

## Memo

<b>Datum</b> 28 september 2022	<b>Ons kenmerk</b> 11207314-007-BGS-0001	<b>Aantal pagina's</b> 1 van 6
<b>Contactpersoon</b> Huite Bootsma Hendrik Kok André Blonk	<b>Doorkiesnummer</b> +31(0)88 335 7262	<b>E-mail</b> Huite.Bootsma@deltares.nl Hendrik.Kok@deltares.nl
<b>Onderwerp</b> Versneld rekenen binnen MODFLOW 6		

## 1 Inleiding

MODFLOW 6 is de huidige rekenkern van MODFLOW, gereleased door de USGS. Met deze rekencode kan alleen met  $Kv$  en  $Kh$  worden gerekend<sup>1</sup>. Dit betekent dat scheidende lagen expliciet (als actieve laag) in de modelschematisatie dienen te worden opgenomen. Bij een model waarin elk watervoerend pakket een eigen modellaag heeft betekent dit grofweg een verdubbeling (minus de laatste scheidende laag) van de rekenlast.

In de voorgaande MODFLOW-versies werd altijd met een weerstand gerekend voor de verticale conductance tussen modellen. In deze weerstand kon de aanwezigheid van een scheidende laag worden verdisconteerd, zonder dat deze expliciet in het model was opgenomen. Hierdoor kon gemakkelijk quasi-3D worden gerekend, wat effectief betekent dat alleen de watervoerende lagen expliciet zijn opgenomen in de modelschematisatie. Op basis van de Depuis-Forgheimer aanname kan immers worden gesteld dat de horizontale stroming in een scheidende laag verwaarloosbaar is. Hierdoor is het valide om deze te schematiseren middels een verticale 'lekterm' tussen de modellen. Omdat deze aanname - zeker voor regionale Nederlandse modellen - vaak valide is, is binnen dit TKI-deelproject een methode ontwikkeld waarmee scheidende lagen weer middels een verticale lekterm tussen de actieve modellen kan worden geschematiseerd, om berekeningen van grondwater (kwantiteit) in MODFLOW 6 sneller uit te kunnen voeren.

Dit TKI deelproject is tot stand gekomen in samenwerking tussen TAUW, Rijkswaterstaat en Deltares, en maakt onderdeel uit van het TKI project conceptuele modelontwikkeling t.b.v. NHI<sup>2</sup> (TKI project DEL143). In dit TKI-project wordt in een consortium<sup>3</sup> van kennisinstututen, publieke en private partners samengewerkt aan nieuwe concepten en deelmodules voor het NHI en de Waterwyzers. Dit is anticiperend op recente ontwikkelingen, zoals het beschikbaar komen van een nieuwe versie van MODFLOW 6, hier verder geduid als MF6.

---

<sup>1</sup> Vaak wordt de term 3D gebruikt. Of er echt 3D of quasi-3D wordt gerekend is echter uiteindelijk ook afhankelijk van de verticale discretisatie die wordt gekozen in de modelschematisatie.

<sup>2</sup> NHI staat voor het Nederlands Hydrologisch Instrumentarium, de hydrologische gereedschapskist van data en software voor waterbeherend Nederland.

<sup>3</sup> De specifieke partijen die aan dit deelproject hebben gewerkt zijn TAUW, Rijkswaterstaat en Deltares. Het hele consortium in het TKI project bestaat uit de waterschappen Limburg, Aa en Maas en Rivierenland; STOWA, ACSG, Rijkswaterstaat, Vitens, Brabant Water, WML, RHDHV, TAUW, SWECO, Witteveen+Bos, KWR, WENR en Deltares.

## 2 Methode

### 2.1 Berekenen van de conductance tussen modellagen

De opgegeven doorlatenheden worden binnen MODFLOW 6 intern omgezet naar conductances tussen de modelcellen en randvoorwaarden. In oudere MODFLOW versies gold voor de verticale verbinding tussen modellagen (BCF-package):

$$C_{n,m} = \frac{A}{c_{n,m}} \quad [1]$$

Hierin is de conductance tussen cel n, m ( $C_{n,m}$ ) in  $\frac{m^2}{d}$  voor een gespannen situatie, het doorstomende oppervlak (A) in  $m^2$  en de weerstand (c) in dagen.

Binnen MODFLOW 6 wordt de conductance tussen de modellagen op de volgende wijze berekend (NPF-package):

$$C_{n,m} = \frac{A K v_n}{0.5 (top_n - bot_n)} + \frac{A K v_m}{0.5 (top_m - bot_m)} \quad [2]$$

Hierin is de conductance tussen cel n, m ( $C_{n,m}$ ) in  $\frac{m^2}{d}$  voor een gespannen situatie, het doorstomende oppervlak (A) in  $m^2$  de verticale doorlatendheid (Kv) in  $\frac{m}{d}$ , en de celdikte ( $top - bot$ ) in m.

Uit vergelijking 2 volgt dat het niet zomaar mogelijk is om een scheidende laag weg te laten uit de modelschematisatie. MODFLOW heeft immers de Kv en geometrie van de laag nodig om de juiste conductance te kunnen berekenen.

### 2.2 Mogelijkheden voor het verdisconteren van de weerstand uit scheidende lagen

Om een scheidende laag weg te kunnen laten uit de modelschematisatie, dient de weerstand te worden verdisconteerd in de door MODFLOW, intern berekende conductance. Dit kan op twee manieren die in deze paragraaf worden toegelicht.

#### 2.2.1 Aanpassen van de verticale doorlatendheid

Een mogelijkheid is het verdisconteren van de weerstand uit de scheidende laag in de parametrisatie van de watervoerende modellagen. Het lastige hieraan is dat de 'fictieve Kv' (K') zo gekozen dient te worden dan zowel de weerstand aan de boven- als de onderzijde van de modellaag juist worden berekend. Dit is alleen mogelijk middels het opstellen van een stelsel van vergelijkingen waarin alle K' van de lagen worden opgenomen. TAUW heeft eind 2021 in proefberekeningen aangetoond dat hiermee de juiste weerstanden worden berekend. Bij deze methode ontstaan echter bijna altijd negatieve K-waarden (waaruit vervolgens door MODFLOW wel plausible conductances worden berekend) die MF6 niet accepteert als modelinvoer. Om toch te kunnen rekenen dient deze invoercontrole te worden uitgeschakeld en de MF6 code opnieuw te worden gecompileerd. Omdat het aanpassen van de MF6 code vanuit het oogpunt van beheer en onderhoud van de modelcode niet wenselijk is, is binnen deze TKI de volgende aanpak uitgewerkt.

#### 2.2.2 Aanpassen van de berekende conductance via XMI-koppeling

In samenwerking met de USGS heeft Deltares een koppeling ontwikkeld die het mogelijk maakt om andere modellen direct te koppelen met MODFLOW. Met deze XMI-koppeling kan op elk moment van de modelrun uitwisseling van en naar het MODFLOW model plaatsvinden. Deze koppeling is onderdeel van de officiële MF6 release en behoeft dus geen aanvullend onderhoud.

Binnen dit TKI-project is het middels deze XMI-koppeling mogelijk gemaakt om scheidende lagen weg te laten uit de modelschematisatie. Om de methode te kunnen beschrijven zal eerst kort worden toegelicht op welke wijze MF uiteindelijk berekeningen uitvoert op basis van de inputparameters.

De belangrijkste taak van MODFLOW is om op basis van het opgegeven rekennetwerk, parameters en randvoorwaarden de stromingsvergelijking op te stellen in matrixvorm:

$$A * x = b \quad [3]$$

Hierin is A de coëfficiëntenmatrix, x de stijghoogtevector en b de fluxenvector. Vervolgens wordt de solver gevraagd om een stijghoogte uit te rekenen (x) voor de situatie waar:

$$A * x - b = 0 \quad [4]$$

In de coëfficiëntenmatrix bevat alle conductances tussen de cel-naar-cel connecties alsmede die naar randvoorwaarde als RIV en GHB. Met de XMI-koppeling wordt deze coëfficiëntenmatrix aangepast<sup>4</sup> zodat daar de conductances komen te staan die zijn berekend op basis van weerstanden.

Om dit te kunnen doen is het 'Dupuit Forchheimer Simulaton' Python-script ontwikkeld.

Binnen dit script wordt de simulatie op de volgende wijze uitgevoerd:

- 1- MODFLOW laten initialiseren met een quasi-3D schematisatie waarin weerstanden worden opgegeven in plaats van de verticale doorlatendheid (K33). MODFLOW berekent op basis van de opgegeven weerstanden nu de 'verkeerde' conductances in de coëfficiëntenmatrix.
- 2- Via de XMI-koppeling worden de opgegeven weerstanden uitgelezen uit het werkgeheugen van MODFLOW en vertaald naar conductances middels vergelijking 1. Deze nieuwe conductances worden in de coëfficiëntenmatrix ingebracht waarna MODFLOW vervolgens gaat rekenen.
- 3- Deze actie hoeft alleen aan het begin van de rekenperiode te worden uitgevoerd omdat MF deze conductances niet herformuleert wanneer:
  - a. alleen met horizontale anisotropie wordt gerekend (alleen de hoek (angle) 1 is gedefinieerd).
  - b. bij freatisch rekenen niet met de optie 'variable cv' wordt gerekend.
- 4- De modeluitvoer kan worden uitgelezen via iMOD-python.

Om de hierboven beschreven methode uit te voeren waren de volgende zaken van belang:

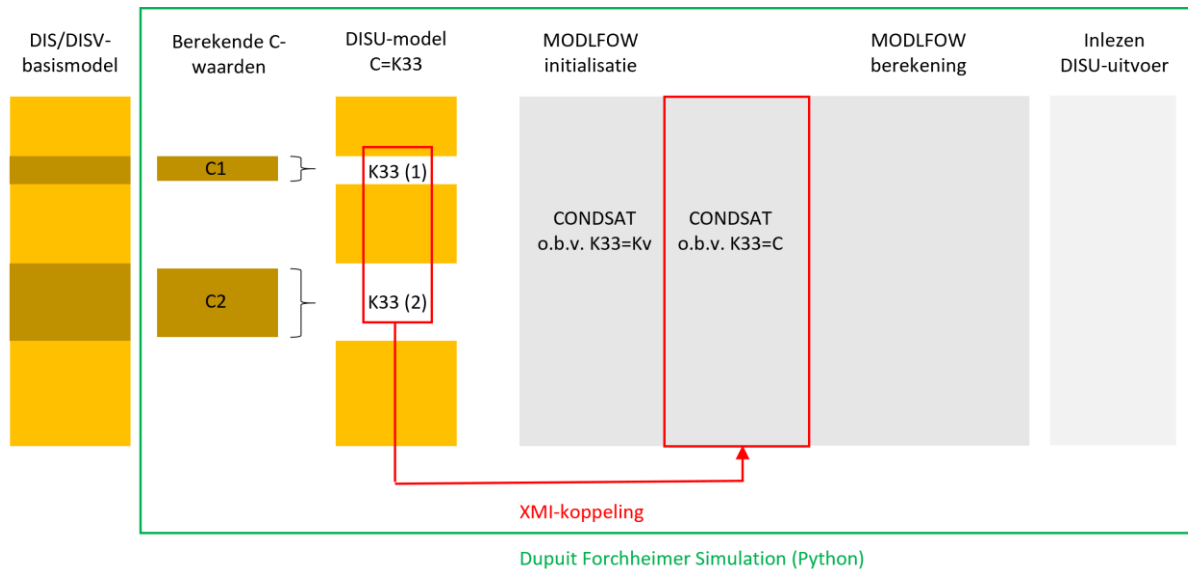
- 1- Binnen de DIS (gestructureerd) en DISV (ongestructureerd) discretisatie is alleen een aansluitende laagschematisatie mogelijk. Omdat in het geval van een quasi-3D benadering dit niet het geval is, is een conversie naar de DISU discretisatie nodig, waarin dit wel mogelijk is. Het basismodel bestaat dus uit een 'volledig 3D' DIS/DISV model waarin de scheidende lagen expliciet zijn opgenomen. Middels het 'Dupuit forchheimer simulation'-script wordt het model omgezet naar een DISU-model met alleen de watervoerende lagen. De weerstand uit de scheidende lagen wordt opgenomen in de K33 van het DISU-model. Via de XMI-koppeling worden deze gebruikt om na initialisatie de juiste conductances in te brengen in de coëfficiëntenmatrix.
- 2- De coëfficiëntenmatrix heeft een andere opbouw dan de traditionele modelinvoer op basis van kolom, rij en laag. De 2D array omvat alle connecties tussen de modelcellen en randvoorwaarden en is symmetrisch. De verbinding tussen cel 1 naar cel 2 is gelijk aan die van cel 2 naar cel 1. Voor efficiëntie slaat MODFLOW daarom

---

<sup>4</sup> Technisch gezien wordt niet de coëfficiëntenmatrix zelf aangepast maar de zogenaamde CONDSAT-matrix die MODFLOW intern gebruik voor het opslaan van de (gespannen) conductances.

alleen de bovenste diagonaal op in het werkgeheugen. De 'ia' en 'ja'- indexen van de matrix worden ook uitgelezen uit het werkgeheugen waarna alle verticale verbindingen in de bovenste diagonaal worden geselecteerd. Aan de hand van deze indexen kan vervolgens de coëfficiëntenmatrix, of specifiek de 'CONDSAT' worden aangepast.

Het hierboven beschreven proces is schematisch weergegeven in figuur 1.



Figuur 1: Schematische weergaven van het Dupuit Forchheimer Simulation script. Van links naar rechts de workflow om vanuit het 3D model een quasi 3D model te draaien. In rood is het proces via de XMI-koppeling weergegeven.

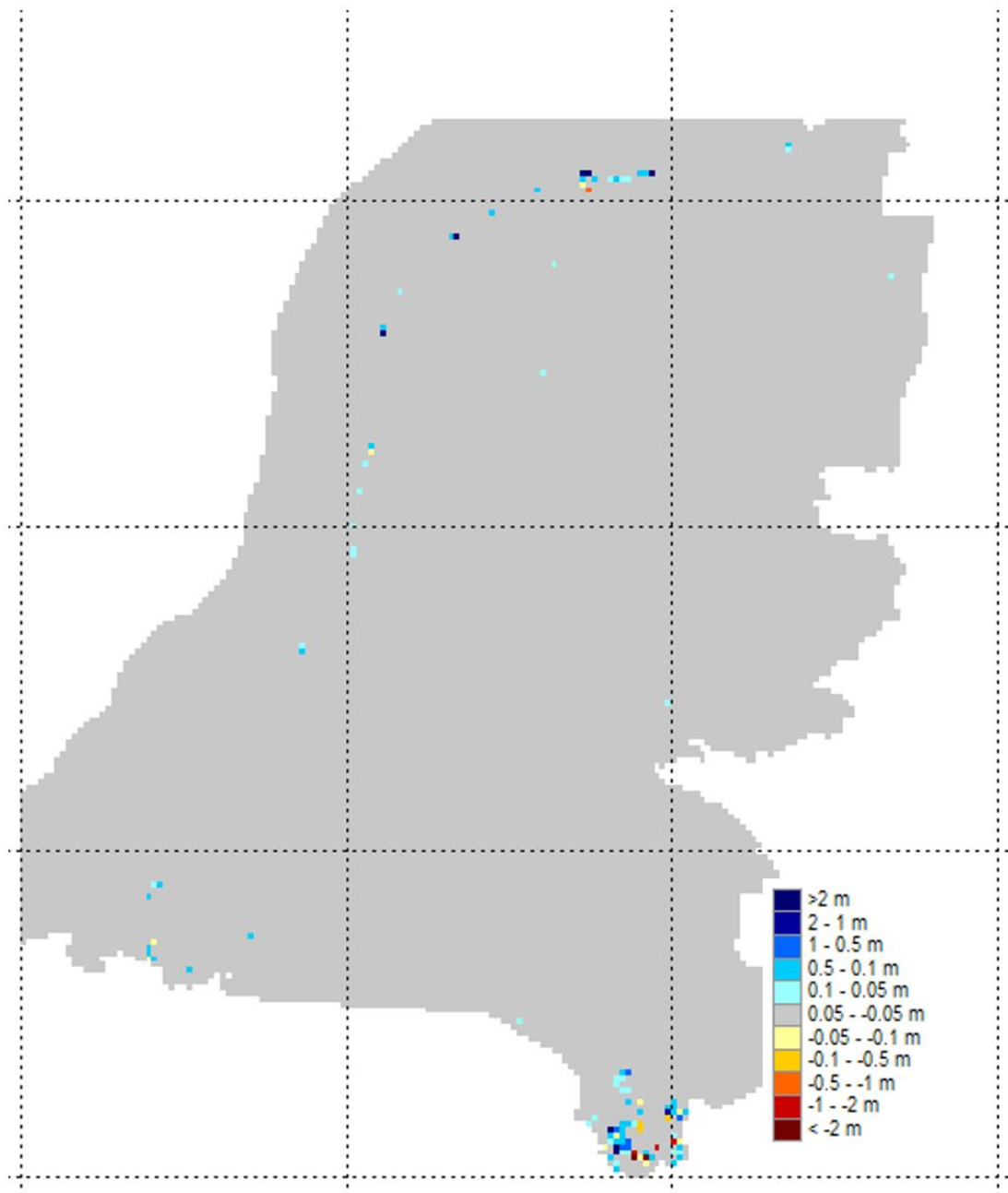
### 3 Resultaat

Binnen dit TKI-deeltraject zijn verschillende benchmarks uitgevoerd om de opgestelde logica in het script te testen en om de versnelling te kunnen aantonen. In deze notitie wordt de niet-stationaire benchmark van het LHM toegelicht. Dit betreft de MF6 versie van het LHM met 15 actieve modellagen en 366 dagelijkse tijdstappen (1 jaar rekentijd). Het model zonder de actieve modellagen heeft in totaal 8 actieve modellagen, wat een te verwachten versnelling geeft van ongeveer 1.8 (15/8). De bereikte versnelling was met 1.55 dus iets lager dan verwacht. Dit komt waarschijnlijk doordat het model met minder actieve lagen iets lastiger convergeert. Dit is ook terug te zien in de versnelling die wordt bereikt in de 'solution time'. Deze blijft achter bij die van de 'formulation time'. De rekentijden zijn samengevat in tabel 1.

Tabel 1: Rekentijden van 2 varianten van LHM (1 rekenjaar), en de gerealiseerde versnelling

	15-laags	8-laags	versnelling
Rekentijd (uur)	6.73	4.33	1.55
Formulation-time (seconden)	5598	3207	1.74
Solution-time (seconden)	16722	11320	1.47

Ook de berekende heads zijn vergeleken met elkaar en laten vergelijkbare resultaten zien. Alleen in het zuiden van Limburg en rond de Waddeneilanden zijn enkele locaties met verschillen duidelijk zichtbaar. Dit wordt mogelijk veroorzaakt doordat de watervoerende lagen van de scheidende lagen missen (relatief grote kD en berging in scheidende lagen). In die gevallen is de Dupuit Forchheimer aanname minder van toepassing. Het verschil tussen de berekende heads zijn weergegeven in figuur 2.



Figuur 2: Verschil tussen de berekende heads van het 15-laags DIS en 8-laags DISU model van LHM, weergegeven voor t=160 dagen.

Bij het afronden van dit project zijn de volgende scripts ter beschikking gesteld:

1. mf6\_dupuit.py waarin alle benodigde logica is opgenomen.
2. simple-two-aquifer.py met hierin een voorbeeldconversie en een voorbeeldberekening,

Beide scripts zijn te vinden op de iMOD-Github van Deltares; te vinden via [iMOD - GitLab](#).

## 4. Conclusie

Binnen dit TKI-deel project is een methode ontwikkeld waarmee - zonder het aanpassen van de MODFLOW 6 source code - een MODFLOW 6 model doorgerekend kan worden zonder actieve scheidende lagen. De methode is getest voor het Landelijke Hydrologische Model (LHM). Voor toepassing van de methode door derden zijn scripts opgeleverd op Github.

Door de doorgevoerde vereenvoudiging van de schematisatie is een versnelling van 1.55 gerealiseerd. Dit blijft iets achter op de theoretisch verwachte versnelling van 1.8. Dit komt waarschijnlijk doordat het vereenvoudigde model iets moeilijker convergeert dan het oorspronkelijke model.

De resultaten voor het oorspronkelijke en vereenvoudigde model zijn grotendeels vergelijkbaar. Alleen op specifieke plekken ontstaan verschillen die waarschijnlijk te maken hebben met de watervoerendheid van de scheidende lagen, die zijn verdwenen in de vereenvoudigde schematisatie.