

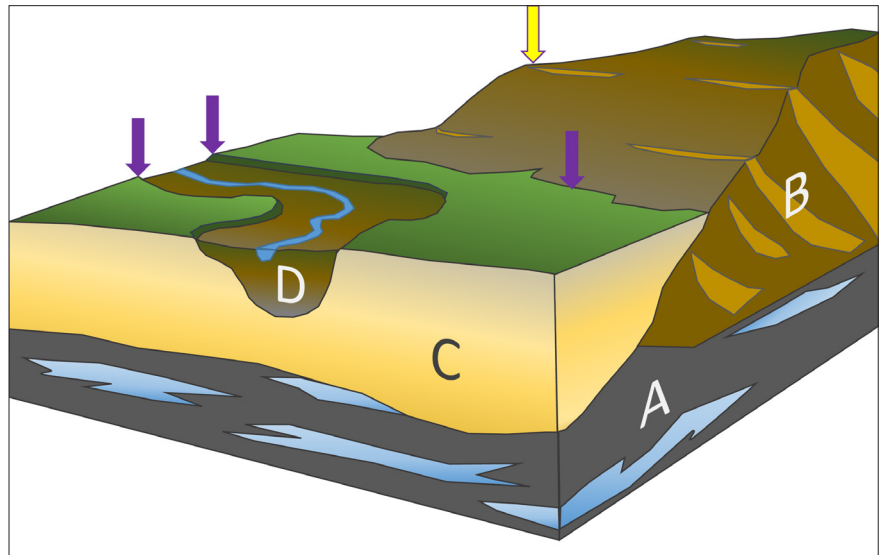
Geostatistisk model af geologi og redox

Geostatistisk modellering inddrager relevant viden og data i en samlet model, der er anvendt ved udarbejdelsen af detaljerede retentionskort for nitrat. Ved at indbygge variationen på inputdata kan usikkerheden på den geologiske model og redoxstrukturerne estimeres. Dette bruges i beregning af usikkerheden på detaljerede N-retentionskort.

RASMUS BØDKER MADSEN, PETER B.E. SANDERSEN, INGELISE MØLLER, THOMAS MEJER HANSEN, BIRGITTE HANSEN, ANDERS VEST CHRISTIANSEN & HYOJIN KIM

Geofysiske metoder til dataindsamling har været under rivende udvikling de seneste år. Det er nu muligt at kortlægge geofysiske strukturer i overfladenære dele af undergrunden i høj detaljegrade ned til omkring 80 m under terræn. Dette er gjort med tTEM-metoden, som er videreudviklet i Mapfield-projektet /1/. Den store udfordring ved disse data er, hvordan den geofysiske information oversættes til information om geologi og redoxforhold. Dette er vigtigt i forbindelse med fx. kortlægning af vandressourcer, forurening eller N-retentionskortlægning. Hvis disse data skal tolkes manuelt, er opgaven tidskrævende, idet geofysisk information skal samles og integreres med fx. geokemisk og hydrogeologisk information. Samtidig kan alle data, inklusive de geofysiske data, være tvetydige. Dermed må en vis usikkerhed forventes på den endelige model. Denne usikkerhed er typisk svær at kvantificere og gøre brugbar for det videre modelleringsarbejde eller for beslutningstagere.

Anvendelse af geostatistiske metoder, der laver en mere direkte og automatiseret numerisk modellering, gør det typisk nemmere at håndtere store datamængder, da modelleringsarbejdet bliver mindre "håndholdt". Ulempen er, at der kan ske et tab af ekspertviden, som bliver brugt i stor udstrækning un-



Figur 1. Skitse af geologiske elementer fra /3/.

der manuel tolkning. Derudover findes der flere geostatistiske metoder på markedet, som ikke giver helt samme resultater, da forskellige beregningsmetoder anvendes – altså skal der træffes et metodevalg. Hvis en mindre egnet metode vælges, vil den estimerede usikkerhed ikke være troværdig. I tilfælde hvor usikkerheden er underestimeret, kan det sågar give en falsk tryghed for modellens rimelighed.

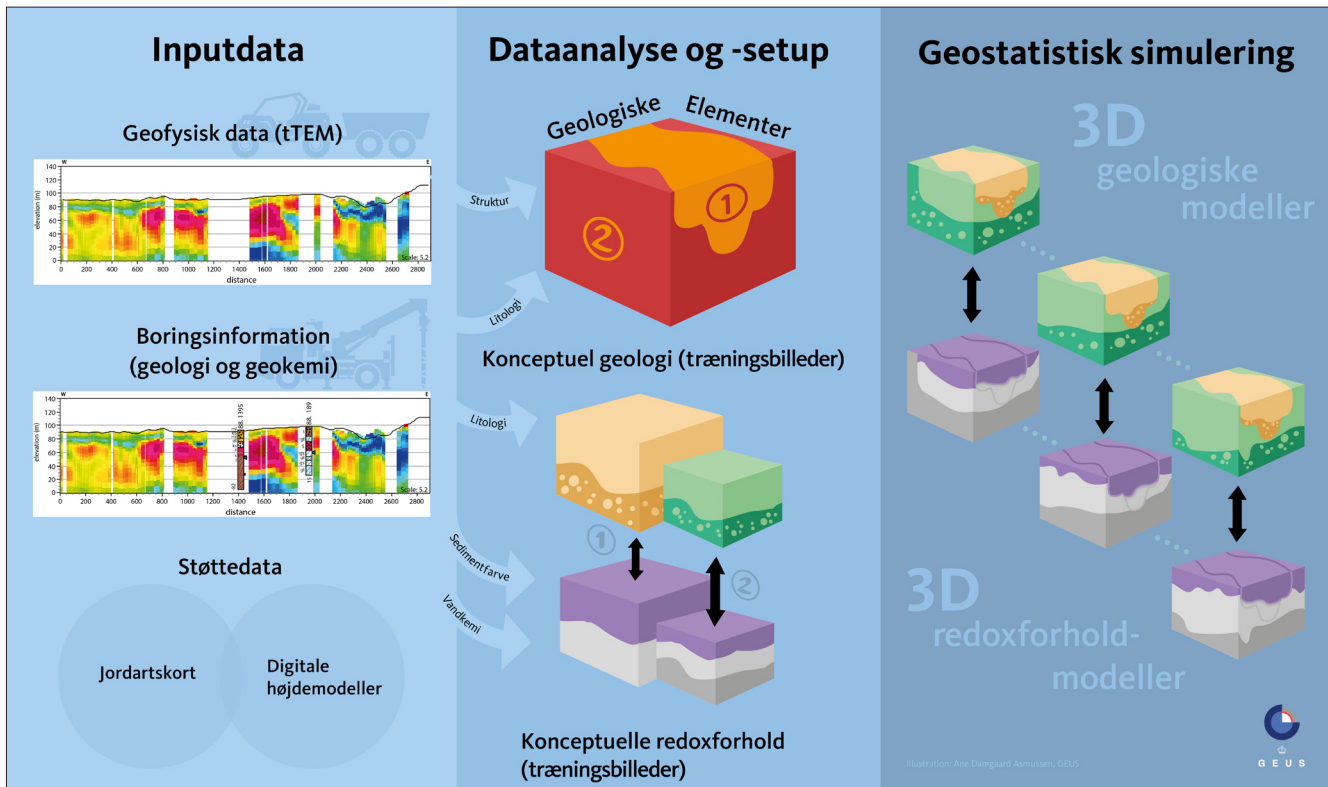
I det følgende præsenteres et bud på et modelleringskoncept, baseret på geostatistisk simulering, hvor det er muligt at integrere tilgængelig strukturel information om geologi og redoxforhold. Metoden er semi-automatisk således at selve kombinationen af data gøres numerisk, mens dataklargøring og tolkning foregår manuelt. Dette sikrer et nødvendigt kompromis mellem en tidsbesparende numerisk dataintegration og inddragelse af relevant

ekspertviden. Metoden giver desuden mulighed for at vurdere usikkerheden i modellen kvantitativt. I praksis er hvert punkt i modellen behæftet med en usikkerhed, der dels beror på dataenes usikkerhed og dels på usikkerheden af den geologiske og geokemiske viden. Simuleringsmetoden er tidligere publiceret i et internationalt tidsskrift /2/ og det overordnede modelleringskoncept er rapporteret /3/. I denne artikel vil metoden blive kort beskrevet og generelle perspektiver blive præsenteret.

Geostatistisk modellering med geologiske elementer

Det udviklede modelleringskoncept hviler på tre hjørner:

1. Modsat manuel tolkning, foretages dataintegrationen gennem geostatistisk simulering baseret på "Multiple-Point geoStatistics"



Figur 2. Overordnet workflow i modelleringskonceptet fra /2/ og /3/.

(MPS) /4/. Geologen og geokemikeren bidrager med den overordnede forståelse af området gennem såkaldte træningsbilleder. Træningsbilleder er eksempler på hvordan geologi og redoxforhold kan se ud, og som skal være konsistent med geologisk og geokemisk viden. Disse billeder rummer dermed de dele af den konceptuelle forståelsesmodel, der skal beskrives geostatistisk. Desuden bidrager eksperterne med justering af MPS-algoritmen og dataanalyse, før den endelige geostatistiske modellering påbegyndes og derefter med kvalitetskontrol af resultaterne.

2. Undergrunden i området inddeles i geologiske elementer (figur 1), der repræsenterer grupper af lag, der kan relateres til specifikke dele af den geologiske historie i området og betragtes som statistisk uafhængige /3/. På denne måde sikres, at lokal variation kan håndteres over hele modelområdet. Samtidigt mindsker det behovet for store træningsbilleder, fx. ét samlet træningsbillede for hele området. Da det er tidskrævende at danne statistik for store træningsbilleder, har opdelingen i de geologiske elementer derfor en markant positiv indvirkning på den tid, det tager at simulere. Det medfører også en væsentlig tidsbesparelse for geologen, da opgaven med 3D inddeling af området i overordnede geologiske elementer er nemmere end at konstruere en detaljeret manuel model.

3. Geologi og redoxforhold simuleres samtidigt så modellerne bliver koblet på tværs af de to domæner. Dette sikrer, at der er overensstemmelse mellem geologi og redoxforhold, når der senere skal opstilles grundvandsmodeller på de enkelte realisationer. Hvis geologien indikerer, at vandet løber en bestemt vej, skal redoxforholdene også passe til den geologi, der findes langs vandets løbebaner.

Figur 2 viser hvordan de indsamlede data dels kan bruges til at adskille området i geologiske elementer dels til at hjælpe med at konstruere en konceptuel forståelse af geologi og redox for hvert element. De sorte pile mellem træningsbilleder af geologi og redox henviser til billedernes koblede natur. Af den geostatistiske modellering kommer der flere mulige realisationer af undergrunden, der alle rummer variationen på inputdata og som alle er koblede ligesom træningsbillederne (igen indikeret med sorte pile). I det præsenterede modelleringskoncept består inputdata primært af data fra tTEM kortlægning og boringsinformation om litologi og sedimentfarver, samt grundvandskemiske analyser.

Træningsbilleder af geologi og redoxforhold

Træningsbillederne af både geologi og redoxforhold spiller en central rolle i modelleringskonceptet. Et geologisk træningsbil-

lede konstrueres manuelt ved brug af den geofysiske model, boringsinformationer og karakteristika for den forventede geologi i området. Denne proces sikrer, at træningsbilledet indeholder den ekspertviden som geologen besidder, samtidig med at der sikres en sammenhørighed med de geofysiske data og boringsinformationer.

Geokemikeren konstruerer derefter manuelt et træningsbillede af redoxforholdene på baggrund af det geologiske træningsbillede og geokemiske data (sedimentfarver og grundvandskemi). Ved at konstruere træningsbillederne sekventielt, kan viden om den geologiske opbygning tages med i betragtning, når træningsbilledet af redoxforholdene konstrueres. Det er også i dette skridt, at den vigtige relation mellem de to domæner oprettes.

Når begge træningsbilleder er konstrueret, er det muligt at simulere realisationer kun baseret på information fra træningsbillederne. Disse realisationer kan inspiceres af eksperterne for at afgøre, om den valgte MPS-algoritme er i stand til at gengive strukturerne i træningsbillederne i tilfredsstillende grad. Hvis ikke dette er tilfældet kan simuleringens parametrene i den geostatistiske metode justeres og nye realisationer konstrueres og vurderes. Denne proces fortsættes indtil eksperterne er tilfredse med de simuleringer, der genereres. Disse accepterede realisationer repræsenterer den strukturelle viden om geologien og redoxforholdene i undergrunden.



Figur 3. Skitse af statistisk forhold mellem litologi og resistivitet.

Udvælgelse af inputdata til modellerne

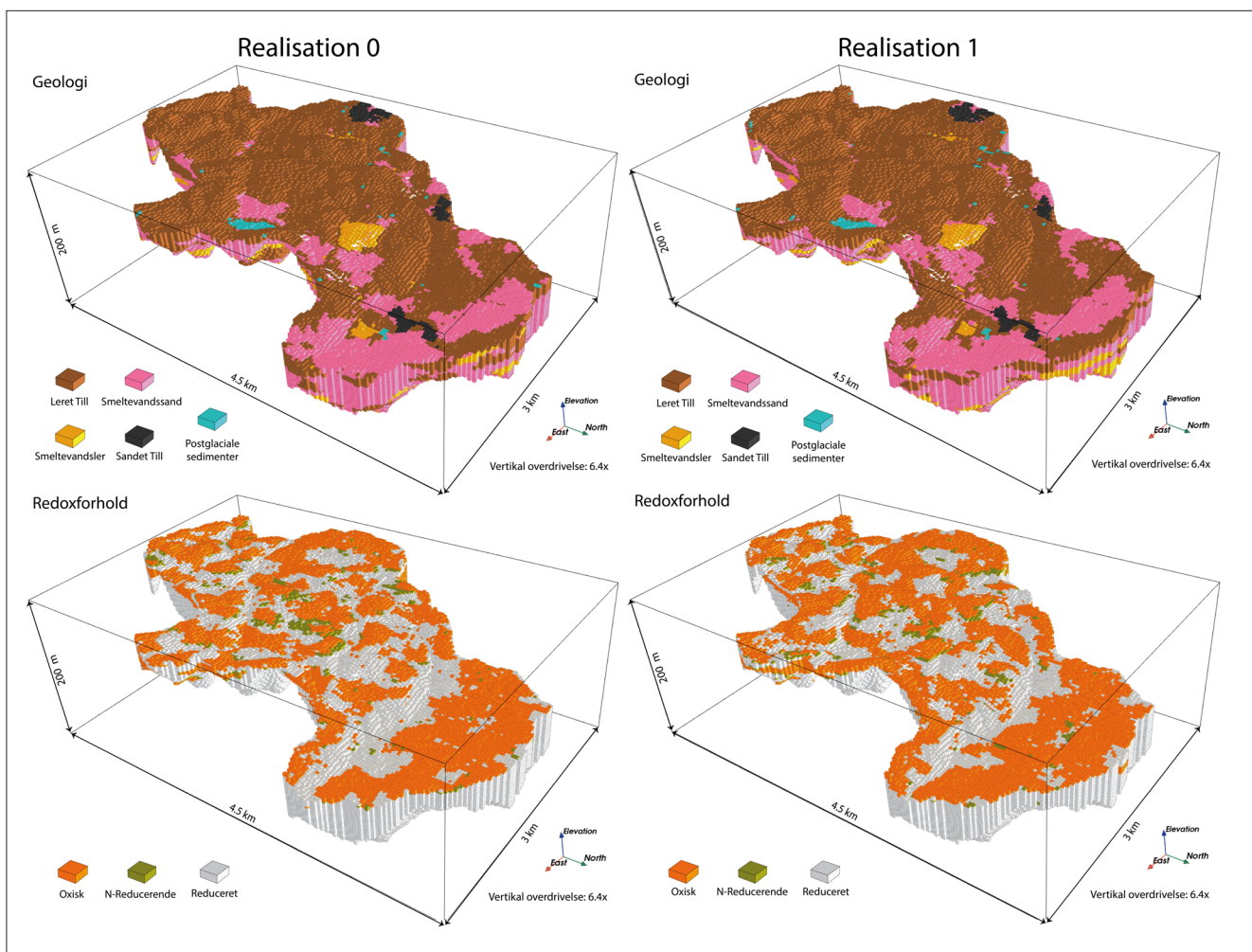
De koblede realisationer af geologi og redoxforhold bygger primært på boringsdata og de mere fladedækkende geofysiske data. Beskrivelse af litologi i borerer giver sammen med jordartskortet direkte information om geologien. Da boringsdata typisk er meget

sikre, kan denne information bruges som "hårde" data i modelleringen. Ved at placere denne information direkte i modellen vil realisationerne altid være i overensstemmelse med disse data. Derfor kaldes de "hårde" data. Farvebeskrivelser og grundvandskemiske analyser i borerer konverteres til et redoxforhold, hvor fx. en rød sedimentfarve indikerer

oxiske forhold og grå/blå sedimentfarver indikerer reducerede forhold. Disse boringsdata med kendte redoxforhold benyttes ligeledes som "hårde" data.

De geofysiske data giver indirekte information om geologien, da elektromagnetiske metoder måler resistiviteten, altså jordens modstand mod at lede elektricitet. Resistiviteten skal derfor konverteres til litologisk information. Der findes ikke en én til én korrelation mellem resistivitet og litologi /5/. For mange resistivitetsværdier vil flere mulige litologier kunne forklare den observerede resistivitetsværdi. Som vist i figur 3 vil der groft sagt ved meget lave elektriske modstande være overvejende sandsynlighed for ler og omvendt meget lave sandsynligheder for sand (medmindre det indeholder salt porevand). Ved højere elektriske modstande vil dette billede gradvist overgå til, at sand bliver mest sandsynligt. Der er således et spænd af resistivitetsværdier, hvor der er tvetydighed i hvilken litologi, der skal tilskrives.

I et givet undersøgelsesområde starter opgaven derfor med at beskrive forholdet mellem resistivitet og litologi statistisk. Det vil sige, at hver resistivitetsværdi skal kunne over-



To eksempler på koblede realisationer fra MPS-simulering af geologi og redoxforhold modificeret fra /1/.

sættes til en sandsynlighed for bestemte litologier frem for en direkte konvertering. I modeleringskonceptet etableres dette forhold ud fra træningsbilledet og de geofysiske data, der er til rådighed inden for træningsbilledets udbredelse. Dette bevirker, at forholdet bestemmes lokalt. Fordelen herved er, at der vil være overvejende overensstemmelse mellem de geofysiske data og træningsbillederne. Ved at konvertere alle geofysiske data til sandsynligheder for bestemte litologier kan tvetydigheden i de geofysiske data håndteres lokalt.

Perspektiver

I sidste ende kan der med den valgte geostatistiske metode genereres realisationer, som er koblede mellem geologi og redoxforhold, og som bygger på boringsinformationer inkl. grundvandskemi og geofysiske data (figur 4). Med den numeriske dataintegration er det muligt at inkorporere meget forskellige informationer i de endelige modeller, også ud over de datakilder, der er brugt her. Disse informationskilder skal blot kunne konverteres til information om geologi eller redoxforhold, så den tilhørende usikkerhed kan beskrives.

Den semi-automatiserede modeleringsprocedure sikrer, at opgaven med at skabe træningsbilleder og inddeling i geologiske elementer er veldefineret af eksperter. Metoden åbner dermed op for at kunne håndtere usikkerheder, der er mere "lige til" at kvantificere for folk uden baggrund i statistisk. Ydermere giver denne tilgang mulighed for en mere intuitiv videregivelse af undergrundens beskaffenhed, herunder usikkerheder i modellen, til fx. grundvandsmodellører eller interessenter.

Overordnet har MPS-modelleringen af geologi og redoxforhold vist, at det er afgørende, at disse simuleres samtidigt og ikke separat, da dette sikrer, at modellerne ikke er i modstrid. Arbejdet har også vist vigtigheden i at

skabe modeller, der er konsistente med geologisk, geofysisk og geokemisk viden. Med andre ord er det vigtigt, at ekspertviden også medtages. Dette giver de mest robuste modeller i den sidste ende. Det svære består i at oversætte ekspertviden til en statistisk form og sikre, at hver ekspert ikke antager for meget om systemet. Ellers vil resultaterne have risiko for at blive "farvede" af en bestemt type data eller information fra én bestemt kilde.

Selvom det ikke er et problem, der knytter sig specifikt til MPS-modellering, er arbejdet med at skabe et robust forhold mellem resistivitet og litologi meget vigtigt for, hvordan de geofysiske data bliver integreret og væggtet i modellen. Herunder er det også vigtigt at vurdere, hvor lokalt dette forhold skal være, da der kan være stor forskel på, hvordan geologien relaterer sig til resistiviteten på landsplan /5/.

Da den udviklede metode er ny, er der heller ikke megen præcedens og eksempler på, hvordan træningsbilleder skal konstrueres. Denne mangel på praktisk erfaring gør sig især gældende for redoxforholdene /6/. En fordel ved brugen af geologiske elementer i denne forbindelse er, at der på længere sigt vil kunne opstilles et katalog af træningsbilleder for forskellige typer af geologiske elementer. Disse træningsbilleder kan genbruges enten i deres rene form eller justeres til at passe til det bestemte område, der arbejdes i. Dette vil medføre en markant tidsbesparelse for den enkelte geolog og geokemiker.

Der er dog ikke nogen tvivl om, at den geostatistiske tilgang til modellering af både geologi og redoxforhold i undergrunden vil være nyttig i fremtiden i takt med at datamængderne stiger i de detaljerede kortlægninger fx. i forbindelse med målrettet N-regulering eller ved lokale risikovurderinger af punktkildeforureninger.

Referencer

- /1/ Auken, E., Foged, N., Larsen, J.J., Lassen, K.V.T., Maurya, P.K., Dath, S.M. og Eiskjær, T.T. 2019: tTEM - A towed transient electromagnetic system for detailed 3D imaging of the top 70 m of the subsurface. *Geophysics* 84, E13–E22. <https://doi.org/10.1190/geo2018-0355.1>
- /2/ Madsen, R.B., Kim, H., Kalløe, A.J., Sandersen, P.B.E., Vilhelmsen, T.N., Hansen, T.M., Christiansen, A.V., Møller, I. og Hansen, B. 2021: 3D multiple-point geostatistical simulation of joint subsurface redox and geological architectures. *Hydrology and Earth System Sciences* 25, 2759–2787.
- /3/ Sandersen, P.B.E., Kalløe, A.J., Madsen, R.B., Kim, H., Jakobsen, R. og Hansen, B. 2022: GEUS RAPPORT 2022/6. The Geological Elements approach of MapField: Detailed mapping and modelling of integrated geological and redox structures of the subsurface.
- /4/ Mariethoz, G. og Caers, J., 2015: Multiple-point geostatistics: Stochastic modeling with training images, 1. udgave. John Wiley & Sons.
- /5/ Barfod, A.S., Møller, I. og Christiansen, A.V. 2016: Compiling a national resistivity atlas of Denmark based on airborne and ground-based transient electromagnetic data. *Journal of Applied Geophysics* 134, 199–209.
- /6/ Kim, H., Jakobsen, R., Aamand, J., Claes, N., Erlandsen, M. og Hansen, B. 2021: Upscaling of Denitrification Rates from Point to Catchment Scales for Modeling of Nitrate Transport and Retention. *Environ. Sci. Technol.* 55, 15821–15830.

RASMUS BØDKER MADSEN (rbm@geus.dk) og HYOJIN KIM (hk@geus.dk) er forskere, PETER B.E. SANDERSEN (psa@geus.dk), INGELISE MØLLER (ilm@geus.dk) og BIRGITTE HANSEN (bgh@geus.dk) er seniorforskere. Alle ved GEUS, Universitetsbyen, Århus C.

THOMAS MEJER HANSEN (tmeha@geo.au.dk) er lektor og ANDERS VEST CHRISTIANSEN (anders.vest@geo.au.dk) er professor begge ved Institut for Geoscience, Aarhus Universitet