

Actualisatie zout in het NHI

Toolbox NHI zoet-zout modellering en landelijk model



Actualisatie zout in het NHI

Toolbox NHI zoet-zout modellering en landelijk model

Auteur(s)

Joost Delsman

Gualbert Oude Essink

Sebastian Huizer (Arcadis)

Huite Bootsma

Tobias Mulder

Pieter Zitman

Betsy Romero Verastegui

Actualisatie zout in het NHI

Toolbox NHI zoet-zout modellering en landelijk model




Opdrachtgever	Rijkswaterstaat Water, Verkeer en Leefomgeving
Contactpersoon	Jeroen Ligtenberg
Referenties	
Trefwoorden	

Documentgegevens

Versie	0.1
Datum	13-02-2020
Projectnummer	11205261-003
Document ID	11205261-003-BGS-0001
Pagina's	55
Status	definitief

Auteurs

	Joost Delsman	
	Gualbert Oude Essink	
	Sebastian Huizer	
	Huite Bootsma	
	Tobias Mulder	
	Pieter Zitman	
	Betsy Romero Verastegui	

Doc. Versie	Auteur	Controle	Akkoord	Publicatie
0.1	 Joost Delsman	 Gijs Janssen	 Otto de Keizer	
	Gualbert Oude Essink			
	Sebastian Huizer			
	Huite Bootsma			
	Tobias Mulder			
	Pieter Zitman			
	Betsy Romero Verastegui			

Samenvatting

Deze rapportage beschrijft de totstandkoming van de geactualiseerde Toolbox NHI zoet-zout en de realisatie van de eerste versie van het LHM zoet-zout. De Toolbox NHI zoet-zout bestaat uit geactualiseerde datasets, nodig om een zoet-zout grondwatermodel te realiseren, tools om transparant een zoet-zout grondwatermodel op te bouwen, versnelde software om dichtheidsgedreven grondwaterstroming en zouttransport te berekenen (iMOD-WQ), en een methode om het effect van een stationaire zoet-zoutverdeling op de grondwaterstroming mee te nemen in een grondwater-kwantiteitsmodel.

Door uitvraag van gegevens bij verschillende instanties, gecombineerd met een uitvraag bij Dinoloket, is een grote hoeveelheid gegevens bij elkaar gebracht over de zoet-zout verdeling in grond- en oppervlaktewater in Nederland. Deze gegevens zijn geïnterpoleerd tot landsdekkende gegevensbestanden over de zoet-zout verdeling in grond- en oppervlaktewater in Nederland. Hoewel er een grote hoeveelheid gegevens is verzameld, is de gegevensdichtheid niet altijd groot. Met name op grotere diepten is de gegevensdichtheid nog altijd beperkt, en is daarmee de interpolatie ter plaatse onzeker. Deze onzekerheid is gekwantificeerd in de geïnterpoleerde zoet-zout verdeling.

Met de open-source scripting toolbox imod-python wordt de transparante modelbouw van zoet-zout grondwatermodellen ondersteund. De module bevat functies voor het opbouwen van modellen, schaling, selectie, en analyse van resultaten.

Het LHM zoet-zout is een landsdekkend zoet-zout grondwatermodel, gebaseerd op en consistent met de laatste versie van het LHM kwantiteit. Het LHM zoet-zout is gerealiseerd met behulp van de datasets, tools en software in de Toolbox NHI zoet-zout. De berekende grondwaterstand van LHM zoet-zout is niet volledig gelijk aan de berekende grondwaterstand van LHM kwantiteit. Hiervoor zijn een aantal redenen aan te wijzen. Ten eerste worden door de invloed van de zoet-zout verdeling op grondwaterstroming verschillen geïntroduceerd. Daarnaast ondersteunt iMOD-WQ de in LHM toegepaste methoden voor het berekenen van scheefgestelde lagen, breuken en infiltratie van waterlopen niet. De gerealiseerde versie van LHM zoet-zout is een eerste versie, in 2020 wordt verder ontwikkeld aan het landsdekkende zoet-zout grondwatermodel.

Over Deltares

Deltares is een onafhankelijk kennisinstituut voor toegepast onderzoek op het gebied van water en ondergrond. Wereldwijd werken we aan slimme innovaties, oplossingen en toepassingen voor mens, milieu en maatschappij. We richten ons voornamelijk op delta's, kustregio's en riviergebieden. Omdat het beheer van deze dichtbevolkte en kwetsbare gebieden complex is, werken we nauw samen met overheden, ondernemingen, kennisinstellingen en universiteiten in binnen- en buitenland. Ons motto is 'Enabling Delta Life'.

Als toegepast kennisinstituut zijn we succesvol wanneer onze kennis wordt verzilverd in en voor de samenleving. We stellen hoge eisen aan de kwaliteit van onze kennis en adviezen, rekening houdend met nieuwe wetenschappelijke inzichten, maar ook met de gevolgen die onze adviezen hebben voor milieu en samenleving.

Al onze opdrachten en projecten leveren een bijdrage aan het verstevigen van de kennisbasis. We kijken vanuit een lange termijn perspectief, naar bijdragen voor de oplossingen voor nu. Wij hechten zeer aan openheid en transparantie. Die houding is onder meer terug te zien in het vrij toegankelijk maken van de door Deltares ontwikkelde software en modellen. Open source werkt, is onze vaste overtuiging. Deltares heeft ruim 800 medewerkers en is gevestigd in Delft en Utrecht.

www.deltares.nl

Inhoud

	Samenvatting	5
1	Inleiding	9
1.1	Achtergrond	9
1.2	Activiteiten	10
1.2.1	Toolbox NHI zoet-zout	10
1.2.2	Landsdekkend zoet-zout grondwatermodel LHM zoet-zout	10
1.3	Proces	10
2	Aanpak	12
2.1	Landelijke, actuele datasets voor zout in de ondergrond	12
2.1.1	Uitvraag zoet-zout gegevens	12
2.1.2	Omwerking verzamelde gegevens naar chloride	12
2.1.3	Zachte data	14
2.1.4	Database meetgegevens	18
2.1.5	3D interpolatie chlorideconcentratie in grondwater	19
2.1.6	2D interpolatie chlorideconcentratie in oppervlaktewater	20
2.1.7	Detailering van het lagenmodel	21
2.1.8	Uitbreiding lagenmodel offshore	22
2.2	Ontwikkelen transparante methode voor opbouw zoet-zout modellen	22
2.3	Versnelling reketijden	23
2.4	Ontwikkeling basismodel LHM zoet-zout	23
2.5	Plausibiliteitstoets basismodel LHM zoet-zout	25
2.6	Implementatie effect van variabele dichtheid op stijghoogteverdeling in MODFLOW-2005	25
2.6.1	Mathematische achtergrond van dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming	25
2.6.1.1	Van volumebalans naar massabalans	26
2.6.1.2	Darcy in equivalente zoetwaterstijghoogte	26
2.6.1.3	Aanpassing z-component Darcy	27
2.6.2	Implementatie	27
3	Resultaten	29
3.1	Landelijke, actuele datasets voor zout in de ondergrond	29
3.1.1	Gegevensverzameling chloride in grond- en oppervlaktewater	29
3.1.2	3D interpolatie chlorideconcentratie grondwater	33
3.1.3	2D interpolatie chlorideconcentratie oppervlaktewater	36
3.1.4	Detailering lagenmodel	37
3.1.5	Uitbreiding lagenmodel offshore	38
3.2	Ontwikkelen transparante methode voor opbouw zoet-zout modellen	38
3.3	Versnelling reketijden	39
3.4	Basismodel LHM zoet-zout	39
3.5	Plausibiliteitstoets LHM zoet-zout	40
3.5.1	Toetsing stijghoogten aan meetgegevens	41
3.6	Implementatie effect van variabele dichtheid op stijghoogteverdeling in MODFLOW-2005	43
3.6.1	Verificatie van de implementatie	43
4	Discussie en conclusies	45
5	Referenties	46

A	Nadere invulling plausibiliteitstoets LHM zoet-zout	49
A.1	Inleiding	49
A.2	Plausibiliteit en verwachtingen	49
A.2.1	Definitie plausibiliteit	49
A.2.2	Verwachtingen kwaliteit LHM zoet-zout	49
A.3	Werkwijze Plausibiliteitstoets	50
A.3.1	Vergelijking resultaten LHM zoet-zout op basis van vastgestelde criteria	50
A.3.2	Expertbeoordeling resultaten LHM zoet-zout voor huidige situatie en scenario's	51
A.3.3	Vastlegging	52
A.4	Toetsingscriteria	52
A.4.1	Freatische grondwaterstanden	52
A.4.2	(Diepe) stijghoogten	53
A.4.3	Zoutvrachten	54
A.4.4	Gemiddelde (totale) kwelflux in (water)balansgebieden	55

1 Inleiding

1.1 Achtergrond

Zoete grondwatervoorraden in Nederland worden al sinds mensenheugenis effectief benut voor drinkwater, landbouw en industriële doeleinden. Ondergrondse activiteiten nemen echter gestaag toe. Te denken valt aan warmte-koude opslag, ondergrondse waterberging, winning van brak grondwater en brijnlozing in laag Nederland. Tegelijkertijd worden de zoete grondwatervoorraden bedreigd door een versnelde zeespiegelstijging en klimaatverandering (veranderende neerslagpatronen, intensivering piekbuien), terwijl in delen van laag Nederland de bodem in rap tempo daalt. Bovenstaande activiteiten en processen zorgen voor een verstoring van de verdeling van zoet-brak-zout grondwater. Het zal leiden tot een toename van de interne verzilting van het zoete grondwatersysteem. Er is daarbij meer zoute kwel in laag Nederland te verwachten, brak grondwater kegelt op onder waterwinputten en (strategische) zoete grondwatervoorraden verkleinen door verzilting, onder andere in de duinen, op de Veluwe en in de Provincie Noord-Brabant.

Om de effecten van klimaatverandering en het menselijk handelen op de interne verzilting van het zoete grondwatervoorraad in beeld te brengen is een nationaal zoet-zout grondwater modelinstrumentarium nodig. Op dit moment bestaan er verschillende regionale zoet-zout modellen, gebaseerd op verschillende uitgangspunten en softwarecodes. Er is daarnaast niet langer een landsdekkend instrumentarium beschikbaar. Door achterstallig onderhoud kan het in 2008 gerealiseerde landsdekkende zoet-zout grondwatermodel al enkele jaren niet meer worden ingezet. Momenteel kunnen daarom geen landsdekkende analyses worden uitgevoerd met betrekking tot de toekomstige verzilting van de ondergrond. In de landelijke analyse van de zoetwatervoorziening (binnen het Deltaprogramma Zoetwater) wordt dan noodzakelijkerwijs ook nog teruggevallen op verouderde berekeningen uit 2010, gebaseerd op het oude zoet-zout model en de oude KNMI'06 scenario's. Ook voor de kwantificering van de effecten van een versnelde zeespiegelstijging op zoutvrucht en watervraag, effecten van een veranderend peilbeheer van het IJsselmeer, de duurzaamheid van de Strategische Grondwater Voorraden, de hydrogeologische haalbaarheid van grootschalige ondergrondse waterberging, en interferenties warmte-koude opslag en ondergrondse waterberging, is een actueel en betrouwbaar zoet-zout grondwatermodel nodig.

Het Nederlands Hydrologisch Instrumentarium (NHI) is de verzameling van software en open data voor het ontwikkelen van grondwater- en oppervlaktewatermodellen voor Nederland op landelijke en regionale schaal. Het NHI is bedoeld om de kennis van specialisten bij waterbeheerders, instituten en adviesbureaus te bundelen om te komen tot kwalitatief goede instrumenten en data. Binnen het KPP project MA10 2019 - Beheer en onderhoud LHM 2019 wordt de landelijke toepassing van het NHI – het Landelijk Hydrologisch Model (LHM) – beheerd en onderhouden en op onderdelen verbeterd en vastgelegd in een nieuwe versie van het LHM. Daarnaast wordt vanuit het LHM een bijdrage geleverd aan beheer en onderhoud van het NHI, waar naast RWS ook VEWIN, PBL, STOWA en waterschappen aan bijdragen. Het project Actualisatie Zout in NHI is een onderdeel van dit overkoepelende KPP project.

1.2 Activiteiten

Binnen het project Actualisatie Zout in NHI zijn twee hoofdactiviteiten uitgevoerd.

1.2.1 Toolbox NHI zoet-zout

De Toolbox NHI zoet-zout bestaat uit geactualiseerde datasets, nodig om een zoet-zout grondwatermodel te realiseren, tools om transparant een zoet-zout model op te bouwen, versnelde software om dichtheidsgedreven grondwaterstroming en transport te berekenen (iMOD-WQ parallel), en een methode om het effect van een stationaire zoet-zoutverdeling op de grondwaterstroming mee te nemen in een grondwater-kwantiteitsmodel. De Toolbox NHI zoet-zout is vrij beschikbaar en kan worden gebruikt om willekeurige (regionale danwel landsdekkende) zoet-zout grondwatermodellen van (een deel van) Nederland op te bouwen.

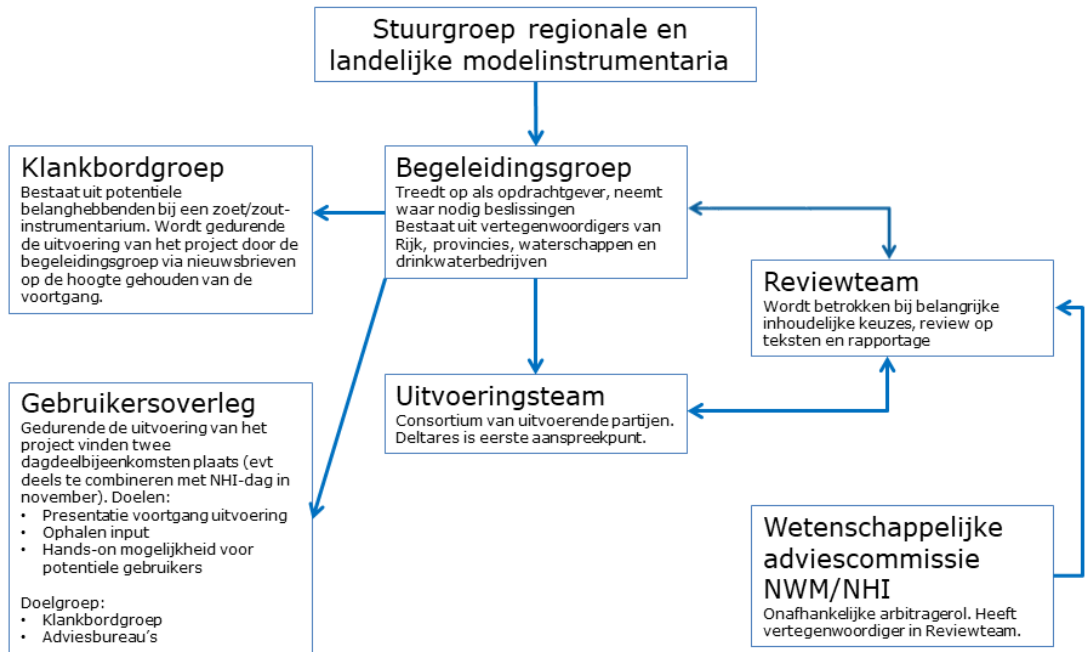
1.2.2 Landsdekkend zoet-zout grondwatermodel LHM zoet-zout

Op basis van de datasets, tools en software in de Toolbox NHI zoet-zout is een landsdekkend zoet-zout grondwatermodel (LHM zoet-zout) ontwikkeld. Met de realisatie van een LHM zoet-zout worden de belangrijkste aanbevelingen van de uitgebreide evaluatie van de berekening van zout in het LHM (de Louw et al., 2014) uitgevoerd. In eerdere LHM-versies zijn reeds aanbevelingen over de verbetering van de inpassing van TRANSOL uitgevoerd (Hoogewoud et al., 2015).

1.3 Proces

Het proces rond dit project is vormgegeven zoals afgebeeld in Figuur 1.1. Hierbij zijn verschillende rollen / groepen onderscheiden:

- Het NHI Programmateam is formeel opdrachtgever van het project.
- Voor dit project is een specifieke Begeleidingsgroep geformeerd, die als gedelegeerd opdrachtgever het aanspreekpunt is voor het Uitvoeringsteam. De Begeleidingsgroep neemt waar nodig beslissingen over de projectuitvoering. De Begeleidingsgroep bestaat uit vertegenwoordigers van Rijk, provincies, waterschappen en drinkwaterbedrijven. De Begeleidingsgroep wordt inhoudelijk ondersteund door het Reviewteam.
- Het project wordt uitgevoerd door een Uitvoeringsteam, getrokken door Deltares. Andere partij in het Uitvoeringsteam is Arcadis.
- Het Reviewteam fungeert als wetenschappelijke begeleidingscommissie, en wordt betrokken bij belangrijke inhoudelijke keuzes in het project.
- De Klankbordgroep bestaat uit potentiële belanghebbenden bij een nationaal zoet-zout grondwatermodelinstrumentarium, zoals waterschappen en drinkwaterleidingbedrijven. De Klankbordgroep wordt tijdens het project door de Begeleidingsgroep actief geïnformeerd over de voortgang en resultaten van het project.
- Het Gebruikersoverleg bestaat uit een groter publiek met mogelijk geïnteresseerden in zoet-zout grondwater. Het Gebruikersoverleg wordt op de hoogte gehouden van het project tijdens twee dagdeelbijeenkomsten, door uitingen op de website NHI en presentaties op gelegenheden als de Kennisdag Zoetwater en de NHI-dag.



Figuur 1.1 Opzet proces rond project NHI zoet-zout

2 Aanpak

2.1 Landelijke, actuele datasets voor zout in de ondergrond

2.1.1 Uitvraag zoet-zout gegevens

Informatie over de saliniteit van grond- en oppervlaktewater kan op verschillende manieren worden verkregen. Naast chemische analyse van monsters van grond- en oppervlaktewater kan de geleidbaarheid van de ondergrond met verschillende geofysische meettechnieken worden vastgesteld. Dit geeft een goede indruk van de saliniteit van het grondwater.

De volgende meetgegevens zijn opgevraagd:

- chloride analyses grond- en oppervlaktewater
- geofysische metingen van geleidbaarheid / weerstand van de ondergrond
 - zoutwachters
 - boorgatmetingen
 - electrical cone penetration tests
 - vertical electrical soundings
 - airborne EM metingen
 - prikstokmetingen
- modelresultaten chloride in oppervlaktewater

Zoet-zout meetgegevens zijn bij verschillende instanties beschikbaar. Via Dinoloket worden veel metingen ontsloten. Recente meetgegevens bevinden zich echter nog veelal bij de verschillende opdrachtgevende instanties. Naast Dinoloket zijn er nog enkele initiatieven om waterkwaliteitsdata centraal te ontsluiten, zoals het waterkwaliteitsportaal.nl, maar ook deze dekken niet alle verzamelde gegevens. Meetgegevens over saliniteit in grond- en oppervlaktewater zijn daarom opgevraagd bij Dinoloket, Rijkswaterstaat, waterschappen, provincies, drinkwaterbedrijven en het waterkwaliteitsportaal. Daarnaast is in verschillende projecten bij Deltares gemeten aan grondwatersaliniteit, deze gegevens zijn zoveel mogelijk toegevoegd aan de verzamelde database.

2.1.2 Omwerking verzamelde gegevens naar chloride

In dit project is gekozen om de chlorideconcentratie als representant te nemen voor de saliniteit van het water. De verzamelde gegevens bestaan deels uit directe metingen van de chlorideconcentratie. Daarnaast bestaat een belangrijk deel uit metingen die wel iets zeggen over de saliniteit van het grondwater, maar niet één-op-één te vertalen zijn in een chlorideconcentratie van het grondwater.

De verzamelde directe metingen van chlorideconcentratie zijn verder verwerkt volgens de volgende stappen:

- Omschrijven naar gelijk gegevensformaat
- Verwijderen van dubbele meetgegevens
- Uitvoeren van eenvoudige checks op gegevens:
 - chloride tussen 0 en 20 g/L
 - x-y coördinaten bevinden zich in Nederland
 - z-coördinaat is op of onder maaiveld
 - waar een tijdserie beschikbaar is zijn outliers verwijderd door:
 - bepalen interkwartiel-afstand ($Q3-Q1$)
 - waarden die zich buiten $[Q1-1.5(Q3-Q1), Q3+1.5(Q3-Q1)]$ bevinden worden als outliers bestempeld en verwijderd uit de dataset

- Van een tijdserie wordt in de 3D interpolatie de mediane waarde genomen, voor het meetmoment (van belang voor latere bepaling variantie) wordt de mediane datum genomen.
- Er is geen tijd-criterium opgelegd om alleen recente metingen mee te nemen. Dit omdat metingen met name op diepte schaars zijn en verziltingsprocessen vaak dermate langzaam gaan, dat ook oude metingen relevante informatie bevatten. De oudste meting stamt uit medio 19^e eeuw. Oude metingen wegen wel minder mee in de interpolatie (zie paragraaf 2.1.5).

Geofysische metingen meten de zogeheten bulk geleidbaarheid van de ondergrond. De bulk geleidbaarheid van de ondergrond kan niet één-op-één worden vertaald in de saliniteit van het grondwater. Kenmerken van de ondergrond (kleigehalte, porositeit, glauconietgehalte), en ook specifieke meetomstandigheden spelen namelijk een belangrijke rol (Delsman et al., 2018; Revil et al., 2017). De vertaling van bulk geleidbaarheid naar geleidbaarheid van het grondwater is met name problematisch in kleiige afzettingen en glauconiethoudende zanden.

Voor omwerking naar een chlorideconcentratie in het grondwater is daarom de volgende pragmatische procedure gehanteerd:

- Koppel de xy-locatie van de meting aan de ondergrondbestanden GeoTOP en/of REGIS,
- Bepaal op welke dieptetrajecten van de meting sprake is van (niet-glauconiet-houdend) zand in de ondergrond (uitsluiting van klei, veen, en de gehele formaties van Breda en Oosterhout),
- Bepaal alleen voor deze trajecten het elektrische geleidingsvermogen van het grondwater met de volgende formule (Archie, 1942; Revil et al., 2017; Waxman & Smits, 1968):

$$\sigma_b = \frac{1}{F} \sigma_w + \sigma_s,$$

met σ_b de bulk geleidbaarheid van de ondergrond, F de formatiefactor, σ_w de geleidbaarheid van het grondwater, en σ_s de oppervlaktegeleidbaarheid van de bodemdeeltjes. Voor de zandige afzettingen is een formatiefactor van 4 toegepast, een standaardwaarde voor zandige afzettingen in Nederland (Archie, 1942; de Louw et al., 2011), en een oppervlaktegeleidbaarheid van 0.

- Onrealistisch geachte metingen van de bulk resistiviteit worden verwijderd. Dit betreft waarden van de bulk resistiviteit buiten het interval 0.5 – 250 Ohmm.
- Vertaal de geleidbaarheid van het grondwater in een chlorideconcentratie, door eerst de geleidbaarheid van het grondwater te corrigeren naar 25 °C en daarbij een grondwatertemperatuur van 11 graden aan te nemen. Pas vervolgens de volgende formule toe (de Louw et al., 2011):

$$[Cl] = 0.36\sigma_{w,25^\circ C} - 0.45,$$

met $[Cl]$ de chlorideconcentratie van het grondwater in g/L, en $\sigma_{w,25^\circ C}$ de geleidbaarheid van het grondwater bij 25 °C.

Zoutwachters zijn voornamelijk niet meegenomen. Dit omdat het relatief weinig metingen betreft, waarvan bovendien de grondwatergeleidbaarheid slechts bij benadering kan worden bepaald.

In de FRESHEM-methode (Delsman et al., 2018) worden helikopter-metingen van totale bodemgeleidbaarheid omgewerkt tot een inschatting van de chlorideconcentratie van het grondwater. Hierbij wordt rekening gehouden met de onzekerheden in de verschillende stappen. De resulterende waarde en onzekerheidsschatting wordt in dit project direct overgenomen.

De verschillende meetgegevens kennen elk een eigen (meet)onzekerheid. Deze onzekerheid komt voort uit de meetonzekerheid van het meetinstrument, onzekerheden in het gebruikte ondergrondmodel voor inverteren (bij VES en AEM metingen), of onzekerheden in de vertaling van bulk resistiviteit naar chlorideconcentratie van het grondwater. Voor chlorideconcentratie analyses waarvan een tijdserie beschikbaar is, is voor deze tijdserie gekeken naar de variatie van de meetwaarden. Verder is in het FRESHEM project de onzekerheid in de verschillende stappen van meting tot chlorideconcentratie gekwantificeerd (Van Baaren et al., 2018; Delsman et al., 2018). Voor de overige metingen is dit niet het geval. Voor deze overige metingen geldt dat de grootste verschillen in onzekerheid aanwezig zijn tussen verschillende typen meetgegevens. De verschillende typen meetgegevens verschillen immers in hoe direct ze de chlorideconcentratie kunnen vaststellen. Er is daarom een vaste waarde aangenomen voor de onzekerheid per meettype. Deze onzekerheid is vastgesteld door met een Monte-Carlo analyse bovenstaande stappen te doorlopen. De aangenomen varianties worden weergegeven in Tabel 2.1.

Tabel 2.1 Aangenomen variantie per gegevenstype

Gegevenstype	Standaarddeviatie (g/L)
Chloride analyse	Variërend per meetlocatie, volgend uit tijdserie. Minimale waarde 0.2.
Boorgatmeting	1.2
Elektrical cone penetration tests	1.2
Vertical electrical soundings	5.0
SlimFlex meting	1.2
Airborne EM metingen, geen FRESHEM	5.0
Prikstokmetingen	1.2
FRESHEM	Variërend per meetlocatie, volgend uit FRESHEM methode

De metingen zijn op zeer uiteenlopende momenten verricht, variërend van heel recent tot midden 19^e eeuw. De ouderdom van de meting is tot uitdrukking gebracht in de variantie door de aangenomen varianties te vermenigvuldigen met een factor die lineair toeneemt van 1 voor metingen recenter dan 2000, tot 10 voor metingen uit 1900.

2.1.3 Zachte data

Naast de grote hoeveelheid aan meetgegevens die beschikbaar is, is er ook additionele kennis over de ligging van zoet en zout grondwater. Deze kennis kan van waarde zijn in de interpolatie, door bijvoorbeeld informatie te geven in gebieden en op dieptes die maar zeer beperkt worden gedekt door meetgegevens. Ervaring van eerdere interpolaties van chlorideconcentraties in het grondwater (Delsman, 2019) laat zien dat door de afwezigheid van meetgegevens in de Noordzee, interpolatie van zoete meetgegevens op land bijvoorbeeld kan leiden tot de interpolatie van zoet water tot ver buiten de kust. Ook kan de beperkte beschikbaarheid van meetgegevens op grote diepte leiden tot een ongewilde verzoetingstrend. Dit ondanks dat we weten dat grondwatervoorraden onder de Noordzee grotendeels zout zijn, en ook op grotere diepte in Nederland geen verzoeting plaatsvindt.

Een manier om dergelijke kennis mee te nemen, is het definiëren van ‘zachte data’. Hierbij worden noties als ‘onder de Noordzee zout’ en ‘op diepte zout’ vertaald naar fictieve meetgegevens die mee worden geïnterpoleerd.

Zachte data is op twee manieren opgenomen:

1 Zachte data zeewaarts

Van de kust tot ongeveer 20 kilometer zeewaarts, is elke 10 km² een verticale raai van fictieve meetpunten geplaatst, met de heersende chlorideconcentratie in het oppervlaktewater. Meetpunten zijn geplaatst aan de oppervlakte, en elke 50 m diepte tot 400 m diep.

2 Zachte data landinwaarts

Landinwaarts is gebruik gemaakt van de volgende databestanden:

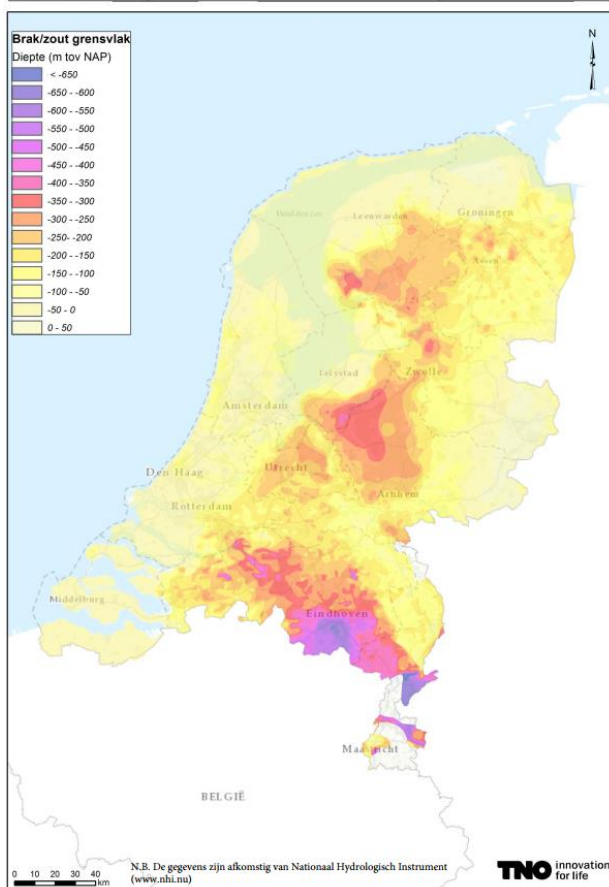
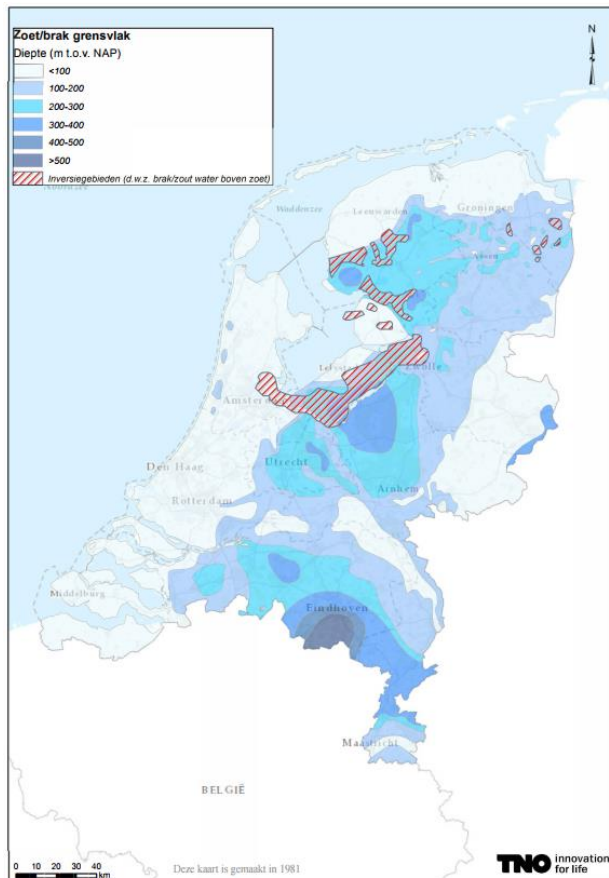
- TNO kaart 'zoet-brak grensvlak' (TNO-GDN, 2020) (150 mg/L, Figuur 2.1 links),
- TNO kaart 'brak-zout grensvlak' (TNO-GDN, 2020) (1000 mg/L, Figuur 2.1 rechts),
- Maximale zee-invoed gedurende het Holoceen (Figuur 2.2),
- REGIS II.2, voorkomens van origine mariene kleilagen.

Bij het vervaardigen van de TNO grensvlakkaarten is overigens deels gebruik gemaakt van zoet-zout data die ook nu in het onderhavige project worden meegenomen.

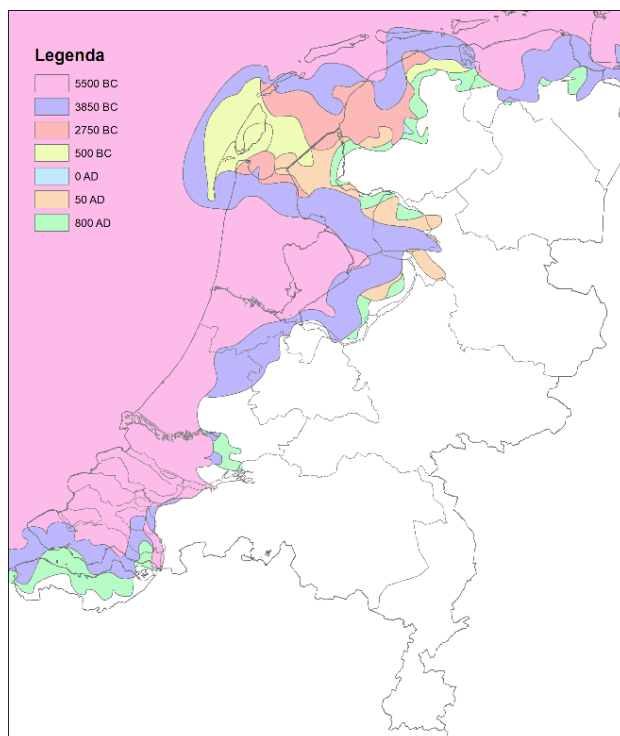
Vervolgens is vanaf de geohydrologische basis van NHI naar beneden gekeken:

- Ligt het 'zoet-brak grensvlak' onder de geohydrologische basis, dan wordt een fictief meetpunt gezet op de ligging van het 'zoet-brak grensvlak' met concentratie 0.15 g/L.
- Ligt het 'zoet-brak grensvlak' niet, maar het 'brak-zout grensvlak' wel onder de geohydrologische basis, dan wordt een fictief meetpunt gezet op de ligging van het 'brak-zout grensvlak' met concentratie 1 g/L.
- Waar geen van beide grensvlakken onder de geohydrologische basis aanwezig is, terwijl de locatie zich binnen de Holocene maximale zee-invoed bevindt, dan wordt een fictief meetpunt gezet op de diepteligging van de geohydrologische basis, met concentratie 18 g/L.
- Waar geen van beide grensvlakken onder de geohydrologische basis aanwezig is, terwijl de locatie zich buiten de Holocene maximale zee-invoed bevindt, dan wordt een fictief meetpunt gezet op de top van de bovenste kleilaag van mariene origine (REGIS II.2, Vernes & Van Doorn (2005)) onder de geohydrologische basis, met concentratie 18 g/L.
- Geldt geen van bovenstaande condities, dan wordt een fictief punt met concentratie 18 g/L neergezet op 1000 m beneden NAP.

Bij deze analyse is nog gebruik gemaakt van het lagenmodel LHM 3.4 (Bos-Burgering et al., 2018).



Figuur 2.1 Diepteligging zoet/brak grensvlak (boven) en brak/zout grensvlak (onder) (TNO-GDN, 2020).

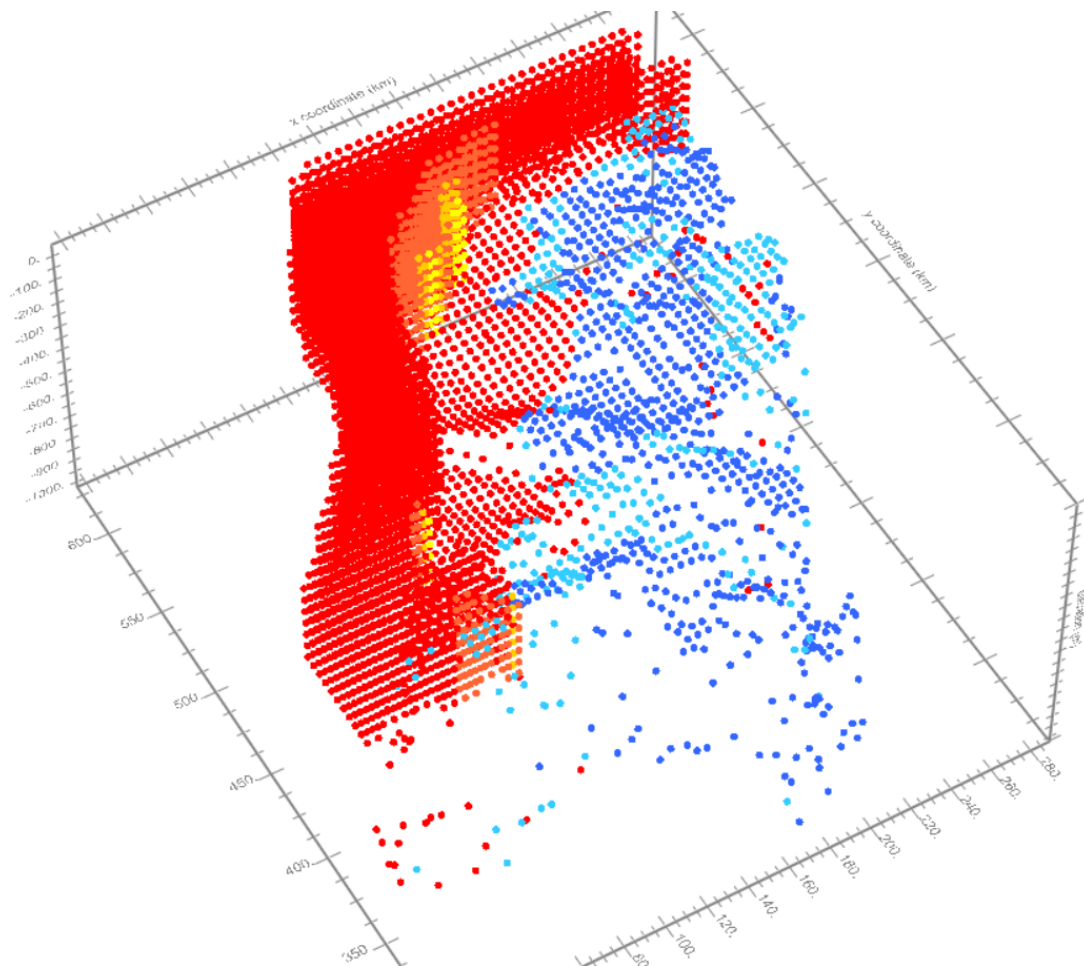


Figuur 2.2 Moment maximale uitbreiding zee-Invloed gedurende het Holoceen (gebaseerd op (Vos, 2015)).

Figuur 2.3 geeft de resulterende ligging van de zachte datapunten. De meegegeven variantie van de zachte metingen varieert per type zachte meting. Op basis van expert-judgement zijn de typen geschaard bij de groep metingen met relatief lage dan hoge variantie uit Tabel 2.1 (resultaat in Tabel 2.2).

Tabel 2.2 Aangenomen variantie per type zachte data.

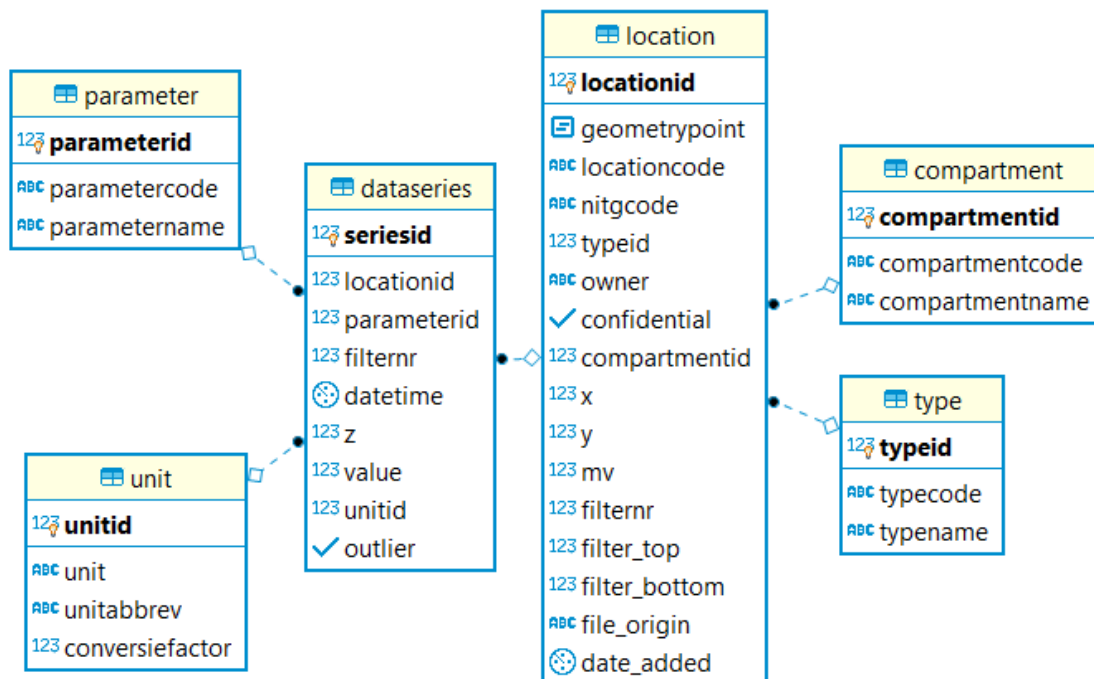
Type zachte meting	Aangenomen standaarddeviatie (g/L)
Onder zee	1.2
Zoet-brak grensvlak	1.2
Brak-zout grensvlak	1.2
Maximale transgressie	5.0
Mariene kleilaag	5.0
Diep - rest	5.0



Figuur 2.3 Geconstrueerde ligging zachte data.

2.1.4 Database meetgegevens

Postgres-PostGIS is een database die speciaal gericht is op ruimtelijke bevestigingen. Binnen Postgres-PostGIS zijn reeds verschillende NHI databases ontwikkeld, zoals de Grondwatermodeldatabank, en de Onttrekkingendatabank. In Postgres-PostGIS is een nieuwe database opgezet om de verschillende verkregen saliniteitsmeetgegevens in op te slaan. Deze database is niet openbaar, en alleen bedoeld om de verzamelde gegevens te kunnen bevestigen voor het ontwikkelen van het 3D chloride beeld van de grondwater chlorideconcentratie. Figuur 2.4 geeft het datamodel van de NHI zoetzout meetgegevens database. Voor instanties die hebben aangegeven dat hun gegevens niet openbaar mogen worden gemaakt, wordt de vlag "confidential" op True gezet. Deze gegevens worden wel gebruikt in de 3D interpolatie, maar niet getoond in bijvoorbeeld figuren.



Figuur 2.4 Gegevensmodel zoet-zout meetgegevens database.

2.1.5 3D interpolatie chlorideconcentratie in grondwater

De 3D verdeling van chlorideconcentratie in het grondwater is een belangrijk basisbestand, dat niet alleen inzicht biedt in de voorkomens van zoet en zout grondwater, maar ook dient als beginconditie van zoet-zout grondwatermodellen. De 3D verdeling van chloride in het grondwater moet worden afgeleid van de beschikbare metingen. Hoewel er in totaal veel metingen beschikbaar zijn, is de dekking niet-uniform, zijn meerdere metingen al minstens 40 jaar oud, en neemt de datadichtheid sterk af met toenemende diepte.

Er bestaat een groot aantal verschillende interpolatietechnieken. Verschillende van deze technieken zijn in het verleden gebruikt om een 3D verdeling van chloride in het grondwater te construeren. In Delsman (2019) worden de verschillende eerdere pogingen om te komen tot een 3D verdeling van chloride in het grondwater geëvalueerd. Gebruikte methoden variëren van een continue Hardy-interpolator (Van der Meij & Minnema, 1999), inverse-distance-weighting (Pebesma, 2009) tot indicator kriging (Delsman et al., 2018). Uit de evaluatie blijkt dat geen van de toegepaste interpolatietechnieken op zichzelf voldoende was voor een bruikbare beginconditie voor zoet-zout grondwatermodellen. Nabewerking bleef altijd nodig, in de vorm van inspeeltijd, en/of het forceren van een trend door het interpolatieresultaat heen. In de evaluatie werd Indicator Kriging gezien als de theoretisch meest geschikte methode.

In deze studie is daarom gebruik gemaakt van de techniek Indicator Kriging. Kriging houdt rekening met zowel de afstand als de clustering van de data, en is de meest gebruikte techniek voor ruimtelijke interpolatie. Chlorideconcentraties zijn evenwel niet normaal verdeeld. Er is sprake van een grote oververtegenwoordiging van zoete metingen, en ook zoute metingen komen relatief vaak voor. Bij Indicator Kriging worden de chlorideconcentraties opgeknipt in een aantal klassen, de zgn. Indicators. Voor iedere klassengrens wordt op de te schatten locatie de kans bepaald dat de chlorideconcentratie boven of onder deze klassengrens ligt. Op deze manier worden zoete en zoute gebieden zo min mogelijk 'versmeerd' tot een brak geheel. Door de berekende kansen vervolgens samen te nemen wordt voor iedere locatie een complete statistische kansverdeling van de chlorideconcentratie samengesteld. In deze techniek kan ook de

meetonzekerheid eenvoudig worden meegenomen, doordat deze onzekerheid mede de kans bepaalt of de chlorideconcentratie van een meting boven of onder een klassengrens ligt.

In de uitgevoerde 3D interpolatie is de meetonzekerheid (Tabel 2.1) meegenomen in het bepalen van de indicator waarden. De geconstrueerde 'zachte data' (paragraaf 2.1.3) is meegenomen in de interpolatie als ware het daadwerkelijke metingen, met de variantie gegeven in Tabel 2.2. Na een verkennende data-analyse is een verticale anisotropie bepaald van 115. Deze anisotropie is meegenomen in de verdere berekeningen. Er is geen horizontale anisotropie toegepast. Het toegepaste variogram is gelijk gehouden over de indicators, en is bepaald op de indicator 3 g/L.

De berekeningen zijn uitgevoerd met de geostatistische software rgstat (Pebesma & Graeler, 2019). Het geconstrueerde bestand kent een horizontale resolutie van 250 x 250 m². De verticale resolutie varieert van 2 m tot een diepte van 20 m onder NAP, tot uiteindelijk 20 m op diepten onder 200 m onder NAP. De kansverdeling van de chlorideconcentratie op elke locatie is gekarakteriseerd met de p25 (het 25 percentiel), de p50 (de mediaan) en de p75 (het 75 percentiel).

2.1.6 2D interpolatie chlorideconcentratie in oppervlaktewater

In Nederland kent oppervlaktewater een grote heterogeniteit op kleine afstanden, door de complexe structuur van polder- en boezemwateren. De beschikbare metingen en modelresultaten zijn daarom met behulp van Ordinary Kriging geïnterpoleerd binnen een polygonen bestand van oppervlaktewateren in Nederland (combinatie bestand ligging netwerkwater in NHI en doorgespoelde polders, opgevuld naar waterschappen voor de overige regionale waterlopen). Eerst is voor de gehele dataset één variogram gefit. Dit is een pragmatische aanpak, op kleinere schaal waren niet altijd voldoende metingen beschikbaar. Vervolgens zijn per polygoon alleen de metingen geselecteerd die zich binnen deze polygoon bevonden. Resultaten per polygoon zijn vervolgens weer samengevoegd tot een dekkend bestand. Het resulterende bestand kent een horizontale resolutie van 50 x 50 m².



Figuur 2.5 Onderscheiden watersystemen waarbinnen is geïnterpoleerd.

2.1.7 Detaillering van het lagenmodel

Voor het maken van zouttransport berekeningen is een grotere verticale detaillering nodig dan aanwezig in een lagenmodel dat is gemaakt voor kwantiteitsmodellen. Tegelijkertijd is het belangrijk om consistentie te bewaren tussen het lagenmodel van een kwantiteitsmodel en het lagenmodel van een daarop gebaseerd kwaliteitsmodel. Randvoorwaarden kunnen eenvoudiger worden opgelegd, resultaten zijn gemakkelijker vergelijkbaar, en toekomstige aanpassingen kunnen eenvoudiger worden overgenomen. Tegelijkertijd stelt zouttransport modellering ook verdere eisen aan het lagenmodel. Zo wordt er niet quasi-3D maar volledig 3D gerekend, omdat ook scheidende (weerstand)lagen expliciet moeten worden onderscheiden. Verder zijn laagdikten van 0 m niet toegestaan, en zorgen zeer dunne lagen voor numerieke problemen (zoals stabiliteitsproblemen en onnodig zeer lange rekentijden).

Voor detaillering van het lagenmodel is daarom een aparte procedure ontwikkeld, die aansluit bij de NHI procedure waarmee het kwantiteit-lagenmodel wordt afgeleid van REGIS. In deze procedure wordt de verticale resolutie met een ruime factor 5 verhoogd, en wordt voldaan aan de gegeven eisen voor zouttransport modellering. De procedure is 'laag-volgend', de scheiding tussen watervoerend pakket en scheidende laag wordt gevolgd in de laagindeling. Tenslotte wordt de connectiviteit binnen een watervoerende pakket altijd gehandhaafd.

De procedure voor detaillering van het lagenmodel werkt als volgt:

- In de quasi-3D modellering van het kwantiteitsmodel zijn scheidende lagen niet expliciet opgenomen, maar als een weerstand opgenomen tussen twee watervoerende pakketten. Als eerste stap worden de scheidende lagen expliciet gemaakt en apart onderscheiden.
- Vervolgens worden een scheidende laag en onderliggend watervoerend pakket tegelijk behandeld. Dit is nodig omdat scheidende lagen niet overal aanwezig zijn. De scheidende laag en watervoerend pakket worden samen onderverdeeld in 5 lagen. (De keuze voor 5 lagen is in de procedure vrij te kiezen). De lagen worden proportioneel toegekend aan de scheidende, danwel de watervoerende laag, waarbij er altijd minimaal één watervoerende laag wordt toegekend. De dikte van de gedetailleerde lagen is vervolgens de dikte van de oorspronkelijke laag gedeeld door het aantal aan de laag toegekende gedetailleerde lagen. Hierbij wordt de connectiviteit van de watervoerende laag gegarandeerd ('watervoerende-laag-cellen' staan altijd horizontaal of verticaal met elkaar in verbinding, wanneer dit alleen schuin het geval zou zijn wordt er een additionele weerstand geïntroduceerd). Er wordt een minimale laagdikte van 1m gehanteerd. Waar de oorspronkelijke laagdikte minder dan 5 m is, wordt het gehele lagenmodel iets uitgerekt. Voor de transmissiviteit en weerstand heeft dit geen gevolgen.
- De transmissiviteit en weerstand van de lagen van het kwantiteitsmodel worden als horizontale en verticale doorlatendheid toegekend aan de gedetailleerdere lagen. Hierbij wordt de transmissiviteit vertaald naar horizontale doorlatendheid en toegekend aan de lagen die tot het watervoerend pakket behoren. De weerstand wordt vertaald naar een verticale doorlatendheid en toegekend aan de lagen die tot de scheidende laag behoren. De verticale doorlatendheid voor de watervoerend pakket lagen en de horizontale doorlatendheid voor de scheidende laag lagen wordt ingevuld door een anisotropie van 0.3 aan te nemen. De op deze manier geïntroduceerde additionele verticale weerstand in de watervoerend pakket lagen wordt verwaarloosbaar geacht ten opzichte van de weerstand in de scheidende laag en niet voor gecorrigeerd.
- De deklaag (laag 1 in kwantiteitsmodel) wordt apart behandeld. Deze laag wordt in maximaal tien lagen opgedeeld. Hierbij wordt de verticale weerstand volledig opgenomen in laag 10. In de lagen 1 – 9 wordt geen verticale weerstand verondersteld (verticale doorlatendheid vaste waarde van 10 m/d). Deze conceptuele keuze is gemaakt om aan te sluiten bij de parametrisatie van lekweerstand in het LHM volgens de methode van De Lange (De Lange, 1999). Hierbij is de lekweerstand zo gedefinieerd, dat de lekweerstand de volledige weerstand bevat die water in een 250 x 250m cel ondervindt bij afstroming

naar ontwateringsmiddelen. Weerstand opnemen tussen de freatische modellagen zou daarmee neerkomen op een dubbeltelling van deze weerstand.

- De diepste twee lagen van het LHM lagenmodel zijn elk opgenomen als twee lagen (watervoerende laag en scheidende laag) in het lagenmodel van LHM zoet-zout. Hier is geen verder onderscheid in gemaakt.

2.1.8 Uitbreiding lagenmodel offshore

De ligging van kleilagen in de ondergrond buiten de kustlijn heeft een belangrijke invloed op de doorwerking van de invloed van de zee landinwaarts (zie bijv. Faneca Sánchez et al., 2012). In gesprek met TNO-GDN is gebleken dat er weinig bekend is over de kustwaartse verbreiding van weerstandsbiedende lagen. In het kader van het toenemende gebruik van de Noordzee komen er naar verwachting in de toekomst wel meer gegevens beschikbaar.

Er is daarom een pragmatische aanpak gevolgd. Hierbij is er voor de weerstandsbiedende lagen waarvoor dit mogelijk is, een koppeling gemaakt tussen de voorkomens op land en verder uit de kust. Verder uit de kust is de verbreiding van enkele ondiepe lagen gekarteerd in het Delfstoffen Informatie Systeem. Het betreft het voorkomen van de Holocene Naaldwijk formatie, en specifiek de Lagen van Velsen en Bergen, en vroeg-Holocene weerstandsbiedende lagen voor de kust van Zeeland.

Van diepere lagen is te weinig bekend om een soortgelijke methode toe te passen. Het bestaande lagenmodel is op grotere diepte geëxtrapoleerd.

2.2 Ontwikkelen transparante methode voor opbouw zoet-zout modellen

Onder de naam imod-python is een open source Python pakket ontwikkeld, gericht op het genereren van model input van iMODFLOW en iMOD-WQ (iMOD-WQ) modellen, en het verwerken en analyseren van modelresultaten.

Python is een flexibele, leesbare, open source programmeertaal, en ideaal voor het schrijven van scripts. Scripts zijn bijzonder geschikt voor grondwatermodellering of data analyse. Een script is een precieze beschrijving van alle bewerkingen die op de data zijn gedaan. Door uitsluitend data via scripts te bewerken, bestaat er een volledig getuigschrift van het gehele modelleerproces. Dit maakt het veel gemakkelijker om fouten op te sporen en te corrigeren. Bovendien is zo'n aanpak bij uitstek reproduceerbaar: mits goed opgezet, kan een modelstudie met een druk op de knop relatief eenvoudig opnieuw worden uitgevoerd.

Globaal bestaat imod-python uit de volgende componenten:

- Modules om iMODFLOW en iMOD-WQ (iMOD-WQ) bestanden te lezen en te schrijven.
- Modules om volledige input van modellen te genereren vanuit Python (vergelijkbaar met FloPy (Bakker et al., 2016) voor regulier MODFLOW).
- Modules voor geografische data: herschalen van celgroottes met specifieke methodes, ruimtelijke interpolaties, verrastering van vector data, herprojectie tussen coördinaatsystemen, etc.
- Modules voor analyse van modelresultaten: specifieke selectie of visualisatie van data. Bijvoorbeeld tools om de waterbalans te analyseren, of problemen in modelperformance op te sporen.

Deze modules zijn niet vanaf nul geschreven, maar maken veelvuldig gebruik van bestaande open-source Python pakketten. De belangrijkste zijn:

- Numpy (Van Der Walt et al., 2011): basis datastructuur voor numerieke arrays in Python,
- Dask (Dask Development Team, 2016): verschaft gereedschappen voor parallele en out-of-core (groter dan geheugen) berekening,

- Pandas (McKinney, 2010): Pandas biedt datastructuren en analysegereedschappen voor data in tabelvorm (bijv. tijdserie-analyse),
- Xarray (Hoyer & Hamman, 2017): Xarray is gebouwd bovenop numpy, dask, en pandas; en biedt datastructuren en gereedschappen om met multi-dimensionale data te werken, alsmede functies om veel gebruikte bestandsformaten te lezen en te schrijven. Assen zijn gelabeld, en kennen hun eigen coördinaten. Dit geeft veel mogelijkheden om op een robuustere en intuïtievare manier om drie- of vier- dimensionale data te werken (bijvoorbeeld: tijd, laag, y, x),
- GeoPandas (Jordahl et al., 2019): geopandas is een uitbreiding van Pandas voor ruimtelijke vector data, en kan bijvoorbeeld gebruikt worden voor het lezen van shapefiles,
- Rasterio (Gillies & others, 2013): rasterio is een python interface voor GDAL (Geospatial Data Abstraction Library), een zeer uitgebreide gereedschapskist primair voor het lezen, schrijven, en bewerken van geografische rasterdata,
- Numba (Lam et al., 2015): numba is een *just-in-time* compiler en zet Python functies om, die normaal gesproken relatief langzaam rekenen, naar geoptimaliseerde machine code. Hiermee komen rekensnelheden in de buurt van Fortran en C,
- Matplotlib (Hunter, 2007): het standaard programma voor visualisatie binnen Python.

Een typisch script in een workflow zal slechts in beperkte mate specifieke imod-python functies gebruiken: de meerderheid van het werk wordt gedaan door functies die reeds beschikbaar zijn in de hier genoemde pakketten. De functies in imod-python vullen bestaande methodes aan, of bieden alternatieven wanneer de standaard methodes niet snel, efficiënt, of gebruikersvriendelijk genoeg zijn. Het doel is om het pakket daarmee relatief lichtgewicht te houden.

Door middel van uitgebreide unittesting (volledig dekkende tests voor kritische code) zijn de procedures en scripts getest. Ontwikkeling van imod-python vindt plaats op een open-source Git server.

2.3 Versnelling rekentijden

Het modelleren van zoet-zout grondwater kent door de koppeling van grondwaterstroming met zouttransport relatief (zeer) lange rekentijden als lange simulatieperiodes worden doorgerekend. Recent is in een samenwerking tussen Universiteit Utrecht en Deltares de softwarecode iMOD-WQ voor specifieke toepassingen geparallelliseerd, waardoor sterk verkorte rekentijden mogelijk zijn (Verkaik et al., 2018). Deze parallelisatie is verder geoptimaliseerd en opgenomen in de recent gereedgekomen iMOD-WQ software. Berekeningen kunnen eenvoudig parallel worden uitgevoerd op rekenclusters. Voor LHM zoet-zout is hiervoor gebruik gemaakt van Amazon Web Services.

Naast parallelisatie kan zouttransport modellering tot ordes worden versneld door slim te kijken naar de gehanteerde discretisatie in relatie tot de vereiste stabiliteitscriteria. Binnen imod-python (de Toolbox NHI zoet-zout) zijn evaluatie-tools beschikbaar gemaakt om mogelijke problemen met rekentijden te onderkennen en op te lossen.

2.4 Ontwikkeling basismodel LHM zoet-zout

Op basis van de gereedgekomen Toolbox NHI zoet -zout en LHM kwantiteit versie 4.0, is een eerste versie van het landelijk zoet-zout grondwatermodel opgezet, het LHM zoet-zout. Het opzetten van het LHM zoet-zout gebeurt in een vastgelegde transparante workflow binnen versiebeheer. In deze workflow zijn consistentiechecks opgenomen om veelgemaakte data- en modelleerproblemen (bijvoorbeeld inconsistente ligging van randvoorwaarden) vooraf te ondervangen.

Een belangrijk uitgangspunt van het LHM zoet-zout is dat het is gebaseerd op en consistent is met het LHM kwantiteit (zie ook het Plan van Aanpak (Delsman & Oude Essink, 2019)). Deze consistentie betreft de modellaag indeling (waarbij de kwantiteit-lagen binnen het LHM zoet-zout

wel verder worden gedetailleerd), en de verschillende randvoorwaarden. Deze consistentie is nodig voor het aanleveren van berekeningsresultaten van LHM zoet-zout (zoutconcentratie aan de onderkant van de deklaag en op grotere diepte, het stationaire dichtheidsveld gebaseerd op de zoet-zout verdeling) aan LHM kwantiteit. De resolutie van het LHM zoet-zout is horizontaal dan ook gelijk aan het LHM kwantiteit (250 x 250 m²).

Met behulp van de Toolbox NHI zoet-zout is:

- een verticaal gedetailleerder lagenmodel afgeleid op basis van het LHM versie 4.0 lagenmodel. Het aantal lagen is uitgebreid tot 40 modellagen. Deze modellagen zijn niet allemaal over heel Nederland actief,
- het geheel aan randvoorwaarden van LHM versie 4.0 toegekend aan het gedetailleerde lagenmodel:
 - RIVER: de 4 riviersystemen (hoofdwater, primair, secundair, tertiair) zijn op basis van hun bodemligging toegekend aan een LHM zoet-zout laag. Deze toekenning is voor de systemen primair, secundair en tertiair beperkt tot de freatische watervoerende lagen 1 – 9. Dit is consistent met het LHM kwantiteit, waar alleen het hoofdwater-systeem door de deklaag heen snijdt. Met behulp van de geïnterpoleerde oppervlaktewater zoutconcentratie is aan de riviersystemen een chlorideconcentratie en dichtheid opgelegd. Het waterpeil en de conductance zijn overgenomen uit LHM versie 4.0. In het LHM kwantiteit wordt een infiltratiefactor toegepast om meer weerstand te modelleren bij infiltratie dan bij drainage. iMOD-WQ, net als de oorspronkelijke SEAWAT code waar iMOD-WQ op is gebaseerd, ondersteunt het gebruik van een infiltratiefactor niet. Er is daarom onderscheid gemaakt in waterlopen die in steady-state infiltreren, en waterlopen die in steady-state draineren. Voor de infiltrerende waterlopen is de conductance vervolgens vermenigvuldigd met de infiltratiefactor.
 - DRAIN: de 3 drainagesystemen zijn op basis van hun bodemligging toegekend aan een LHM zoet-zout laag. De toekenning is beperkt tot lagen 1 – 9, de freatische lagen. De maaiveld drainage is daarbij vast aan de bovenste actieve cellaag toegekend. De conductance is overgenomen uit LHM 4.0.
 - WEL: niet van alle onttrekkingen in LHM kwantiteit is de precieze filterstelling bekend. Waar de filterstelling bekend was, kon de onttrekking direct worden toegekend aan de modellagen waarbinnen de boven- en onderkant van het filter zich bevinden. Waar alleen de LHM kwantiteit modellaag bekend is en de precieze filterstelling niet, is het filter van de onttrekking verondersteld zich te bevinden in de bovenste tien meter van de LHM kwantiteit modellaag. Onttrekkingen worden hierbij niet aan lagen toegekend met een transmissiviteit van minder dan 10 m²/d.
 - RECHARGE: aan LHM zoet-zout is de gemiddelde grondwateraanvulling over de periode 1998-2007 toegekend, zoals deze met LHM 3.4 (modflow-metaswap) langjarig is berekend. Aan de grondwateraanvulling is een vaste chlorideconcentratie van 0.05 g/L opgelegd. Er was niet tijdig een langjarige grondwateraanvulling beschikbaar gebaseerd op LHM 4.0.
 - GHB: de general head boundary van LHM is toegekend aan LHM zoet-zout. In de GHB van LHM is de Noordzee als randvoorwaarde opgenomen. In de opgelegde stijghoogte is een dichtheidseffect opgenomen. Omdat dichtheidscorrectie binnen LHM zoet-zout 'automatisch' wordt toegepast, is de in LHM 4.0 opgenomen correctie verwijderd. De GHB is uitgebreid voor de zeewaartse uitbreiding van LHM zoet-zout. In LHM 4.0 is voor Zuid-Limburg aan de oostrand over een korte afstand een vaste stijghoogte randvoorwaarde opgenomen. Deze is vooralsnog niet opgenomen in LHM zoet-zout.
 - ANI, HFB: zowel horizontale anisotropie (ANI) als breuken (HFB) worden vooralsnog niet ondersteund door de iMOD-WQ runfile. Horizontale anisotropie is met name van belang voor het modelleren van scheefstellingen in de stuwwallen, het modelleren van abrupte doorlatendheidsovergangen speelt vooral rond de Centrale Slenk en Limburg. Deze gebieden zijn overwegend zoet en geen focusgebied voor LHM zoet-zout. Het niet meenemen van deze randvoorwaarden lijkt daarom in deze fase aanvaardbaar.

- het resultaat van de 3D interpolatie van grondwater chlorideconcentratie is opgelegd als de initiële zoet-zoutverdeling,
- de porositeit voor het gehele model gesteld op 0.3,
- de longitudinale en transversale dispersie en moleculaire diffusiecoëfficiënt zijn ingesteld op respectievelijk 1 m, 0.1 m en 0.0001 m²/d.

2.5 Plausibiliteitstoets basismodel LHM zoet-zout

De resultaten van het ontwikkelde basismodel LHM zoet-zout zijn zowel kwantitatief als kwalitatief getoetst op plausibiliteit. Hierbij is op nationale schaal gekeken naar de berekende stijghoogte, fluxen, en zoutvrachten op polderniveau. Berekeningsresultaten van stijghoogten en fluxen zijn vergeleken met LHM kwantiteit. Stijghoogten en zoutvrachten van geselecteerde polders zijn vergeleken met beschikbare metingen op polderniveau. Daarnaast zijn enkele lange termijn scenario's (klimaat, zeespiegelstijging) verkennend doorgerekend en op basis van expertkennis en modelresultaten van regionale zoet-zout modellen geanalyseerd op plausible resultaten.

De aanpak van de plausibiliteitstoets is beschreven in een memo aan de begeleidingscommissie NHI zoet-zout. Deze memo is integraal opgenomen als bijlage A. Voor deze eerste modelversie is een beperkte plausibiliteitstoets uitgevoerd. Resultaten van de huidige situatie zijn daarbij vergeleken met resultaten van een stationaire LHM kwantiteit versie, en stijghoogten zijn getoetst op de in bijlage A opgenomen criteria. De kwalitatieve toetsing door het reviewteam vindt medio maart 2020 plaats en zal apart worden gerapporteerd.

2.6 Implementatie effect van variabele dichtheid op stijghoogteverdeling in MODFLOW-2005

Om het effect van ruimtelijk dichtheidsvariëaties in het grondwater (als gevolg van ruimtelijk variërende zoutgehalten) op de stijghoogteverdeling mee te kunnen nemen in het LHM (NWM-toepassing), is de voor het LHM gebruikte MODFLOW-rekencode aangepast. Deze rekencode betreft een door Deltares aangepaste variant van MODFLOW-2005 (Harbaugh, 2005). De aanpassingen betreffen met name modelkoppelingen met MetaSWAP en Mozart-DM, en de iMOD-functionaliteit.

Voor het inbouwen van dichtheidseffecten is gebruik gemaakt van procedures zoals die zijn opgenomen in de modelcode SEAWAT (Guo & Langevin, 2002), om specifiek te zijn SEAWAT versie 4 (Langevin et al., 2008). SEAWAT is gebaseerd op MODFLOW-2000; een oudere versie van MODFLOW dus dan toegepast binnen iMOD en het LHM. Dat betekent dat SEAWAT niet toepasbaar is binnen het LHM, vooral omdat de modelkoppelingen en de iMOD-functionaliteit ontbreken. Om in het LHM toch dichtheidseffecten te kunnen verdisconteren, zijn de noodzakelijke code-aanpassingen, zoals die in SEAWAT op MODFLOW-2000 zijn toegepast, overgebracht naar MODFLOW-2005.

Naast MODFLOW-2000 bestaat SEAWAT uit de stoftransportcode MT3DMS (Zheng & Wang, 1999). Hierdoor kan SEAWAT de wederzijdse invloed berekenen van veranderingen in de zout-zout/dichtheidsverdeling en de dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming. Voor het LHM wordt echter uitgegaan van een stationaire dichtheidsverdeling; er wordt aangenomen dat de zoet-zoutverdeling niet verandert gedurende de simulaties

2.6.1 Mathematische achtergrond van dichtheidsafhankelijke grondwaterstroming

Vergeleken met de standaard, constante-dichtheidsformulering van grondwaterstroming in MODFLOW, worden de op te lossen vergelijkingen voor grondwaterstroming grofweg op drie manieren aangepast om dichtheidseffecten te verdisconteren:

2.6.1.1 Van volumebalans naar massabalans

In MODFLOW worden de grondwaterstromingsvergelijkingen opgesteld en opgelost op volumebasis; tijdens het oplossen van de vergelijkingen wordt ervoor gezorgd dat voor elke modelcel de volumebalans klopt. In geval van dichtheidsverschillen dient echter een massabalans in plaats van een volumebalans bijgehouden te worden, zie Verg. 1:

$$-\nabla \cdot (\rho \vec{q}) + \bar{\rho} q_s = \frac{\partial(\rho\theta)}{\partial t} \quad (1)$$

waarin:

∇ = de gradiënt operator $\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$

ρ = de dichtheid van het grondwater [ML^{-3}]

\vec{q} = de fluxvector [LT^{-1}]

$\bar{\rho}$ = de dichtheid van het water dat het systeem binnenkomt of verlaat via bronnen/sinks [ML^{-3}]

q_s = de volumetrische stroomsnelheid per eenheidsvolume aquifer vanuit/naar bronnen/sinks [T^{-1}].

θ = de porositeit [-]

t = de tijd [T]

2.6.1.2 Darcy in equivalente zoetwaterstijghoogte

De wet van Darcy zegt dat de grondwaterflux tussen twee punten lineair gerelateerd is aan de drukval tussen die punten. In MODFLOW wordt de wet van Darcy toegepast op basis van *stijghoogtegradiënten*, i.e. het drukverval wordt uitgedrukt als een stijghoogteverval. Dit omdat hydrologen vaak meer gevoel hebben voor stijghoogte (gemeten met peilbuizen) dan met druk. In een grondwatersysteem zonder dichtheidsvariatie hangt de stijghoogtevariatie volledig af van de variatie in druk; druk en stijghoogte kunnen direct naar elkaar omgerekend worden. Als er wel dichtheidsverschillen zijn, hangt de stijghoogtevariatie ook af van deze dichtheidsverschillen. Het stijghoogteverval is dan geen goede maat meer voor het drukverval, en dus ook niet meer als zodanig te gebruiken in de wet van Darcy. Een nieuwe "proxy" is dus nodig voor het drukverval. In SEAWAT wordt hiervoor de zogenaamde "zoetwaterstijghoogte" gebruikt. De zoetwaterstijghoogte is gelijk aan het peil dat in een peilbuis bereikt zou worden indien het water bij het intreden van de peilbuis; als bij magie, zou veranderen in zoetwater. Deze maat voor de druk hangt dus niet af van de dichtheid van het grondwater ter plaatse van het filter van de peilbuis maar hangt, net als de stijghoogte in een systeem zonder dichtheidsverschillen, volledig af van de druk zelf. Het zoetwaterstijghoogteverval kan daarmee als "proxy" voor het drukverval worden gebruikt in de wet van Darcy.

De individuele componenten van de specifieke fluxtensor uit Verg. 1 zien er, ingevuld volgens Darcy, als volgt uit:

Op basis van stijghoogte:

$$q_x = K_x \frac{\partial h}{\partial x}, \quad q_y = K_y \frac{\partial h}{\partial y}, \quad q_z = K_z \frac{\partial h}{\partial z} \quad (2)$$

Op basis van zoetwaterstijghoogte:

$$q_x = K_x \frac{\partial h_f}{\partial x}, \quad q_y = K_y \frac{\partial h_f}{\partial y}, \quad q_z = K_z \frac{\partial h_f}{\partial z} \quad (3)$$

waarin

K_i = doorlatendheid in i -richting [LT^{-1}]

h_f = zoetwaterstijghoogte [L]

De zoetwaterstijghoogte h_f kan worden vanuit de stijghoogte h via:

$$h_f = \frac{\rho}{\rho_f} h - \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} Z \quad (4)$$

waarin Z de hoogte ten opzichte van een referentieniveau (e.g. NAP) is [L].

2.6.1.3 Aanpassing z-component Darcy

Water met een grotere dichtheid ondervindt meer zwaartekracht. Deze naar beneden gerichte kracht beïnvloedt dus de z-component van de wet van Darcy, en deze invloed dient verdisconteerd te worden. Ten opzichte van Verg. 3 verandert q_z daarmee in:

$$q_z = K_z \frac{\partial h_f}{\partial z} + \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \quad (5)$$

Bovenstaande vergelijkingen gelden voor aquifers met een horizontale gelaagdheid. Voor afleidingen voor het complexere geval waarin de primaire doorlatendheidsrichtingen niet samenvallen met de assen van het coördinatensysteem wordt verwezen naar Guo en Langevin (2002).

2.6.2 Implementatie

Bovengenoemde veranderingen ten opzichte van de standaardafleiding van de het op te lossen systeem van vergelijkingen voor reguliere (constante-dichtheids-) grondwaterstroming resulteren in vele aanpassingen van de subroutines in MODFLOW waarin deze vergelijkingen worden opgebouwd. Deze aanpassingen zijn vrijwel een op een overgenomen van SEAWAT. Hiertoe zijn in SEAWAT de variabele-dichtheidsformuleringen (zoals aanwezig in de zogenaamde Variable Density Flow (VDF)-routines vergeleken met de standaardformuleringen (uit de Ground Water Flow (GWF)-routines, en zijn de verschillen geïmplementeerd in de betreffende standaardformuleringen van MF2005 en ondergebracht in afzonderlijke VDF-routines binnen MODFLOW-2005.

Niet alle MODFLOW-2005 packages zijn compatibel gemaakt met het VDF proces. De implementatie beperkt zich tot de packages die binnen LHM gebruikt worden (BAS, BCF, WEL, DRN, RIV, GHB, CHD,RCH) plus de eveneens veel gebruikte packages LPF en EVT. De implementatie komt neer op het toevoegen van een nieuwe package aan MODFLOW-2005, te weten de VDF package, conform de VDF package van SEAWAT. De VDF package van SEAWAT kent een groot aantal instellingen, die door de gebruiker gekozen kunnen worden. Daarbij gaat het vooral om de mate van verwevenheid tussen stroming en transport. Omdat de MODFLOW-2005 implementatie geen transportcomponent kent, zijn de meeste instellingen bij voorbaat vastgesteld en daarom hard geprogrammeerd. Andere opties/instellingen zijn hard geprogrammeerd omwille van de eenvoud. Tabel 2.3 geeft de te kiezen instellingen/parameters van de VDF package in SEAWAT, met daarbij de invulling ervan in de MODFLOW-2005 implementatie. Voor nadere uitleg van de instellingen/parameters wordt verwezen naar Langevin et al. (2008). De VDF package zoals geïmplementeerd in MODFLOW-2005 verlangt als enige verplichte invoer de chlorideconcentraties per stressperiode in gram/L, op te geven als IDF per modellaag. Daarnaast kunnen voor de RIV, GHB en CHD package dichtheidsvelden worden opgegeven, eveneens als IDF per modellaag. Deze worden dan omgezet naar de zogenaamde "auxiliary variable" RIVDEN, GHBDEN en CHDDEN in de respectievelijke MODFLOW invoerbestanden die vanuit de iMODFLOW-runfile gecreëerd worden. De werking van deze "auxiliary variabelen" is geheel conform SEAWAT. Indien geen auxiliary variabelen worden opgegeven wordt een referentiedichtheid van 1000 kg/m³ aangenomen.

Tabel 2.3 Instellingen van de VDF package zoals geïmplementeerd in MODFLOW-2005.

Instelling	Waarde	Omschrijving
MT3DRHOFLG	0	Stroming is losgekoppeld van transport; dit volgt uit het feit dat geen transport wordt berekend
MFNADVFD	1	Keuze voor een "upstream weighted" algoritme voor de berekening van de representatieve dichtheid tussen twee knooppunten
NSWTCPL	-	Niet van toepassing omdat geen transport wordt berekend
IWTABLE	0	Geen toepassing van de "variable density water-table correction"
DENSEMIN	0.0	Geen toepassing van een minimale dichtheid
DENSEMAX	0.0	Geen toepassing van een maximale dichtheid
DRHODC	1.4	Toename van de dichtheid bij eenheidstoename van de concentratie. Berekend als $(1025 - 1000.) / 17.86$, waarbij 17.86 (g/L) de aangenomen chlorideconcentratie van zeewater is en 1025. de dichtheid van zeewater.
INDENSE	2	In het .VDF invoerbestand worden chlorideconcentraties opgegeven per stressperiode, welke intern worden omgerekend naar dichtheden
DENSE	<Invoer>	Dit betreft de op te geven chlorideconcentraties per stressperiode

3 Resultaten

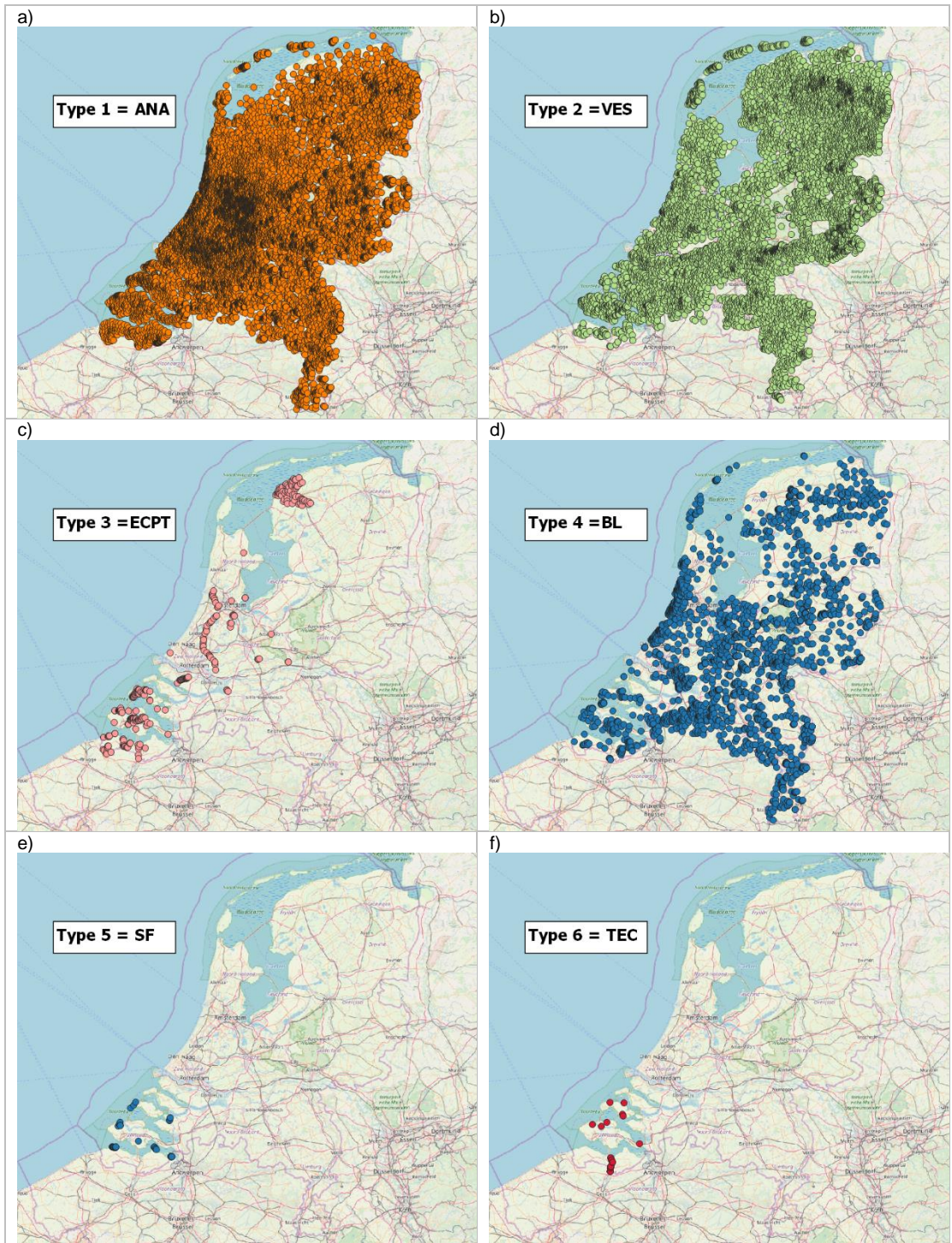
3.1 Landelijke, actuele datasets voor zout in de ondergrond

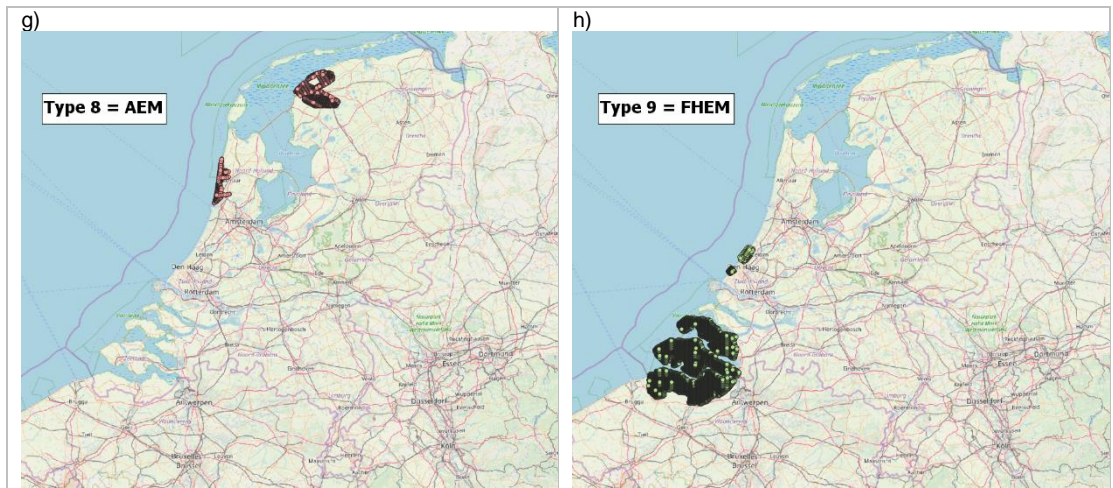
3.1.1 Gegevensverzameling chloride in grond- en oppervlaktewater

Na de gegevensverzameling bestaat de database voor metingen van grondwater-chloride uit meer dan 30000 unieke locaties (x, y). Locaties met meerdere z-coördinaten (meerdere filters of geofysische metingen in de z) tellen als één locatie. De hoeveelheid unieke locaties per gegevenstype is weergegeven in Figuur 3.1.

Tabel 3.1 Hoeveelheid unieke locaties per gegevenstype.

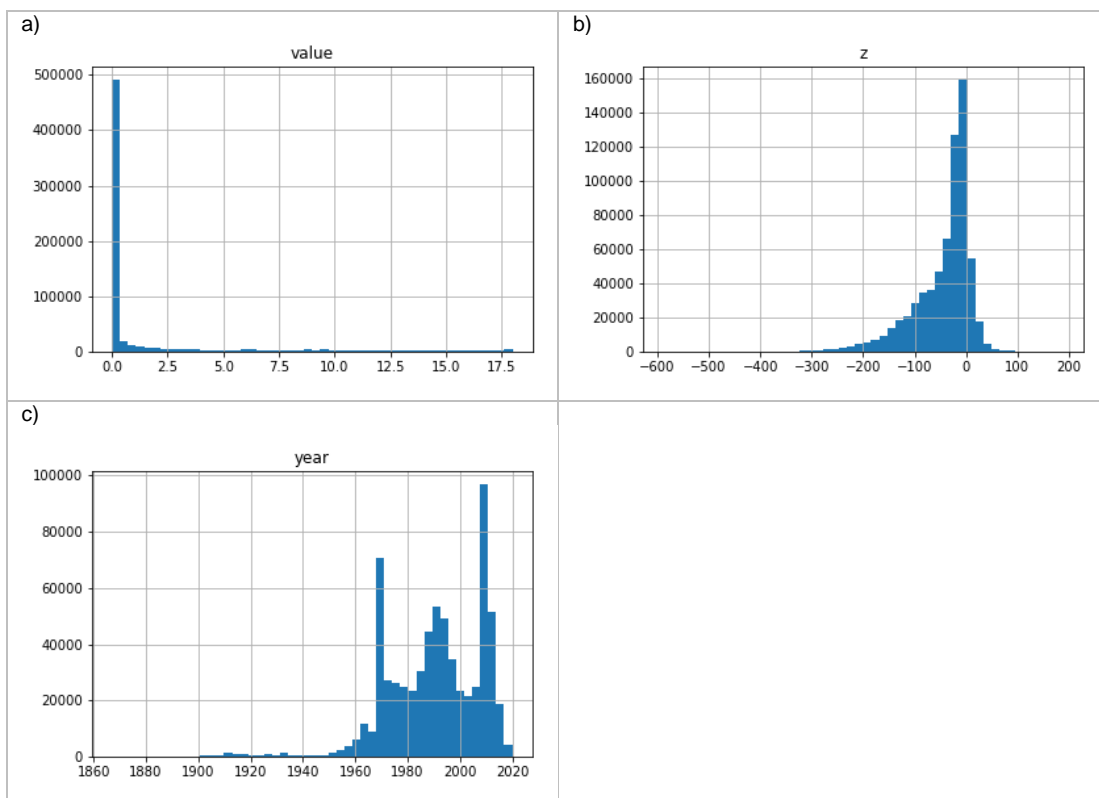
Gegevenstype	Aantal locaties	Aantal records
Chemische analyse	19505	329767
Vertical Electrical Sounding	7798	22947
Electrical Cone Penetration Test	331	5949
Boorgatmeting	2695	219810
SlimFlex	42	558
Prikstok	30	53
Airborne-EM	2356	65231
Airborne-EM, FRESHEM methode	32447	2115624
Totaal	66096	2759939





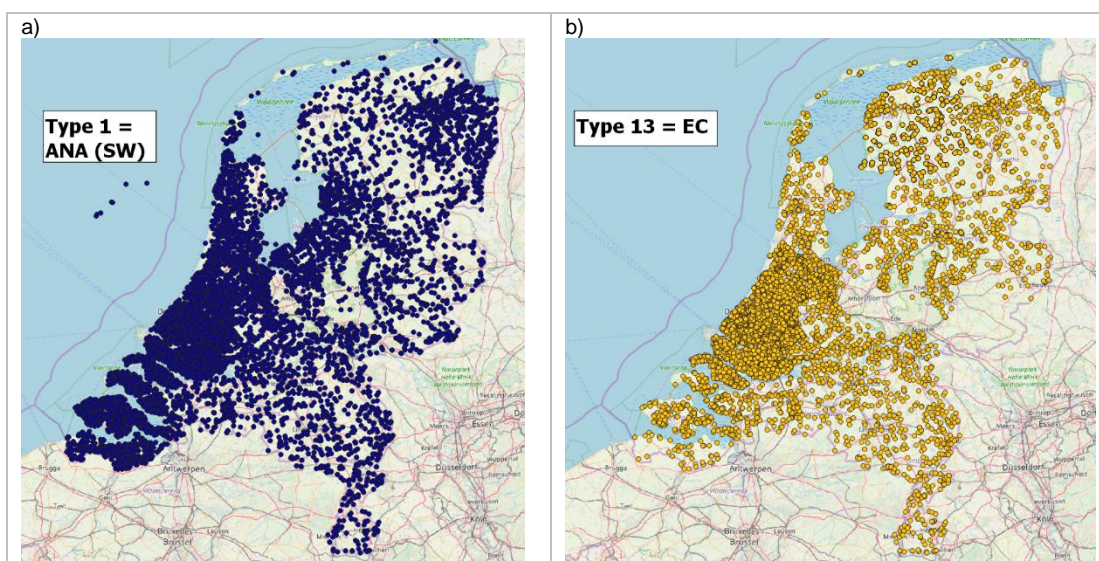
Figuur 3.1 Overzicht unieke locaties metingen van chloride in het grondwater. a) locaties van chemische analyses, b) locaties van vertical electrical soundings, c) locaties van electrical cone penetration tests, d) locaties van open-boorgatmetingen, e) locaties van SlimFlex metingen, f) locaties van prikstokmetingen, g) locaties van Airborne EM metingen, h) locaties van Airborne EM metingen met FRESHEM methode uitgewerkt.

De beschikbare gegevens zijn geografisch redelijk gelijk verdeeld over Nederland. De gegevens zijn evenwel sterk scheef verdeeld waar het de chlorideconcentratie in het grondwater betreft. Metingen in het zoete bereik domineren de metingen sterk. Hetzelfde is het geval voor ondiepe metingen (Figuur 3.2). Metingen van brak en zout grondwater zijn daarmee schaars, evenals metingen op grotere diepte. In de database zijn metingen opgenomen vanaf de 19^e eeuw. Dit betreft een klein aantal. Het aantal metingen neemt toe vanaf de jaren 60, de uitschieter rond 1970 wordt deels veroorzaakt door het toekennen van 1970 als jaartal voor geofysische metingen waarvan niet bekend is wanneer deze hebben plaatsgevonden.



Figuur 3.2 Histogrammen van a) de gemeten concentratie (g/L), b) z-coördinaat meting (m NAP), en c) jaar van de meting. De FRESHM-metingen zijn niet opgenomen in deze histogrammen omdat deze de diagrammen door de grote hoeveelheid gegevens anders zouden domineren.

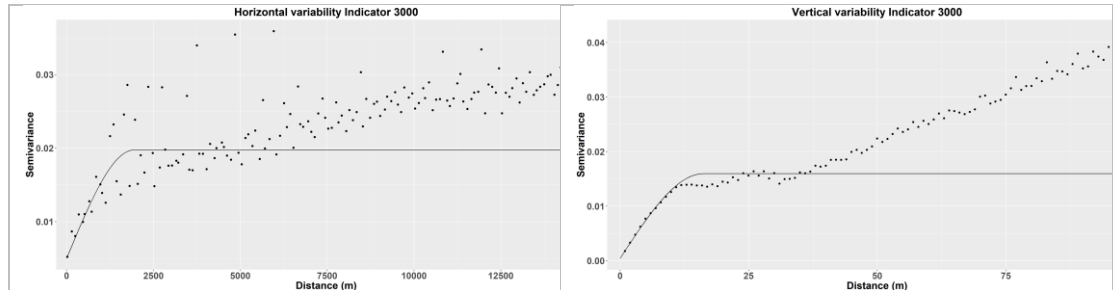
De verzamelde oppervlaktewatermetingen zijn weergegeven in Figuur 3.3. De metingen zijn alle van recente datum en geografisch goed verspreid.



Figuur 3.3 Overzicht unieke locaties metingen van chloride in het oppervlaktewater. a) locaties van chemische analyses, b) locaties van geleidbaarheidsmetingen.

3.1.2 3D interpolatie chlorideconcentratie grondwater

Figuur 3.2 geeft de directionele semivariogrammen voor de indicator 3 g/L in de horizontale en verticale richting. Een semivariogram plot het halve gemiddelde gekwadrateerde verschil tussen de waarde op punten op een bepaalde afstand van elkaar. Voor een indicator is de meetwaarde een onderschrijdingskans, en daarmee een getal tussen 0 en 1. Dit is terug te zien in de semivariantie waarde. De experimentele semivariogrammen zijn gefit met een Spherical variogram model. Op basis van het verschil in de range parameter tussen beide is de verticale anisotropie bepaald op 115. Deze waarde is in dezelfde orde van grootte als gegeven door (Pebesma, 2009), en is in de verdere procedure aangehouden als verticale anisotropie.

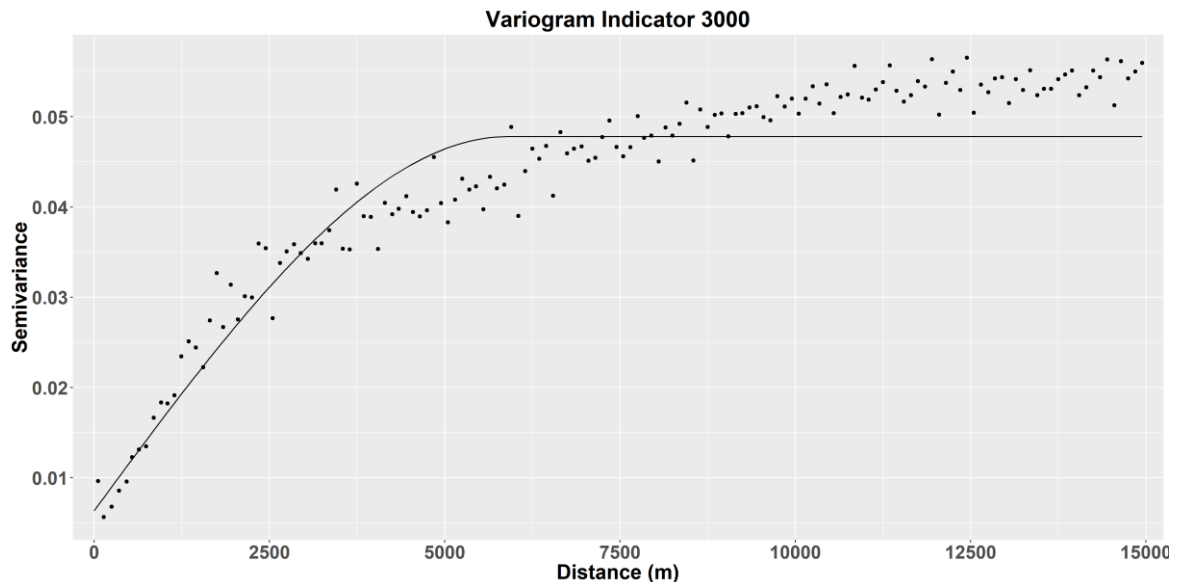


Figuur 3.4 Horizontaal (links) en verticaal semivariogram (rechts) voor indicator 3 g/L.

De verticale anisotropie is toegepast op de dataset, waarmee de verticale afstand tussen metingen met de anisotropiewaarde is vergroot. Vervolgens is voor de indicator 3 g/L een omnidirectioneel semivariogram gefit met een Spherical variogram model (Figuur 3.3), met de parameters weergegeven in Tabel 3.2. Deze parameters laten een goede fit zien met de meetgegevens. Deze variogram-parameters zijn voor alle indicators toegepast.

Tabel 3.2 Gefitte variogramparameters.

Parameter	Waarde
Nugget	0.007
Sill	0.0566
Range	7639 m
Verticale anisotropie	115



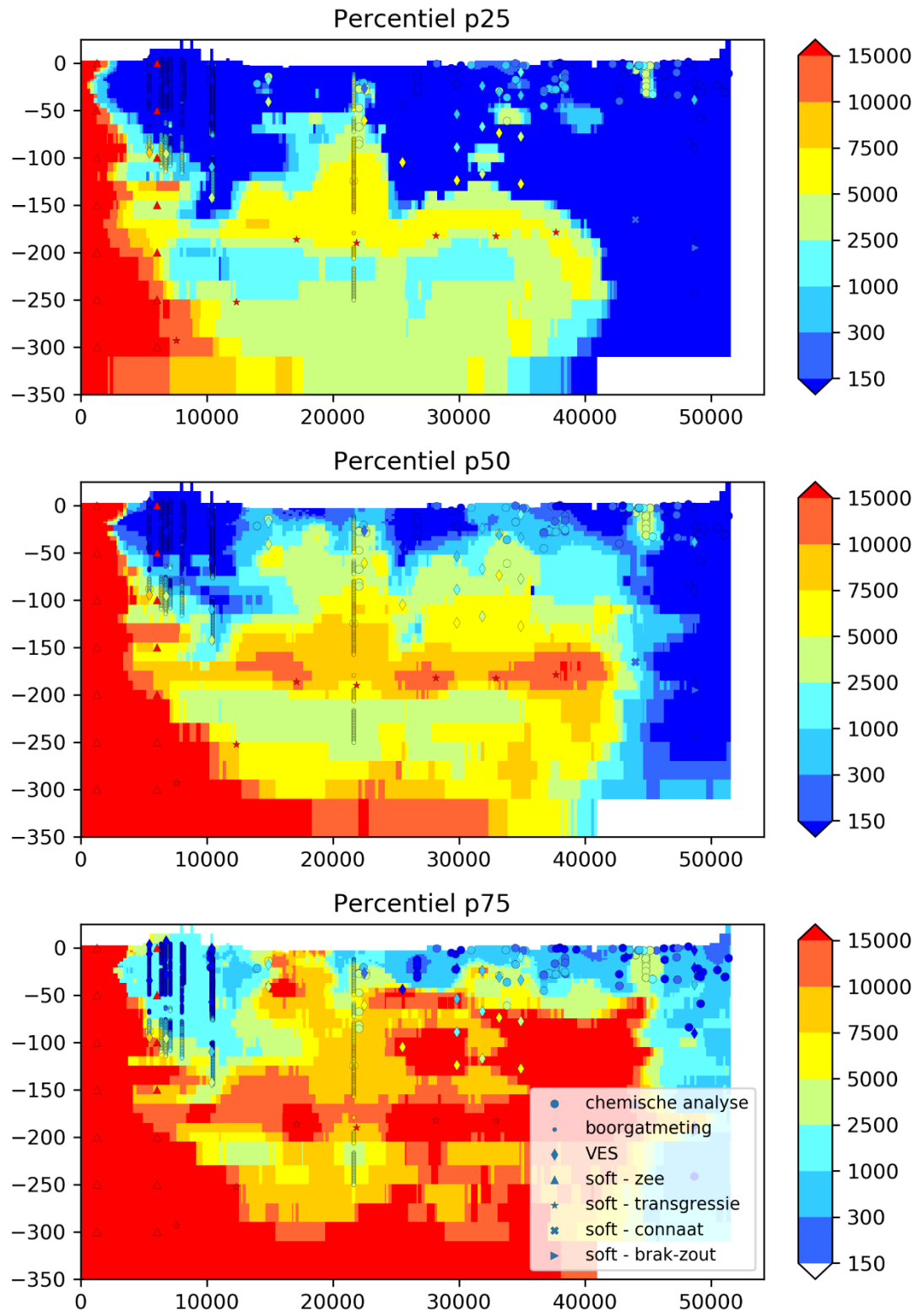
Figuur 3.5 Omnidirectioneel semivariogram met gefit variogram model na toepassing van een verticale anisotropie van 115.

Met het bepaalde variogrammodel is voor alle indicators apart driedimensionaal geïnterpoleerd. Het resultaat van deze interpolaties (de onderschrijdingskans van een bepaalde indicator, of chlorideconcentratie) is tenslotte samengevoegd tot een cumulatieve kansverdelingsfunctie van de chlorideconcentratie in het grondwater. De onzekerheid van de geïnterpoleerde chlorideconcentratie is zo op elk punt vastgelegd. Deze onzekerheid wordt bepaald door de onzekerheid in de invoergegevens (een oude VES meting is onzekerder dan een chloride analyse), en daarnaast door de interpolatie zelf (veel punten op korte afstand geeft een kleinere onzekerheid dan weinig punten in de directe omgeving). Figuur 3.6 geeft een verticale doorsnede door de geïnterpoleerde driedimensionale chlorideverdeling, en geeft het 25-, 50- en 75-percentiel van de chlorideverdeling. Figuur 3.7 geeft een driedimensionaal beeld van de mediane waarde van de geïnterpoleerde chlorideconcentratie.

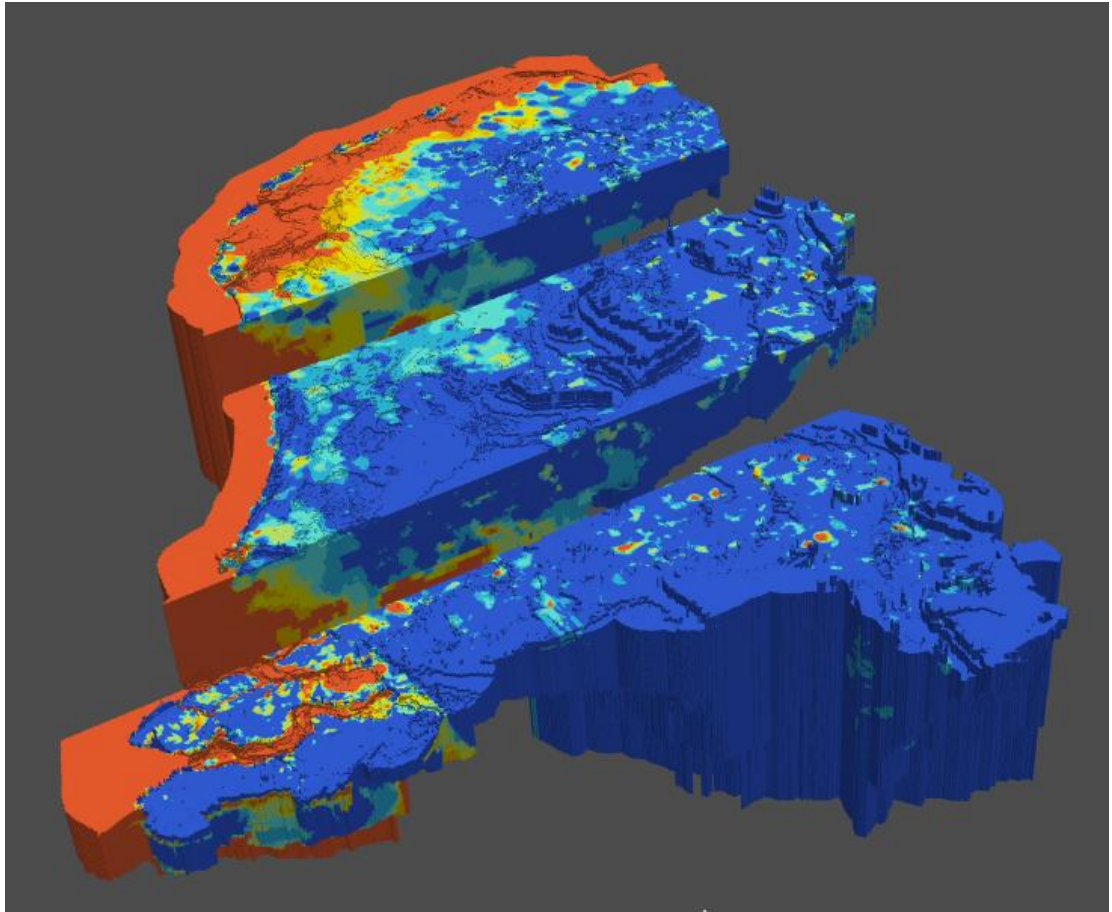
De geïnterpoleerde chlorideverdeling geeft een over het algemeen logisch beeld van een kuststreek met ondiep zout, een aanwezige zoetwaterbel onder de duinen, en een zoet binnenland. Het ondiepere zout in Zeeland en de Fries-Groningse kustregio reflecteert de ontstaansgeschiedenis, in deze gebieden was zo'n duizend jaar geleden nog zee-invloed aanwezig. In Noord- en Zuid-Holland is het zout dieper aanwezig.

In de geïnterpoleerde chlorideverdeling is het effect te zien van de afnemende databeschikbaarheid, en daardoor toenemende onzekerheid met de diepte. De verschillen tussen het 25- en 75-percentiel lopen snel op met de diepte. Dit beeld is gangbaar voor de kustregio, met uitzondering van Zeeland. In Zeeland is de onzekerheid van de chlorideverdeling kleiner, en wordt deze gestuurd door de aanwezige onzekerheid in het FRESHEM resultaat. In de chlorideverdeling zijn een aantal artefacten zichtbaar van meetfouten in een beperkt aantal boorgatmetingen. Dit veroorzaakt de onrealistische ondiepe zoute 'plekken' in Brabant en Limburg.

Transect Zandvoort - Hilversum



Figuur 3.6 Verticale doorsnede door 25 percentiel (boven), 50 percentiel (mediaan, midden) en 75 percentiel (onder) van geïnterpoleerde chlorideconcentratie grondwater, over transect van Zandvoort tot Hilversum. Beschikbare meetgegevens en opgelegde zachte data binnen een afstand van 500 m van het transect zijn ook weergegeven.

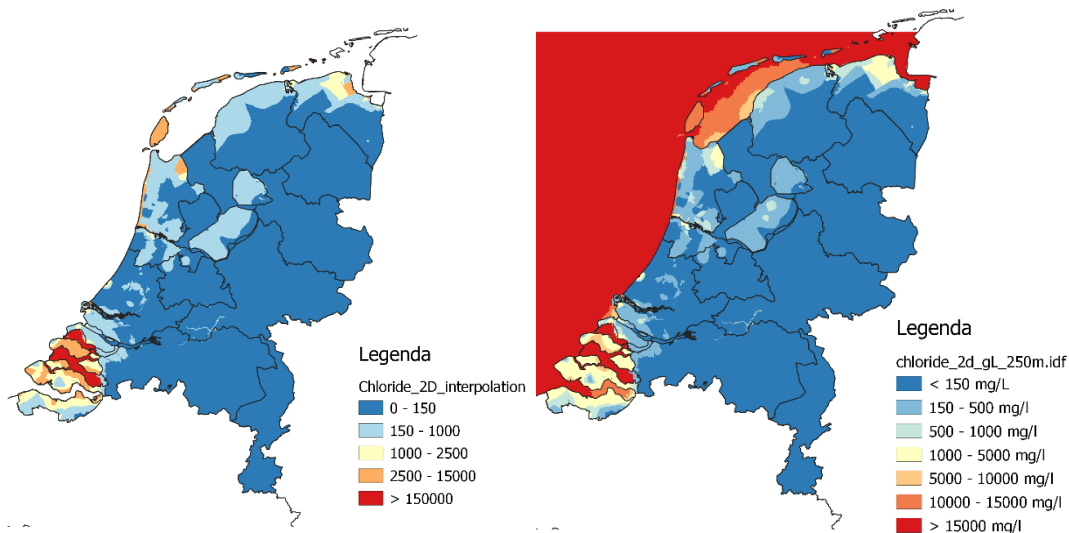


Figuur 3.7 3D beeld mediane waarde geïnterpoleerde chlorideconcentratie grondwater.

3.1.3 2D interpolatie chlorideconcentratie oppervlaktewater

De beschikbare chloride- en geleidbaarheidsmetingen in het oppervlaktewater zijn per watersysteem (Figuur 2.5) geïnterpoleerd tot een 50 x 50 m grid voor heel Nederland (Figuur 3.8, links). Deze methode levert goede scheidingen op tussen de verschillende watersystemen (een meetwaarde uit de Nieuwe Waterweg wordt bijvoorbeeld niet ‘doorgetrokken’ het regionale systeem in. In het resulterende bestand zitten enkele artefacten, die te maken hebben met een fout in de meetgegevens (hoge waarde chloride in Nederrijn en Waal), en een verkeerd gekozen indeling in watersystemen (Noord-Holland, hier is Texel foutief niet als apart watersysteem beschouwd).

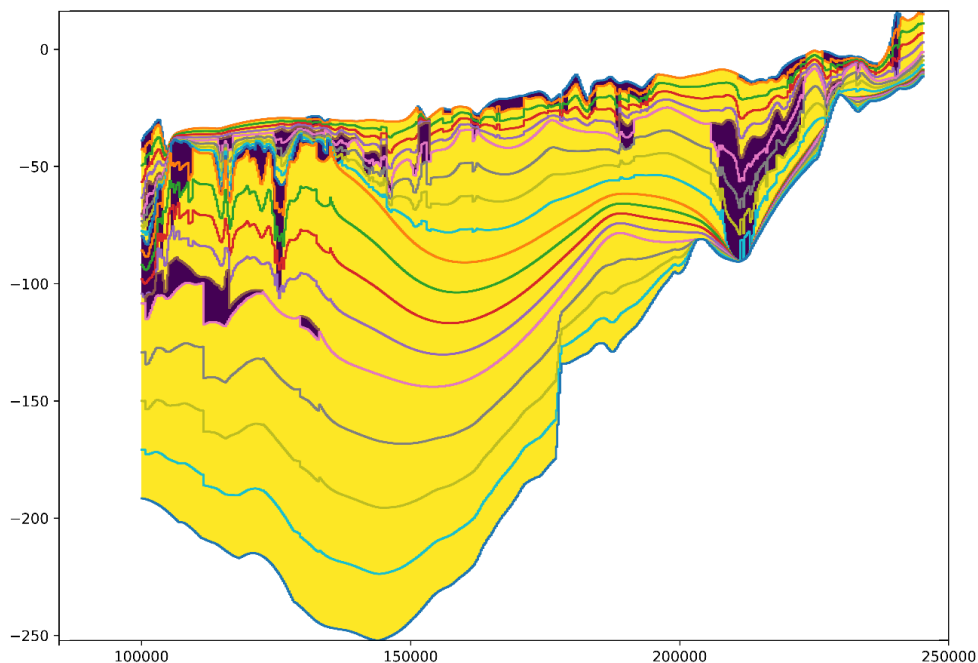
Voor de Noordzee, Waddenzee en Westerschelde zijn ruimtelijk variërende berekende saliniteitwaarden beschikbaar van het ‘3D Dutch Continental Shelf – Flexible Mesh Model’ (Zijl et al., 2018). Hiervoor zijn tijdsgemiddelde waarden van een modelberekening voor het jaar 2012 omgerekend naar chloridewaarden en omgezet naar 250 x 250m grid. Deze resultaten zijn gecombineerd met het 2D kriging resultaat voor de overige wateren. Het 50 x 50 m grid is daarvoor via de mediane waarde per 250 x 250m cel omgezet naar 250 x 250m resolutie (Figuur 3.8, rechts).



Figuur 3.8 2D Beeld geïnterpoleerde chlorideconcentratie oppervlaktewater (links), en aangevuld met modelresultaat 3D Dutch Continental Shelf – Flexible Mesh Model voor de Noordzee, Waddenzee en Westerschelde (rechts).

3.1.4 Detaillering lagenmodel

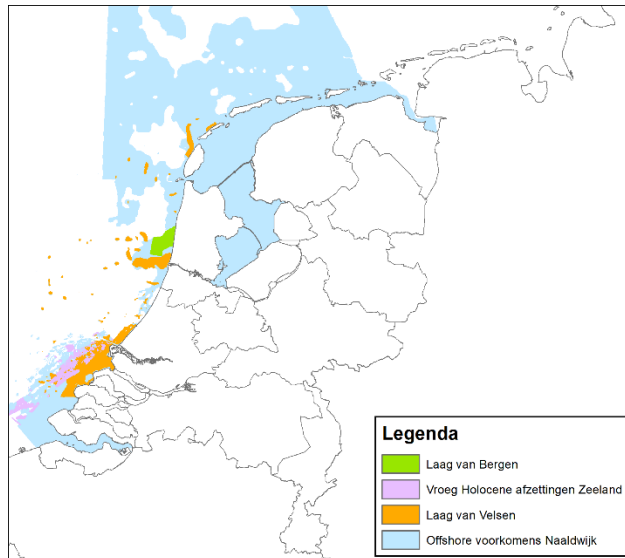
Met de ontwikkelde procedure is op basis van het LHM kwantiteit lagenmodel een verticaal gedetailleerder lagenmodel ontwikkeld. Het gedetailleerde lagenmodel volgt de laagscheidingen zoals deze aanwezig zijn in het LHM kwantiteit lagenmodel. Het gedetailleerde lagenmodel kent in totaal 39 modellagen. Deze lagen zijn niet overal aanwezig. Er is een minimale laagdikte aangehouden van 1 m, dunnere lagen zorgen in elk geval voor problemen met de rekentijden in de modelberekening. De ontwikkelde procedure garandeert een goede connectiviteit tussen watervoerende en scheidende lagen; er worden geen gaten of juist afdichtingen gecreëerd. Het doorlaatvermogen en de weerstand van de lagen in LHM kwantiteit zijn omgerekend naar een horizontale en verticale doorlatendheid en toegekend aan het gedetailleerde lagenmodel. Figuur 3.9 geeft een voorbeeld van de gedetailleerde laagindeling.



Figuur 3.9 Voorbeeld detaillering laagindeling

3.1.5 Uitbreiding lagenmodel offshore

Kennis over de ligging van weerstandsbiedende lagen onder de zeebodem is belangrijk om de landinwaartse invloed van de zee goed mee te nemen in de modellering. Zeker voor vragen rond het effect van toekomstige zeespiegelstijging is dit een belangrijk gegeven. Hierbij zijn met name de ondiepe weerstandsbiedende lagen van belang. Met toenemende diepte neemt daarnaast de kennis over de verspreiding van weerstandsbiedende lagen sterk af. Er is daarom alleen gekeken naar de verspreiding van de Holocene weerstandsbiedende lagen. Specifiek is gekeken naar de Laag van Bergen, de kleiïge opvulling van het zeegat van Bergen, de Laag van Velsen, de vroegste klastische afzetting van de Holocene kustvlakte, en vroeg-Holocene afzettingen in voor de kust van Zeeland. Deze lagen zijn alle onderdeel van de Formatie van Naaldwijk. Daarnaast is ook de verspreiding van de Formatie van Naaldwijk als geheel in beeld gebracht (Figuur 3.10).

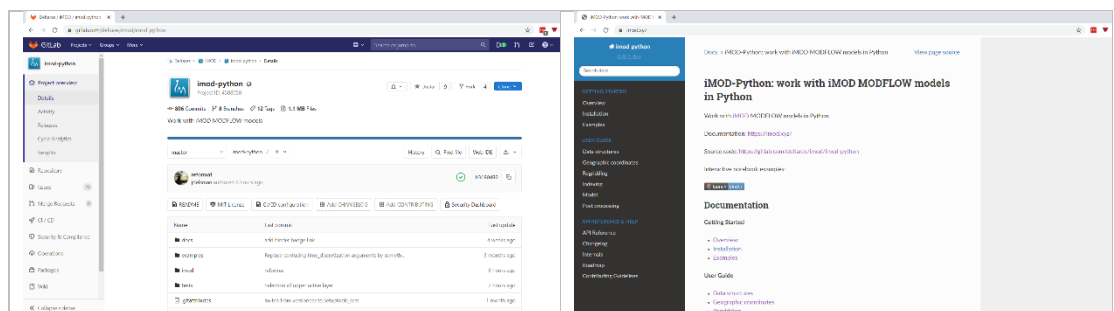


Figuur 3.10 Offshore verspreiding afzettingen Formatie van Naaldwijk

Waar één van de specifiek onderscheiden lagen aanwezig is, is een hydraulische weerstand van 3000 dagen aangenomen. Waar geen van de specifiek onderscheiden lagen aanwezig is, maar de Formatie van Naaldwijk wel, is een hydraulische weerstand van 300 dagen aangenomen. Waar de Formatie van Naaldwijk niet aanwezig is, is geen weerstand aangenomen boven de Pleistocene afzettingen. Deze weerstanden zijn in LHM zoet-zout toegekend aan de GHB package.

3.2 Ontwikkelen transparante methode voor opbouw zoet-zout modellen

De sourcecode van imod-python is te vinden op <https://gitlab.com/deltares/imod/imod-python>, de documentatie op <https://imod.xyz/> (Figuur 3.11). Installatie van de laatste release van imod-python kan via `pip install imod`, of `conda install imod`.



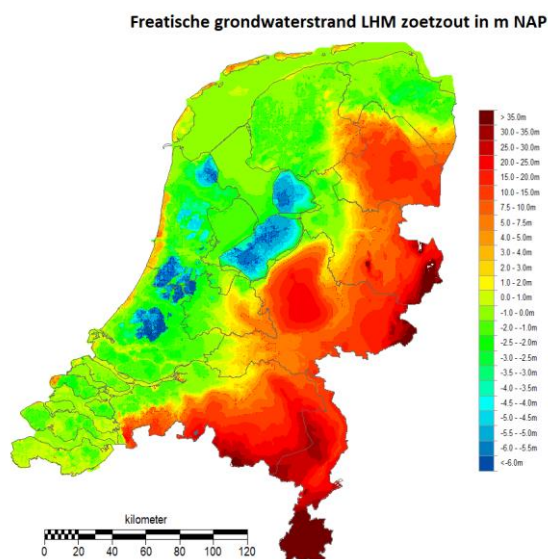
Figuur 3.11 Gitlab code repository van imod-python (links), en documentatie van imod-python (rechts)

3.3 Versnelling rekentijden

De rekentijd voor het 100 jaar autonome scenario met LHM zoet-zout is met verschillende versnellingen teruggebracht tot een kleine twee dagen. Hierbij is op een aantal locaties de laag-parametrisatie lokaal geoptimaliseerd om sneller te kunnen rekenen. Verder zijn verschillende inconsistenties gesignaleerd in de LHM 4.0 parameters. Het betreft bijvoorbeeld foutieve peilen in de Maas bij Maasbracht, in één cel voorkomen van een infiltrerende RIV met een drainerende DRN, en gaten in de scheidende laag onder het IJsselmeer. Tenslotte is gebruik gemaakt van de geparalleliseerde versie van iMOD-WQ, en is verdeeld over 18 processors (rekencores) gerekend. De berekening is gehost bij Amazon Web Services. Zonder optimalisatie en parallelle berekening bedraagt de geschatte rekentijd van een 100 jarige run meer dan twee jaar.

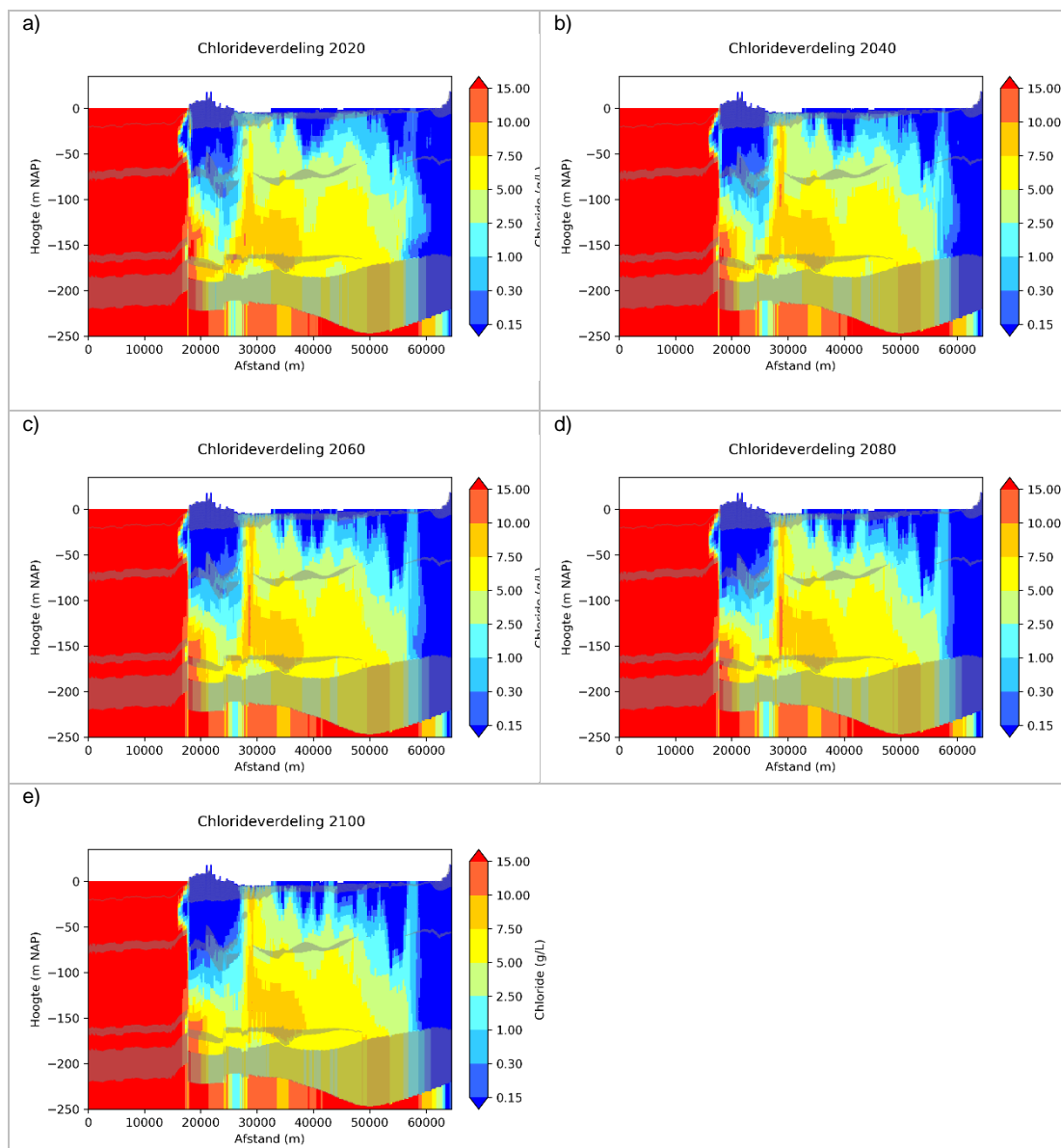
3.4 Basismodel LHM zoet-zout

Met behulp van de ontwikkelde Toolbox NHI zoet-zout is een landsdekkend zoet-zout grondwatermodel ontwikkeld, het LHM zoet-zout. Dit dichtheidsafhankelijke grondwatertransport model is gebaseerd op en consistent met het LHM kwantiteit. De hier gerapporteerde versie van het LHM zoet-zout is een eerste versie, niet alle invoer is gebaseerd op de meest recent beschikbare bestanden. Begin 2020 wordt verder gewerkt aan het basismodel LHM zoet-zout. De hier gerapporteerde versie van het LHM zoet-zout is gebaseerd op LHM kwantiteit versie 3.4. Dit betekent dat de ondergrondschematisering zoals deze is opgenomen in LHM zoet-zout gelijk is aan LHM kwantiteit (hoewel fijner verticaal gediscrèteerd), en ook de randvoorwaarden (grondwateraanvulling, oppervlaktewater, drainage, onttrekkingen) zijn overgenomen van het LHM kwantiteit. Als initiële chlorideconcentratie is vooralsnog het resultaat van Pebesma (2009) gebruikt. Figuur 3.12 toont de berekende freatische grondwaterstand, Figuur 3.13 laat het autonome verloop van de zoet-zoutverdeling in het grondwater zien op een transect tussen Zandvoort en Hilversum over een periode van 100 jaar. Autonomo betekent hierbij dat alle randvoorwaarden in de berekening over deze periode gelijk zijn gehouden.



Figuur 3.12 Berekende stationaire freatische grondwaterstand in LHM zoet-zout

De autonome ontwikkeling van de zoet-zoutverdeling in het grondwater laat een plausibel patroon zien. Zichtbaar is dat de initiële (huidige) zoet-zoutverdeling niet in evenwicht is met de geldende randvoorwaarden. Dat is een bekend resultaat, de verzilting van de diepe polders neemt door dit proces de komende eeuw nog sterk toe. Ook de zoetwaterbel onder de duinen groeit in de berekening van 60 m onder NAP tot 80 m onder NAP.



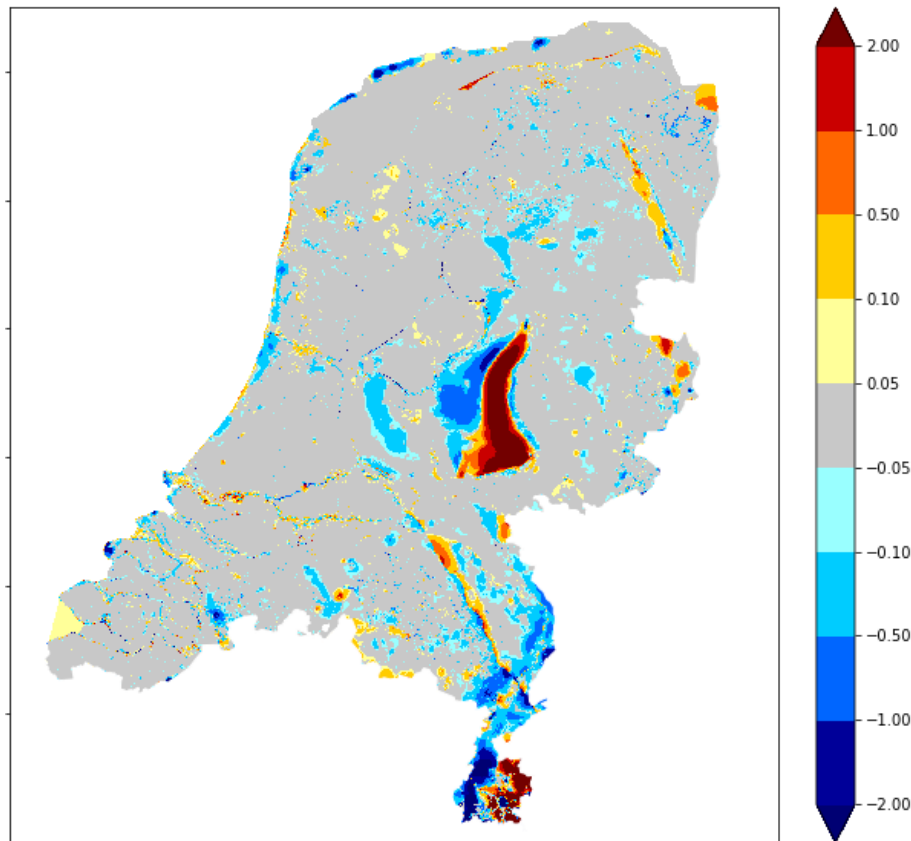
Figuur 3.13 Autonome ontwikkeling zoet-zoutverdeling in grondwater over een transect van Zandvoort naar Hilversum, voor respectievelijk $t = 0, 20, 40, 60, 80$ jaar. Aanwezige scheidende lagen zijn gearceerd weergegeven.

3.5 Plausibiliteitstoets LHM zoet-zout

Als eerste plausibiliteitstoets is de eerste versie van het LHM zoet-zout vergeleken met een vergelijkbare berekening met LHM kwantiteit, versie 4.0.

Het beeld tussen beide modellen komt goed overeen. Het algehele patroon van de freatische grondwaterstand is vergelijkbaar, verschillen zijn grotendeels kleiner dan 5 cm. De grotere verschillen die optreden zijn grotendeels verklaarbaar. Verschillen rond de stuwwallen worden verklaard doordat in LHM zoet-zout geen horizontale anisotropie is opgenomen, waarmee in LHM kwantiteit de invloed van scheefgestelde kleischotten in de stuwwallen wordt gemodelleerd (ANI package). Dit verklaart de verschillen rond de Veluwe, de Utrechtse Heuvelrug, de Hondsrug en de Sallandse Heuvelrug. Ook is de langs de Peelrandbreuk en de Feldbissbreuk optredende weerstand niet expliciet opgenomen in LHM zoet-zout, waar deze in LHM kwantiteit wel expliciet wordt gemodelleerd (HFB package). Dit verklaart de verschillen rond beide breuksystemen. Zoals beschreven in paragraaf 2.4 kent iMOD-WQ geen ANI of HFB package, en wordt het niet

meenemen hiervan aanvaardbaar geacht omdat het gebieden betreft buiten de verzilte kustgebieden waar LHM zoet-zout zich primair op richt.



Figuur 3.14 Verschil LHM 4.0 – LHM zoet-zout in m. Bij blauwe kleuren kent LHM zoet-zout een hogere grondwaterstand.

Naast deze verschillen treden in de kustregio ook verschillen op doordat in LHM zoet-zout de dichtheidsverschillen van het grondwater mee worden gemodelleerd. Deze verschillen zijn geprononceerder in de diepere modellagen.

3.5.1 Toetsing stijghoogten aan meetgegevens

De onderstaande toetsresultaten zijn bepaald met behulp van meetreeksen uit Dinoloket, waarbij de meetdata is opgedeeld per watervoerend pakket conform de indeling van LHM 3.0 waarvoor de laatste toetsing is uitgevoerd (i.e. 7 lagen). De meetperiode loopt tot en met het einde van 2011. Voor alle peilbuizen is de gemiddelde grondwaterstand / stijghoogte bepaald per laag. Voor de vertaling van de filterposities van de peilbuizen naar LHM zoet-zout is uitgegaan van het middelpunt van de watervoerende lagen van LHM 3.0. Op de gemeten stijghoogten zijn (vooralnog) geen dichtheidscorrecties toegepast. De gemeten gemiddelde grondwaterstand / stijghoogte zijn vervolgens vergeleken met de berekende stationaire stijghoogten van de laatste versie van het LHM zoet-zout. Alle afwijkingen zijn berekend door de stationaire grondwaterstand / stijghoogte (model) af te trekken van de gemeten grondwaterstand / stijghoogte (i.e. berekend – gemeten). Conform de toetsing zoals uitgevoerd door (Hoogewoud et al., 2013) is onderscheid gemaakt tussen peilbeheerste, vrij afwaterende en sterk hellende gebieden. De gehanteerde criteria zijn opgenomen in bijlage A. De procedure is vastgelegd in een workflow in versiebeheer.

Tabel 3.3 Toetsing freatische grondwaterstanden aan gestelde criterium.

Modellaag freatisch grondwater	Mediaan [m]	Gemiddelde [m]	St. afwijking [m]	Deel metingen dat voldoet [%]
1 - peilbeheerst	0.29	0.15	0.97	37
2 - vrij afwaterend	0.53	0.01	3.83	38
3 - sterk hellend	-0.55	-2.86	5.87	50
Laag 1	0.43	-0.22	3.58	39

Uit de toetsing van de freatische grondwaterstanden volgt dat momenteel geen van de toetsingsregio's voldoen aan de gestelde criteria (beschreven in Bijlage A). Met andere woorden; in geen van de bovengenoemde toetsingsregio's voldoet op dit moment minimaal 80% van de meetpunten aan de criteria. Een van de mogelijke oorzaken ligt in de vertaling van de positie van de peilbuisfilters naar de modellen van LHM zoet-zout. In een volgende toets is het aan te raden om de filterhoogten van de peilbuisfilters te achterhalen, en de positie van de filters opnieuw te bepalen. Hierbij is het ook aan te raden om de gemeten stijghoogten te controleren, om afwijkingen door meetfouten of trends (e.g. verandering van peil in de loop van de tijd) uit te sluiten. LHM kwantiteit versie 3.0 voldoet op 40% van de meetlocaties aan de toetsingscriteria (Hoogewoud et al., 2013), op de afzonderlijke criteria voor GHG en GLG scoort LHM kwantiteit versie 3.0 tussen de 52 en 65% voldoet. Als reden voor deze lage score wordt met name het schaalverschil tussen een grondwaterstand in een 250 x 250 m cel en een gemeten puntlocatie aangevoerd (Hoogewoud et al., 2013).

Voor de peilbeheerste en vrij afwaterende regio's geldt dat een systematische hogere grondwaterstand wordt berekend dan de metingen aangeven. Bij de vrij afwaterende regio's valt dit minder op in de gemiddelde afwijking, door een groep peilbuizen in het Noorden van Twenthe (nabij Vasse). In dit gebied is de berekende grondwaterstand significant lager dan de gemeten grondwaterstand. Voor de peilbeheerste gebieden zal de systematisch hogere grondwaterstand naar verwachting komen door verschillen in de schematisatie van de ondergrond en/of drainageweerstand. Mogelijk spelen vergelijkbare processen in de vrij afwaterende regio's. Een nadere analyse naar de verschillen moet hier meer uitsluitsel over geven. In de sterk hellende gebieden leiden enkele sterk afwijkende peilbuizen tot een relatief hoog gemiddelde afwijking. In bijna alle gevallen betreft het een peilbuis op de grens van Limburg en Duitsland, waar een significant lagere grondwaterstand is berekend. Dit kan te wijten zijn aan de onzekere randvoorwaarden langs de landsgrenzen.

Uit de toetsing van de diepe grondwaterstanden (modellaag 2 t/m 7, LHM 3.0) volgt dat de metingen in modellaag 5 voldoen aan de gestelde criteria, en de metingen in modellaag 3 en 4 voldoen net niet. In berekende stijghoogten in modellaag 2, 6 en 7 liggen verder af van de criteria. De oorzaak van de relatief lage score voor modellaag 2, is waarschijnlijk verbonden met de relatief lage score bij de freatische grondwaterstanden.

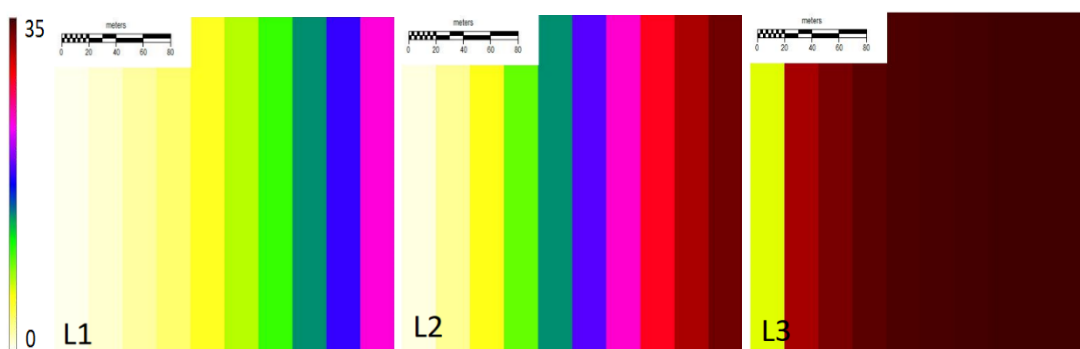
Tabel 3.4 Toetsing stijghoogten in diepere lagen aan gestelde criterium.

Modellaag diep grondwater	Mediaan [m]	Gemiddelde [m]	St. afwijking [m]	Deel metingen dat voldoet [%]
Laag 2	0.32	-0.09	2.46	52
Laag 3	0.48	0.34	1.49	79
Laag 4	0.54	0.60	1.06	76
Laag 5	0.37	0.53	1.13	80
Laag 6	0.30	0.29	1.63	66
Laag 7	0.68	0.93	1.41	62

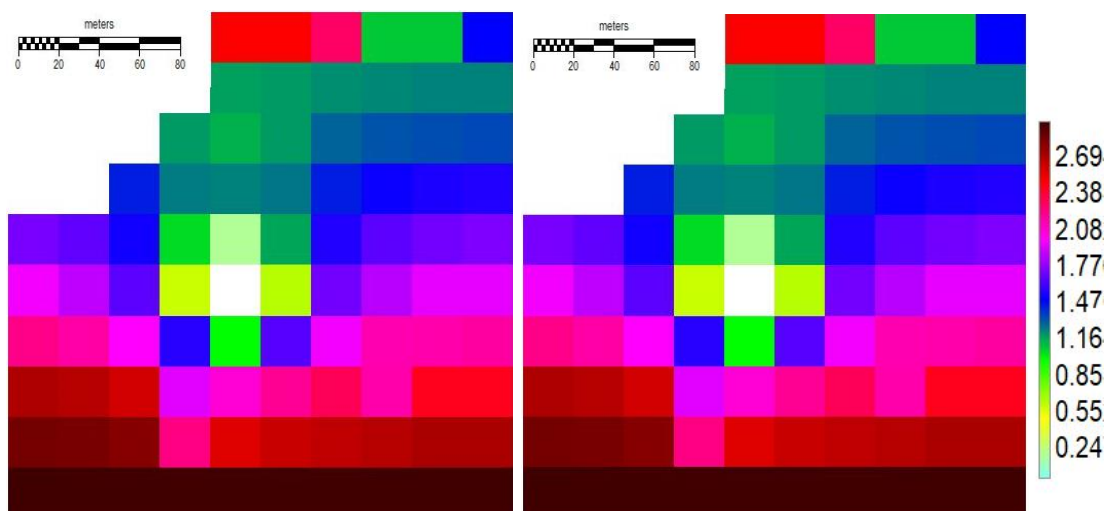
3.6 Implementatie effect van variabele dichtheid op stijghoogteverdeling in MODFLOW-2005

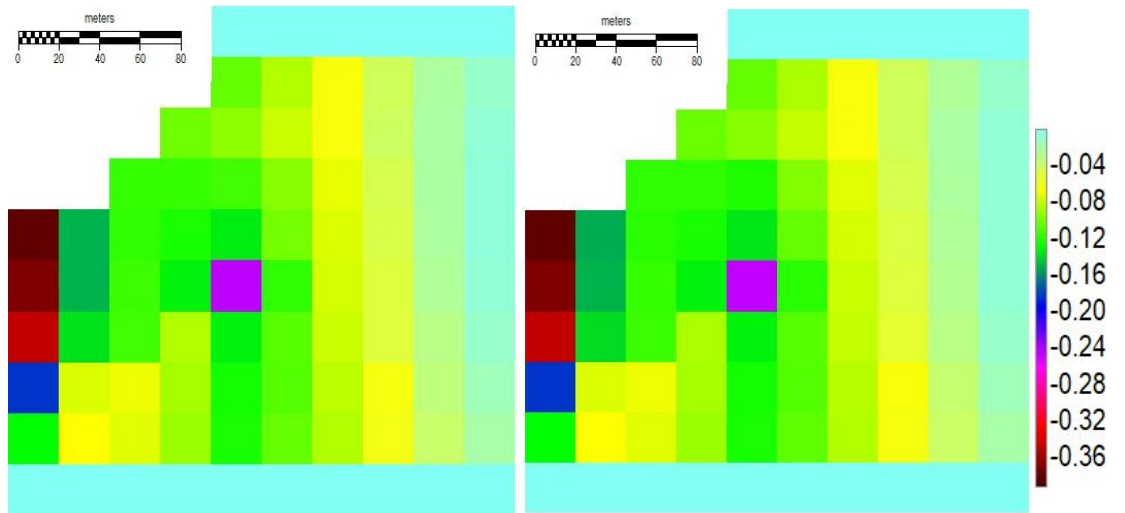
3.6.1 Verificatie van de implementatie

Om te controleren of de implementatie van de VDF package in MODFLOW-2005 correct is uitgevoerd, is een testmodel gemaakt in zowel SEAWAT als in MODFLOW-2005, en is met beide codes het effect van een ruimtelijk variabel dichtheidveld op de stijghoogte berekend. Het niet-stationaire testmodel bestaat uit 3 lagen, 10 rijen en 10 kolommen, en kent een groot aantal verschillende randvoorwaarden zodat de meeste packages waarvoor de VDF is geïmplementeerd in het model een rol spelen (uitzonderingen zijn de recharge (RCH) en verdamping (EVT); deze packages worden echter ook niet in het LHM gebruikt omdat voor deze processen MetaSWAP wordt ingezet). De chlorideconcentraties van de drie modellagen worden gegeven in Figuur 3.15. Figuur 3.16 toont de berekende stijghoogtes volgens MODFLOW-2005 en SEAWAT zonder het meenemen van dichtheidseffecten, en het effect op de stijghoogten als deze dichtheidseffecten wel worden meegenomen d.m.v. de VDF package. De figuur laat zien dat de implementatie van VDF in MODFLOW-2005 dezelfde resultaten geeft als SEAWAT. Ook het verloop van de stijghoogte in de tijd is in beide modellen gelijk (resultaten niet getoond).



Figuur 3.15 Chlorideconcentraties in de drie modellagen van het testmodel.





Figuur 3.16 Boven: stijghoogte modellaag 1 volgens MODFLOW-2005 (links) en SEAWAT (rechts). Onder: effect van meenemen effecten van variabele dichtheid op de stijghoogte in modellaag 1, volgens MODFLOW-2005 (links) en volgens SEAWAT (rechts).

4 Discussie en conclusies

Deze rapportage beschrijft de totstandkoming van de geactualiseerde Toolbox NHI zoet-zout en de realisatie van de eerste versie van het LHM zoet-zout. De Toolbox NHI zoet-zout bestaat uit geactualiseerde datasets, nodig om een zoet-zout grondwatermodel te realiseren, tools om transparant een zoet-zout grondwatermodel op te bouwen, versnelde software om dichtheidsgedreven grondwaterstroming en zouttransport te berekenen (iMOD-WQ), en een methode om het effect van een stationaire zoet-zoutverdeling op de grondwaterstroming mee te nemen in een grondwater-kwantiteitsmodel. Het LHM zoet-zout is een landsdekkend zoet-zout grondwatermodel, gebaseerd op en consistent met de laatste versie van het LHM kwantiteit. Het LHM zoet-zout is gerealiseerd met behulp van de datasets, tools en software in de Toolbox NHI zoet-zout.

Door uitvraag van gegevens bij verschillende instanties, gecombineerd met een uitvraag bij Dinoloket, is een grote hoeveelheid gegevens bij elkaar gebracht over de zoet-zout verdeling in grond- en oppervlaktewater in Nederland. Deze gegevens zijn geïnterpoleerd tot landsdekkende gegevensbestanden over de zoet-zout verdeling in grond- en oppervlaktewater in Nederland. Hoewel er een grote hoeveelheid gegevens is verzameld, is de gegevensdichtheid niet altijd groot. Met name op grotere diepten is de gegevensdichtheid nog altijd beperkt, en is daarmee de interpolatie ter plaatse onzeker. Deze onzekerheid is gekwantificeerd in de geïnterpoleerde zoet-zout verdeling.

De berekende grondwaterstand van LHM zoet-zout is niet volledig gelijk aan de berekende grondwaterstand van LHM kwantiteit. Hiervoor zijn een aantal redenen aan te wijzen. Ten eerste worden door de invloed van de zoet-zout verdeling op grondwaterstroming verschillen geïntroduceerd. Daarnaast ondersteunt iMOD-WQ de packages ANI en HFB, respectievelijk voor het modelleren van horizontale anisotropie en breuken, vooralsnog niet. Ook ondersteunt de RIV package het toepassen van een infiltratiefactor niet. Het niet modelleren van horizontale anisotropie en breuken zorgt voor verschillen tussen LHM zoet-zout en LHM kwantiteit ter plaatse van de verschillende gestuwde afzettingen (onder meer op de Veluwe, Utrechtse en Sallandse Heuvelrug en Hondsrug) en rondom de Peelrandbreuk en de Feldbissbreuk. Het niet meenemen van horizontale anisotropie en breuken wordt aanvaardbaar geacht omdat de effecten spelen buiten de verzilte kustgebieden. In de verdere ontwikkeling van Modflow 6 komt deze functionaliteit wel beschikbaar voor zoet-zout modellering.

De gerealiseerde versie van LHM zoet-zout is een eerste versie, in 2020 wordt verder ontwikkeld aan het landsdekkende zoet-zout grondwatermodel.

5 Referenties

- Archie, G. (1942). The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. *Transactions of the AIME*, 146(1), 54–62. Retrieved from <https://www.onepetro.org/journal-paper/SPE-942054-G>
- Van Baaren, E. S., Oude Essink, G. H. P., Janssen, G. M. C. M., de Louw, P. G. B., Heerdink, R., & Goes, B. J. M. (2016). *Verzoeting en verzilting freatisch grondwater in de Provincie Zeeland. Deltares rapport 1220185-000*.
- Van Baaren, E. S., Delsman, J. R., Karaoulis, M. C., Pauw, P. S., Vermaas, T., Bootsma, H., et al. (2018). *FRESHEM Zeeland - FREsh Salt groundwater distribution by Helicopter ElectroMagnetic survey in the Province of Zeeland. Deltares report 1209220*. Utrecht, Netherlands.
- Bakker, M., Post, V., Langevin, C. D., Hughes, J. D., White, J. T., Starn, J. J., & Fienen, M. N. (2016). Scripting MODFLOW Model Development Using Python and FloPy. *Ground Water*. <https://doi.org/10.1111/gwat.12413>
- Bos-Burgering, L., Hunink, J. C., Veldhuizen, A., Walsum, P. van, Prinsen, G., Pouwels, J., & Kroon, T. (2018). *Veranderingsrapportage LHM 3.4.0 - Ontwikkelingen ten behoeve van de analyse van de landelijke zoetwatervoorziening 2018. Deltares rapport 11202224-003*. Utrecht: Deltares.
- Boukes, H., Caljé, R., & Medenblik, J. (2017). Oriënterende verziltingsberekeningen Fryslân. *Stromingen*, 29(3), 19–28.
- Dask Development Team. (2016). Dask: Library for dynamic task scheduling. Retrieved from <https://dask.org>
- Delsman, J. R. (2019). *Overzicht eerder werk interpolatie zoet zout grondwater. Deltares memo*.
- Delsman, J. R., & Oude Essink, G. H. P. (2019). *Plan van aanpak NHI zoet zout. Deltares rapport 11203718-007-BGS-0001*. Utrecht.
- Delsman, J. R., Hu-a-ng, K. R. M., Vos, P. C., de Louw, P. G. B., Oude Essink, G. H. P., Stuyfzand, P. J., & Bierkens, M. F. P. (2014). Paleo-modeling of coastal saltwater intrusion during the Holocene: an application to the Netherlands. *Hydrology and Earth System Sciences*, 18, 3891–3905. <https://doi.org/10.5194/hess-18-3891-2014>
- Delsman, J. R., Van Baaren, E. S., Siemon, B., Dabekaussen, W., Karaoulis, M. C., Pauw, P., et al. (2018). Large-scale, probabilistic salinity mapping using airborne electromagnetics for groundwater management in Zeeland, the Netherlands. *Environmental Research Letters*, 13(8), 084011. <https://doi.org/10.1088/1748-9326/aad19e>
- Faneca Sánchez, M., Gunnink, J. L., Van Baaren, E. S., Oude Essink, G. H. P., Siemon, B., Auken, E., et al. (2012). Modelling climate change effects on a Dutch coastal groundwater system using airborne electromagnetic measurements. *Hydrology and Earth System Sciences*, 16(12), 4499–4516. <https://doi.org/10.5194/hess-16-4499-2012>
- Gillies, S., & others. (2013). Rasterio: geospatial raster I/O for Python programmers. Retrieved from <https://github.com/mapbox/rasterio>
- Guo, W., & Langevin, C. D. (2002). *User 's Guide to SEAWAT: A Computer Program For Simulation of Ground-Water Flow. Techniques*.
- Harbaugh, A. W. (2005). *MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model—the Ground-Water Flow Process. U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6–A16*. Reston, Virginia, USA.
- Hoogewoud, J. C., Prinsen, G. F., Hunink, J. C., Veldhuizen, A. A., Van der Bolt, F. J. E., & De Lange, W. J. (2013). *Toetsingsrapportage NHI 3.0. Deltares rapport 1206107-000*. Utrecht, Netherlands: Deltares.
- Hoogewoud, J. C., Walsum, P. van, Louw, P. de, Hunink, J. C., Prinsen, G., Verkaik, J., et al. (2015). *Veranderingsrapportage LHM 3.1.0; Ontwikkeling, beheer en onderhoud van de landelijke toepassing van het NHI. Deltares rapport 1220076*.
- Hoyer, S., & Hamman, J. (2017). xarray: ND labeled arrays and datasets in Python. *Journal*

- of *Open Research Software*, 5(1).
- Hunink, J. C., Delsman, J. R., Prinsen, G. F., & Bos-Burginger, L. (2018). *Vertaling van Deltascenario's 2017 naar modelinvoer voor het Nationaal Water Model*. Deltares rapport 11202240-009.
- Hunter, J. D. (2007). Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering*, 9(3).
- Jordahl, K., Bossche, J. V. den, Wasserman, J., McBride, J., Gerard, J., Fleischmann, M., et al. (2019). Geopandas/geopandas: V0.6.1. <https://doi.org/doi:10.5281/zenodo>
- Lam, S. K., Pitrou, A., & Seibert, S. (2015). Numba: A llvm-based python jit compiler. In *Proceedings of the Second Workshop on the LLVM Compiler Infrastructure in HPC*.
- De Lange, W. J. (1999). A Cauchy boundary condition for the lumped interaction between an arbitrary number of surface waters and a regional aquifer. *Journal of Hydrology*, 226(3–4), 250–261. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(99\)00143-2](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(99)00143-2)
- Langevin, C. D., Thorne Jr., D. T., Dausman, A. M., Sukop, M. C., & Guo, W. (2008). *SEAWAT Version 4: A Computer Program for Simulation of Multi-Species Solute and Heat Transport*. Methods. Reston, Virginia: U.S. Geological Survey.
- de Louw, P. G. B., Eeman, S., Siemon, B., Voortman, B. R., Gunnink, J. L., van Baaren, E. S., & Oude Essink, G. H. P. (2011). Shallow rainwater lenses in deltaic areas with saline seepage. *Hydrology and Earth System Sciences*, 15(12), 3659–3678. <https://doi.org/10.5194/hess-15-3659-2011>
- de Louw, P. G. B., Faneca Sánchez, M., Oude Essink, G. H. P., Prinsen, G., Bolt, F. van der, Vergroesen, T., & Van Walsum, P. (2014). *Integrale analyse Zout NHI 3.01 en aanbevelingen voor NHI 3.02 en verder*. Deltares rapport.
- Marchand, M., & De Lange, W. J. (2013). *Toepasbaarheid NHI voor het Deltaprogramma Zoetwater*. Deltares rapport 1206107. Utrecht, Netherlands: Deltares.
- McKinney, W. (2010). Data structures for statistical computing in python. In *Proceedings of the 9th Python in Science Conference*.
- Van der Meij, J. ., & Minnema, B. (1999). Modelling of the effect of a sea-level rise and land subsidence on the evolution of the groundwater density in the subsoil of the northern part of the Netherlands. *Journal of Hydrology*, 226(3–4), 152–166. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(99\)00150-X](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(99)00150-X)
- Mens, M., Hunink, J. C., Delsman, J. R., Pouwels, J., & Schasfoort, F. (2019). *Geactualiseerde knelpuntenanalyse voor het Deltaprogramma Zoetwater fase II*. Deltares rapport 112003734-003. Delft.
- Oude Essink, G. H. P. (2001). Salt water intrusion in a three-dimensional groundwater system in the Netherlands: a numerical study. *Transport in Porous Media*, 43(1), 137–158. Retrieved from <http://www.springerlink.com/index/u148u8130n5812r8.pdf>
- Oude Essink, G. H. P., & Forzoni, A. (2018). *Actualisatie zoet-zout verdeling in watervoerende pakketten in Zuid-Holland*. Deltares rapport 11200066-000.
- Oude Essink, G. H. P., Van Baaren, E. S., & de Louw, P. G. B. (2010). Effects of climate change on coastal groundwater systems: A modeling study in the Netherlands. *Water Resources Research*, 46(10), 1–16. <https://doi.org/10.1029/2009WR008719>
- Pebesma, E. (2009). *Threedimensional interpolation of subsurface chloride concentrations in the Netherlands*.
- Pebesma, E., & Graeler, B. (2019). Package 'gstat' Spatio-temporal geostatistical modelling, prediction and simulation. Version 2.0-2.
- Post, V. E. A., Kooi, H., & Simmons, C. T. (2007). Using hydraulic head measurements in variable-density ground water flow analyses. *Ground Water*, 45(6), 664–71. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2007.00339.x>
- Revil, A., Coperey, A., Shao, Z., Florsch, N., Fabricius, I. L., Deng, Y., et al. (2017). Complex conductivity of soils. *Water Resources Research*, 53(8), 7121–7147. <https://doi.org/10.1002/2017WR020655>
- Stuyfzand, P. J. (1993). *Hydrochemistry and hydrology of the coastal dune area of the Western Netherlands* (PhD thesis). Faculty of Earth Sciences, VU University Amsterdam.
- TNO-GDN. (2020). Grondwatertools - Zoet en zout grondwater. Retrieved January 15, 2020, from <https://www.grondwatertools.nl/zoet-en-zout-grondwater>

- Verkaik, J., Huizer, S., Engelen, J. Van, Ram, R., Vuik, K., & Oude Essink, G. H. P. (2018). Parallel Computing with SEAWAT. In *Proceedings 25th Salt Water Intrusion Meeting, Gdansk* (p. 347). Gdansk.
- Vernes, R. W., & Van Doorn, T. H. M. (2005). *Van Gidslaag naar Hydrogeologische Eenheid - Toelichting op de totstandkoming van de dataset REGIS II* (TNO report). TNO report. Utrecht, the Netherlands: Netherlands Inst. of Applied Geoscience TNO.
- Vos, P. C. (2015). *Origin of the Dutch coastal landscape - Long-term landscape evolution of the Netherlands during the Holocene, described and visualized in national, regional and local palaeogeographical map series*. Utrecht University.
- Van Der Walt, S., Colbert, S. C., & Varoquaux, G. (2011). The NumPy array: a structure for efficient numerical computation. *Computing in Science & Engineering*, 13(2).
- Waxman, M., & Smits, L. (1968). Electrical conductivities in oil-bearing shaly sands. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 8, 107–122. Retrieved from <https://www.onepetro.org/journal-paper/SPE-1863-A>
- Wolters, H., Hunink, J. C., Delsman, J. R., De Lange, G., Born, G. J. van den, & Reinhard, S. (2018). *Deltascenario's voor de 21e eeuw - Actualisering 2017 - Achtergrondrapport over gebruiksfuncties en sectoren*. Deltares rapport. Delft.
- Zheng, C., & Wang, P. (1999). *MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide*. Washington, DC.
- Zijl, F., Veenstra, J., & Groenenboom, J. (2018). *The 3D Dutch Continental Shelf Model - Flexible Mesh (3D DCSM-FM)*. Deltares rapport 1220339-000. Delft.

A Nadere invulling plausibiliteitstoets LHM zoet-zout

A.1 Inleiding

Binnen het project NHI zoet-zout wordt – naast een Toolbox NHI zoet-zout – een landsdekkend, dichtheidsgedreven zoet-zout grondwatermodel ontwikkeld, het LHM zoet-zout. Het op te leveren LHM zoet-zout wordt getoetst op plausibiliteit. In het projectplan staat hierover het volgende vermeld:

“De resultaten van het ontwikkelde basismodel LHM zoet-zout worden getoetst op plausibiliteit. Hierbij wordt op nationale schaal gekeken naar de berekende stijghoogte, fluxen, en zoutvrachten op polderniveau. Berekeningsresultaten van stijghoogten en fluxen worden vergeleken met LHM kwantiteit. Stijghoogten en zoutvrachten van geselecteerde polders worden vergeleken met beschikbare metingen op polderniveau. Daarnaast worden ook enkele lange termijn scenario’s (klimaat, zeespiegelstijging) verkennend doorgerekend en op basis van expertkennis en modelresultaten van regionale zoet-zout modellen geanalyseerd op plausible resultaten.”

Dit memo beschrijft de voorgenomen invulling van deze plausibiliteitstoets, en is mede gebaseerd op gevoerde discussies in het reviewteam (12 september 2019) en de projectgroep NHI zoet-zout (15 oktober 2019).

A.2 Plausibiliteit en verwachtingen

A.2.1 Definitie plausibiliteit

De definitie die hier wordt gebruikt voor de term *plausibiliteit* is als volgt:

Het model functioneert zodanig, dat: 1) verschillen tussen modelresultaten en metingen verklaard kunnen worden uit de gehanteerde modelparameters of meetfouten, 2) de respons van het model op opgelegde veranderingen van randvoorwaarden op basis van de fysica te verklaren is.

Wat hier expliciet dus niet wordt nagestreefd is een perfecte overeenkomst met metingen, maar een transparant model met verklaarbare resultaten op een nationale schaal. De plausibiliteitstoets toetst dat fysische processen correct in de software zijn geïmplementeerd en dat beschikbare gegevens juist zijn verwerkt tot modelinvoer.

A.2.2 Verwachtingen kwaliteit LHM zoet-zout

De verwachtingen ten aanzien van de kwaliteit van het LHM zoet-zout model zijn:

- De ontwikkeling van LHM zoet-zout is gekoppeld aan het LHM kwantiteit, waardoor er weinig manoeuvreerruimte is om parameters aan te passen. Met andere woorden, een groot deel van het LHM zoet-zout wordt één op één overgenomen uit het LHM kwantiteit, zoals bijvoorbeeld de geologie. Dit betekent dat de maximaal haalbare kwaliteit van het LHM zoet-zout sterk wordt bepaald door het LHM kwantiteit. Afwijkingen die worden veroorzaakt door het LHM kwantiteit, benoemen we in de rapportage met (indien van toepassing) een advies voor het LHM B&O spoor.
- De ontwikkeling van de 3D initiële zoet-zout verdeling (met als eenheid de chloride concentratie) is een goed startpunt, niet een ‘statische’ chlorideverdeling die lange tijd vast blijft staan. De insteek is om een transparante (eerste) schatting te maken, die in de loop van

- de tijd verder ontwikkeld kan worden; hiervoor wordt een workflow ontwikkeld waarbij in de loop van de tijd nieuwe data kan worden toegevoegd.
- Per regio bestaan er significante verschillen in de (micro)dynamiek in de zoet-zout verdeling, denk onder andere aan de regenwaterlenzen in Zeeland en de brakke zoet-zout verdeling achter de duinen in Noord- en Zuid-Holland. De zoet-zout verdeling voor het LHM zoet-zout wordt bepaald op nationale schaal, op een relatief grove schaal van 250*250m², met een focus op de kustzone (tot ca. 300 m-mv). De aanwezige (micro)dynamiek in de bestaande zoet-zout verdeling wordt dan ook niet volledig meegenomen in het model; daar is de schaal waarop we werken te grof voor.
 - De landelijke schaal is ook te grof voor detailmodelleringen zoals deze nodig zijn voor bijvoorbeeld verzilting van individuele onttrekkingen, WKO-installaties.
 - Met de Toolbox NHI zoet-zout kan iedereen op elk gewenst schaalniveau een deelmodel ontwikkelen en berekeningen uitvoeren. Dit is vanzelfsprekend wel (deels) afhankelijk van het schaalniveau waarop de gegevensbestanden beschikbaar zijn. De gegevensbestanden in de Toolbox NHI zoet-zout worden op nationale schaal ontwikkeld. Voor meer gedetailleerdere berekeningen kan hier meer lokale kennis aan worden toegevoegd.

A.3 Werkwijze Plausibiliteitstoets

De beoogde werkwijze van de plausibiliteitstoets bestaat uit een vergelijking met meetgegevens op basis van vastgestelde criteria en uit een expertbeoordeling van resultaten voor de huidige situatie en verschillende scenario's.

A.3.1 Vergelijking resultaten LHM zoet-zout op basis van vastgestelde criteria

Voor het LHM kwantiteit zijn verschillende toetsingscriteria vastgesteld (Hoogewoud et al., 2013). Het LHM kwantiteit wordt bij majeure versies getoetst aan de hand van deze toetsingscriteria, dit wordt gerapporteerd in een toetsingsrapportage. De toepasbaarheid van het LHM voor zoetwaterbeschikbaarheid-berekeningen is vervolgens op basis van deze criteria beoordeeld (Marchand & De Lange, 2013). Voor het LHM zoet-zout zijn niet alle toetsingscriteria relevant. Een deel van de toetsingscriteria heeft betrekking op de onverzadigde zone of het oppervlaktewater, domeinen die beide niet worden beschouwd in LHM zoet-zout. Ook heeft een deel van de criteria betrekking op de korte-termijn-respons van het grondwater (GxG). De afwezigheid van een onverzadigde zone en de gehanteerde tijdstapgrootte in het LHM zoet-zout sluiten een juiste berekening van deze grondwaterkarakteristieken uit.

De volgende toetsingscriteria uit (Hoogewoud et al., 2013) zijn relevant voor LHM zoet-zout:

- 1 Stationaire freatische grondwaterstand
- 2 Diepe stijghoogten
- 3 Gemiddelde zoutvracht in geselecteerde waterbalanseenheden

Om afwijkingen in de gemiddelde zoutvracht te kunnen splitsen in de bijdrage van de kwelflux en de zoutconcentratie van het grondwater voegen we hier een extra criterium aan toe:

- 4 Gemiddelde kwelflux in geselecteerde waterbalanseenheden

Deze toetsingscriteria worden in hoofdstuk 4 verder uitgewerkt.

Het LHM zoet-zout is consistent met en in belangrijke mate gebaseerd op LHM kwantiteit. Van LHM zoet-zout kan dan ook niet verwacht worden dat het beter scoort op toetsingscriteria dan LHM kwantiteit. De score van LHM zoet-zout op de genoemde toetsingscriteria zal dan ook worden afgezet tegen de score van LHM kwantiteit versie 3.0 op deze toetsingscriteria. LHM kwantiteit versie 3.0 is de meest recente versie van het LHM kwantiteit die is getoetst aan de criteria (Hoogewoud et al., 2013).

Het LHM zoet-zout is gebaseerd op de nog op te leveren versie 4.0 van het LHM kwantiteit. De toetsing van LHM 4.0 zal pas in 2020 plaatsvinden, waarschijnlijk pas nadat de plausibiliteitstoets van LHM zoet-zout wordt uitgevoerd. Dit levert het risico op dat, wanneer het LHM kwantiteit 4.0 een verslechtering betekent ten opzichte van versie 3.0, het LHM zoet-zout strenger wordt beoordeeld dan vanuit de randvoorwaarden mogelijk. Wanneer tijdens de toetsing het vermoeden rijst dat een onvoldoende score op de toetsingscriteria te wijten is aan gewijzigde randvoorwaarden in LHM 4.0 ten opzichte van LHM 3.0, zal dit worden gestaafd door de (deel)toetsing ook uit te voeren voor LHM kwantiteit 4.0.

A.3.2 Expertbeoordeling resultaten LHM zoet-zout voor huidige situatie en scenario's

Naast de hiervoor beschreven toetsing aan de hand van toetsingscriteria, wordt gekeken naar de plausibiliteit van de respons van het LHM zoet-zout op veranderingen in de randvoorwaarden. Deze respons wordt door experts beoordeeld, aan de hand van geohydrologische kennis en waar beschikbaar resultaten uit regionale modelleringen.

De respons zal worden beoordeeld op de volgende vier scenario's:

- 5 *Autonoom 2100* - In dit scenario wordt onder gelijkblijvende (huidige) randvoorwaarden de zoutverplaatsing berekend over de periode huidig tot 2100.
- 6 *Zeespiegelstijging 2100* – In dit scenario wordt de in KNMI'14 scenario Wh verwachte zeespiegelstijging opgelegd (stijging tot 1m in 2100). Verdere randvoorwaarden blijven gelijk aan Autonoom 2100.
- 7 *Klimaat Wh 2100* – In dit scenario wordt naast de in KNMI'14 scenario Wh verwachte zeespiegelstijging ook de verwachte verandering in grondwateraanvulling opgelegd.
- 8 *Stoom 2100 (inclusief socio-economische veranderingen)* - In dit scenario wordt naast de in KNMI'14 scenario Wh verwachte zeespiegelstijging en grondwateraanvulling, ook de in het Deltascenario Stoom (Wolters et al., 2018) verwachte socio-economische ontwikkeling opgelegd. Het gaat dan bijvoorbeeld om een toename van onttrekkingshoeveelheden ten behoeve van drinkwater en industrie.

Voor de scenario's 3 en 4 is een berekende grondwateraanvulling nodig uit het LHM kwantiteit. Deze zijn in het kader van het Deltaprogramma Zoetwater beschikbaar gekomen (Mens et al., 2019). Ook zijn voor Deltascenario Stoom reeds invoerbesteden beschikbaar (Hunink et al., 2018).

Voor de beoordeling van de respons van het LHM zoet-zout op deze scenario's wordt in ieder geval beoordeeld op de respons van met name de berekende zoet-zoutverdeling in het model op vijf representatieve profielen over Nederland. Deze profielen zijn gepubliceerd in (inter)nationale (peer-reviewed) rapporten tijdschriften, bij enkele is ook gekeken naar de respons op zeespiegelstijging en klimaatverandering.

- 9 Zeeland over Walcheren naar Brabantse Wal (Van Baaren et al., 2016)
- 10 Zuid-Holland over Delfland (Oude Essink et al., 2010; Oude Essink & Forzoni, 2018)
- 11 Zandvoort naar Hilversum (Delsman et al., 2014; Stuyfzand, 1993)
- 12 Alkmaar via Schermer naar IJsselmeer (Oude Essink, 2001)
- 13 Friesland bij Harlingen (Boukes et al., 2017; Faneca Sánchez et al., 2012)

Naast deze profielen wordt de respons van stijghoogten, kwel, en zoutvracht vergeleken met eerdere studies (onder meer Van Baaren et al., 2016; Faneca Sánchez et al., 2012; Oude Essink et al., 2010).

De expertbeoordeling zal voor versie 1 plaatsvinden in een expertsessie met geohydrologen vanuit het uitvoeringsteam en het reviewteam. In deze expertsessie worden resultaten bekeken en bediscussieerd. Waar het model als niet-plausibel wordt beoordeeld, wordt onderzocht waar dit door wordt veroorzaakt. Wanneer de oorzaak blijkt te liggen in de parameterisatie van LHM kwantiteit, worden de afwijkingen beschreven en aangemeld voor verbetering in het lopende

beheer en onderhoud van het LHM kwantiteit. Wanneer blijkt dat niet-plausibel modelgedrag wordt veroorzaakt door fouten in de vertaling van de beschikbare gegevens tot modelinvoer, worden deze hersteld in de definitieve op te leveren versie.

Voor de definitieve versie zal een expertbeoordeling plaatsvinden in een soortgelijke expertsessie met geohydrologen vanuit het uitvoeringsteam en het reviewteam. In deze expertsessie worden resultaten van het definitieve bekeken en bediscussieerd.

A.3.3 Vastlegging

Het resultaat van de toetsing van de definitieve versie LHM zoet-zout op de toetsingscriteria, wordt vastgelegd in een toetsingsrapportage LHM zoet-zout.

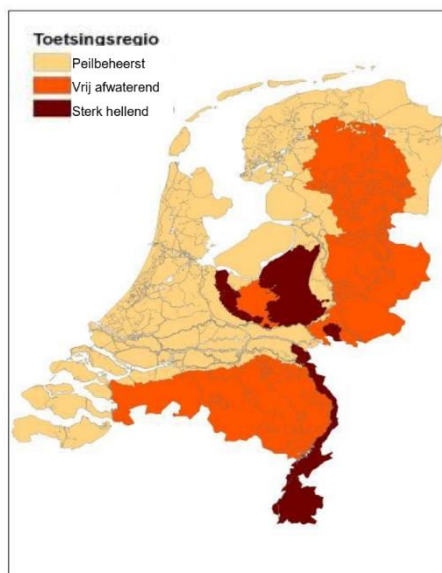
A.4 Toetsingscriteria

A.4.1 Freatische grondwaterstanden

Ten aanzien van de freatische grondwaterstanden hanteren we de criteria van het LHM kwantiteit. Het uitgangspunt hierbij is geen significante verslechtering ten opzichte van de resultaten van het meest recente getoetste LHM model (versie 3.0, (Hoogewoud et al., 2013)). De dichtheidsverdeling beïnvloedt uiteraard de freatische grondwaterstanden; zo kan in het duingebied langs de kust de freatische grondwaterstand meer opbollen dan wordt berekend met een constante-dichtheid model, omdat op diepte de concentratie van het grondwater brak of zout is. Tevens wordt het LHM zoet-zout niet op dag basis doorgerekend, waardoor een één op één vergelijking ten aanzien van de GHG, de GLG en de dynamiek niet mogelijk is. In plaats daarvan vergelijken we de stationaire grondwaterstand met dezelfde criteria als voor de GLG zijn gehanteerd (Hoogewoud et al., 2013):

Tabel A.1 Criteria voor de stationaire grondwaterstand.

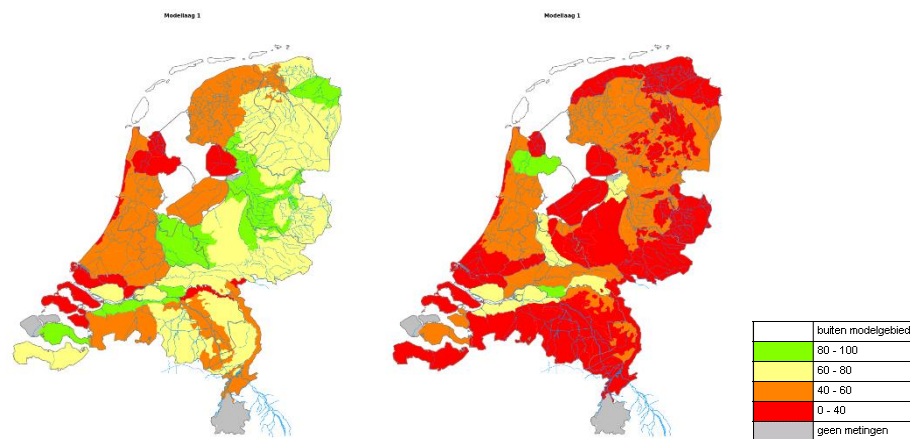
Indicator	Criterium
Stationaire grondwaterstand (landelijk gebied)	In 80% van de meetpunten in een gebied: Peilbeheerst gebied: max. 30 cm afwijking Vrij afwaterend: max. 50 cm afwijking Sterk hellend: max. 100 cm afwijking Afwijking van de mediaan < 15 cm



Figuur A.1 Onderverdeling peilbeheerst, vrij-afwaterend, sterk hellend.

Het NHI 3.0 voldeed wat GHG en GLG betreft voor een deel niet aan de gestelde criteria (Tabel A.1). Daarvoor waren een aantal oorzaken aan te wijzen:

- Het verschil tussen de puntwaarneming representatief voor ca 1-5 m² en de celwaarde die het gemiddelde over een oppervlakte van 250 bij 250 m² weergeeft;
- Het verlies aan onderscheid in parametervariatie door schematisatie op 250m resolutie;
- Het verschil in de werkelijke oppervlaktewater peilen met de best mogelijke parameterisatie daarvan in NHI;
- De betrouwbaarheid / onnauwkeurigheid van de meetset;



Figuur A.2 Percentage meetpunten die voldoen aan het criterium voor GLG (links) en GHG (rechts) voor LHM kwantiteit versie 3.0.

Tabel A.2 Resultaten van de toetsing voor NHI 3.0.

Indicator	Afwijking voldoet [%]	Mediaan [m]
GHG	51	-0.03
GLG	66	-0.07

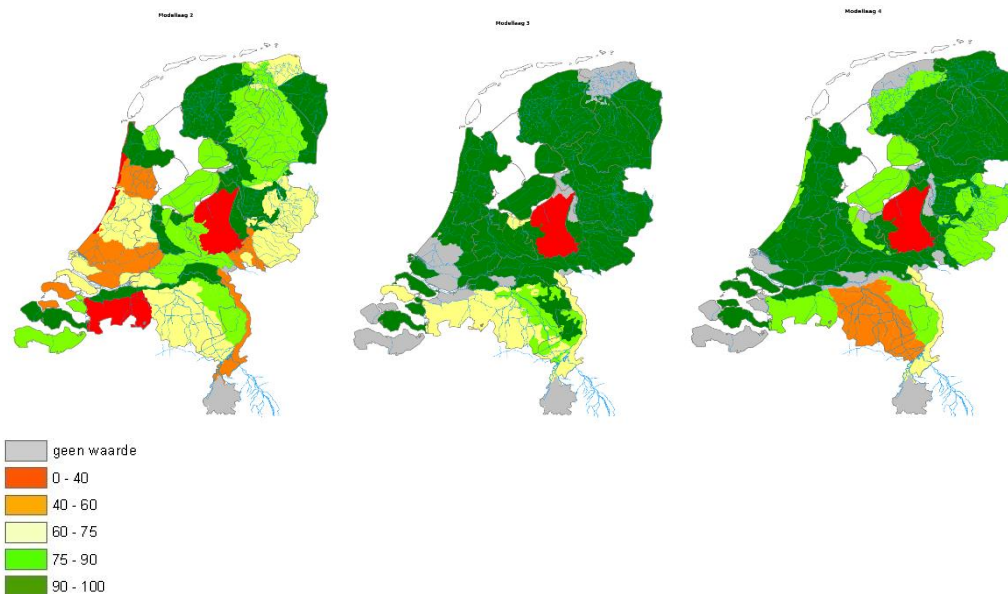
A.4.2 (Diepe) stijghoogten

Ten aanzien van de (diepe) stijghoogten hanteren we dezelfde criteria als bij het LHM kwantiteit voor diepe stijghoogten. Het uitgangspunt hierbij is geen significante verslechtering ten opzichte van de resultaten van het meest recente getoetst LHM model (versie 3.0). In de analyse wordt vanzelfsprekend rekening gehouden dat de dichtheid de stijghoogte beïnvloedt (zie onder andere Post et al. (2007)).

Tabel A.3 Criteria voor (diepe) stijghoogten.

Indicator	Criterium
WVP 1 (modellaag 2)	In 80% van de meetpunten maximaal 50 cm afwijking. Mediaan van de afwijking < 15 cm
Diepe grondwaterstanden (modellaag 3 – 7)	In 80% van de meetpunten per modellaag maximaal 100 cm afwijking. Mediaan van de afwijking < 15 cm.

De toetsingsresultaten van LHM versie 3.0 zijn weergegeven in Tabel A.4 en Figuur A.3. Voor het eerste watervoerende pakket wordt in meer dan 70% van de meetpunten voldaan aan het toetsingscriterium. Voor de diepere stijghoogten, vanaf het tweede watervoerende pakket, zijn de toetsingscriteria minder streng en voldoet het NHI 3.0 voor zo'n 90% van de meetpunten. Grote afwijkingen zijn met name te vinden op de Veluwe.



Figuur A.3 Percentage meetpunten die voldoen aan het criterium voor diepe stijghoogte voor modellaag 2 (links), 3 (midden) en 4 (rechts) voor LHM kwantiteit versie 3.0.

Tabel A.4 Resultaten van de toetsing voor LHM versie 3.0.

Modellaag diepe grondwater	Mediaan [m]	Gemiddelde [m]	Standaard afwijking [m]	Deel metingen dat voldoet [%]
Laag 2	-0.01	0.09	0.86	71
Laag 3	-0.05	-0.02	0.71	89
Laag 4	-0.11	-0.17	0.82	89
Laag 5	-0.04	-0.09	0.78	90
Laag 6	-0.03	-0.15	1.19	72
Laag 7	-0.30	-0.45	0.87	89

A.4.3 Zoutvrachten

Ten aanzien van de zoutvracht hanteren we dezelfde criteria als bij het LHM kwantiteit. Het uitgangspunt hierbij is geen significante verslechtering ten opzichte van de resultaten van het LHM versie 3.0. Zoutvrachten worden in LHM kwantiteit dynamisch berekend door zouttransport door de ondiepe ondergrond te modelleren (met behulp van het model TRANSOL). Hierbij geldt in LHM kwantiteit een vast opgelegde concentratie aan de onderkant van de deklaag. LHM zoet-zout berekent de verplaatsing van zout in het verzadigde grondwater, en bepaalt de gemiddelde zoutvracht als de massaflux over de onderkant van de deklaag (dus zonder berging in het ondiepe systeem). Hoewel het hier om ietwat andere grootheden gaat, hanteren we omwille van de vergelijkbaarheid wel hetzelfde criterium.

Het toetsingscriterium voor zoutvracht wordt door Hoogewoud et al. (2013) als volgt onderbouwd:

“De zoutvrachtberekeningen van de waterbalansstudies variëren wat betreft de methode van berekening. Sommige studies bepalen de zoutvracht als gevolg van zoute kwel en andere studies gaan uit van de totale zoutvracht die uit de polder (in de buurt van het gemaal) wordt uitgeslagen, in de vorm van een gemeten zoutconcentratie vermenigvuldigd met een waterflux. Het is daarbij echter zelden duidelijk hoe de zoutvracht exact is bepaald. Tevens zitten er onzekerheden in de bepaling van de zoutvracht als gevolg van zoute kwel. Alles bij elkaar heeft dit grote invloed op het

resultaat. Daarom kan de vergelijking van de NHI modelresultaten met de gemeten waarden alleen gedaan worden op basis van de orde van grootte en niet op basis van exacte getallen.”

Tabel A.5 Toetscriteria voor zoutvrachten

Indicator	Criterium
Zoutvracht in gebied met maximaal 2 meetwaarden	Voor 80% van de gebieden is de maximale toegestane afwijking een factor 3.
Zoutvracht in gebied met meer dan 2 meetwaarden	Voor 80% van de gebieden is de maximale toegestane afwijking een factor 2.

Resultaten van de toetsing voor NHI 3.0: In de Haarlemmermeerpolder voldoet NHI 3.0 in 4 van de 5 gevallen binnen de factor 1.5. In de polder Schermer voldoet NHI 3.0 aan het criterium voor één waarneming (~ factor 2). NHI 3.0 voldoet aan de toetsingscriteria op basis van zoutvrachten.

A.4.4 Gemiddelde (totale) kwelflux in (water)balansgebieden

Het LHM kwantiteit wordt niet specifiek getoetst op de berekende kwelflux. Wel wordt getoetst op de totale afvoer uit balansgebieden, maar daar is de neerslag-afvoer component meestal dominant in. We kiezen er daarom voor om het toetsingscriterium voor de kwelflux te baseren op het toetsingscriterium voor de zoutvracht. Aannemende dat de onzekerheid in de zoutvracht gelijk verdeeld is over de onzekerheid in de kwelflux en de onzekerheid in de chlorideconcentratie, en de kwelflux en de chlorideconcentratie onafhankelijke variabelen zijn, is de relatieve onzekerheid in de kwelflux ongeveer 70% van de totale relatieve onzekerheid.¹

Tabel A.6 Criteria voor de gemiddelde (totale) kwelflux in waterbalansgebieden

Indicator	Criterium
Kwelflux in gebied met maximaal 2 meetwaarden	Voor 80% van de gebieden is de maximale toegestane afwijking 210%.
Kwelflux in gebied met meer dan 2 meetwaarden	Voor 80% van de gebieden is de maximale toegestane afwijking 105%.

¹Dit volgt uiteindelijk uit: $Var(XY) = [E(X)]^2 Var(Y) + [E(Y)]^2 Var(X) + Var(X)Var(Y)$, waarbij voor zowel de kwelflux (X) als de zoutconcentratie (Y) een gelijke relatieve standaarddeviatie is gehanteerd.