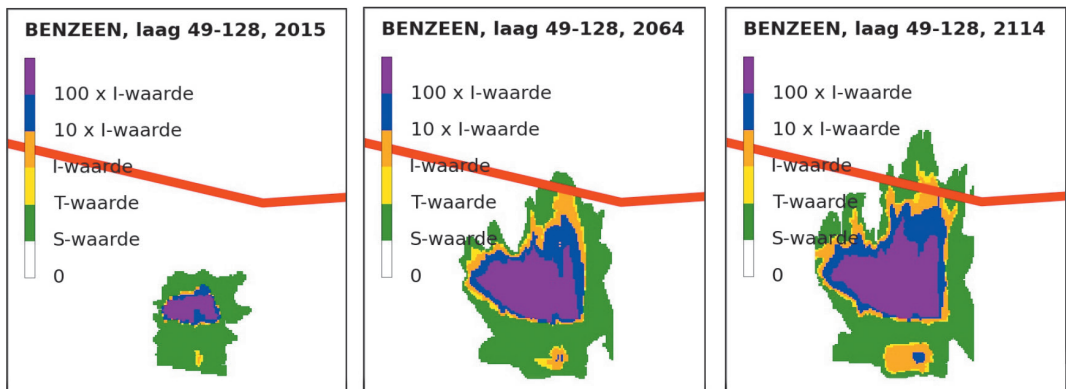
Afbeelding 2 Workflow in HydroConnect. De bovenste rij workflow-blokken betreffen invoer-settings op basis waarvan de workflow wordt uitgevoerd. De workflow bestaat uit het uitvoeren van een MODFLOW- of SEAWAT-simulatie (afhankelijk van of een MODFLOW-basisrunfile of een SEAWAT-basisrunfile wordt opgegeven), het uitvoeren van de transportberekening op basis van de door het stromingsmodel berekende fluxen, en tenslotte het visualiseren van de resultaten van de transportberekening.

Als scenariomanager verzorgt HydroConnect een reproduceerbare opzet van de gewenste scenario's. Een scenario is daarin altijd een bepaalde (set van) aanpassing(en) op de basisrunfile van iMODFLOW en/of iMOD-WQ. De basisrunfiles bevatten de basisinstellingen van de modellen.

Een scenario wordt gedefinieerd door in HydroConnect een zipfile in te laden, met daarin de bestanden die de gewenste aanpassingen op de basisrunfile definiëren (bijvoorbeeld een vervangend IPF bestand met aanvullende onttrekkingen, of vervangende IDF bestanden met aangepaste initiële concentraties). HydroConnect zorgt voor de gewenste aanpassingen op de basisrunfiles en genereert automatisch de uitvoermappen met consistente naamgeving (gelijk aan de naam van het scenario).

Het werken met HydroConnect binnen CARROT heeft op deze manier de volgende voordelen:

- Automatisering van de workflow;
- Standaardisering van in- en uitvoer. Voorbeelden daarvan zijn dat (1) steeds dezelfde basisrunfiles worden gebruikt wat doorwerking van fouten voorkomt, en (2) iedereen hetzelfde script voor het genereren van figuren gebruikt (zie afbeelding 3);
- Hulpmiddel bij het opstellen van de scenario's;
- Vast raamwerk voor het uitvoeren van berekeningen. Het "dwingt" gebruikers om op een bepaalde manier te werken en reduceert de foutengevoeligheid;
- Aansturing van scenario's middels de grafische schil van HydroConnect.



Afbeelding 3 Voorbeeldresultaten van de ontwikkeling van een benzeenpluim op een locatie in de Botlek. Vanwege vertrouwelijkheid van de resultaten zijn deze hier geanonimiseerd. De resultaten geven de maximale concentratie over alle modellagen dieper dan 20 m-mv (grovweg de onderkant van de Holocene deklaag). S-waarde = streefwaarde. T-waarde = toetswaarde. I-waarde = interventiewaarde. De rode lijn geeft de beheersgrens (hier fictief vanwege de anonimiteit van de figuur) weer van de gebiedsgerichte aanpak.

iMOD-WQ Open Source

Op het moment van dit schrijven werkt Deltares aan het open-source maken van iMOD-WQ en het kunnen meeleveren van de software met de iMOD releases. De verwachting is dat dit in de loop van 2019 gerealiseerd is.

HydroConnect is al open-source. Een verzoek om een installer van deze software kan ingediend worden via de NHI Helpdesk: helpdesk.nhi@deltares.nl.

Literatuur

- Langevin, C.D., D.T. Thorne, A.M. Dausman Jr., M.C. Sukop en W. Guo (2008) SEAWAT Version 4: A Computer Program for Simulation of Multi-Species Solute and Heat Transport; U.S. Geological Survey Techniques and Methods Book 6, Chapter A22.
- Valstar, J., G. Janssen, A. Marsman, J. Klein en S. Vermooten (2018) Grondwatermodel Rotterdamse havengebied: achtergrondinformatie; Deltares rapport 11201981-002.
- Verkaik, J., J.D. Hughes en E.H. Sutanudjaja (2015) A hybrid, Parallel Krylov Solver for MODFLOW using Schwarz Domain Decomposition; in: AGU Fall Meeting Abstracts.
- Vermeulen, P.T.M., F.J. Roelofsen, B. Minnema, L.M.T. Burgering, J. Verkaik en A.D. Rakotorinina (2018) iMOD 4.3 User Manual; Deltares rapport.
- Zheng, C. (2010) MT3DMS v5.3; a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems. Supplemental User's Guide; University of Alabama.

Summary Mega-site approach for groundwater protection in the port of Rotterdam: application of iMOD-WQ and HydroConnect

This paper describes the application of two recent software innovations within the context of a large groundwater management program for the port of Rotterdam, where, due to intensive industrial activities, soil and groundwater have become contaminated. As part of a groundwater management strategy which aims at moving away from individual problem ownership towards an approach of shared responsibility, the groundwater flow and solute transport model CARROT has been developed to analyse risks and benefits of the new approach and to estimate the necessity and effectiveness of remediation measures. The two software innovations discussed in the paper are iMOD-WQ and HydroConnect. iMOD-WQ stands for iMOD-Water Quality, and entails a merger of SEAWAT, MT3DMS and RT3D that is able to read and write iMOD formats. In combination with the use of a runfile, iMOD-WQ extends the advantages of the iMOD modelling philosophy of easy clipping of model extents and scaling of input data to the worlds of density dependent and solute transport modelling. HydroConnect is a graphical interface, based on the open-source workflow manager VisTrails, with a module (FileSync) for version control that is efficient for large datasets. Within CARROT, HydroConnect is currently predominantly used as a workflow and scenario manager, assisting model users by predefining, standardizing and automating the steps to be taken from flow model via transport model to visualization of results. The possibility of version control, as offered by HydroConnect, may be used in a later stage.

Auteurs

GIJS JANSSEN

Deltares, Utrecht

Gijs.Janssen@Deltares.nl

JARNO VERKAIK

Deltares, Utrecht

Gijs.Janssen@Deltares.nl

JOHAN VALSTAR

Deltares, Utrecht

Gijs.Janssen@Deltares.nl

ANNEMIEKE MARSMAN

Deltares, Utrecht

Gijs.Janssen@Deltares.nl

SOPHIE VERMOOTEN

Deltares, Utrecht

Gijs.Janssen@Deltares.nl

JAN-WILLEM MEERTENS

Deltares, Utrecht

Gijs.Janssen@Deltares.nl

BERT DE DOELDER

Gemeente Rotterdam, Rotterdam

br.dedoelder@Rotterdam.nl