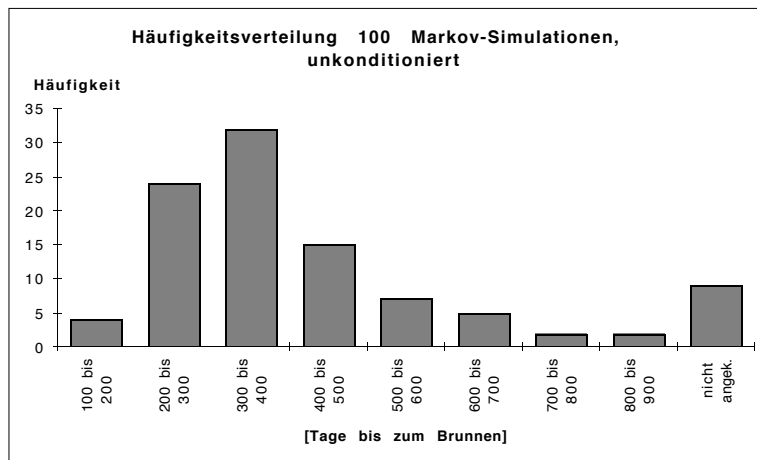


---

Christian A. Gillbricht

# Stochastische Grundwassermodellierung in der ingenieurtechnischen Praxis



Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung ohne Zustimmung des Verfassers und des Verlegers ist unzulässig. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung in und Verarbeitung durch elektronische Systeme.

© Kay W. Sörensen, Hamburg, Dezember 1997

Grafik: Christian A. Gillbricht, Hamburg

Satz: Kay W. Sörensen

Druck und Einband: Buch- & Offsetdruckerei Günter Stubbemann GmbH, Hamburg

Kay W. Sörensen · Buchverlag, Computersatz, Textberatung  
Sillemstraße 102 · D-20257 Hamburg

ISBN 3-932318-02-1

# Inhalt

1.	Einleitung .....	5
2.	Vom Umgang mit Parameterunsicherheit .....	7
3.	Stochastische Konzepte .....	11
3.1	Parametervarianz .....	11
3.2	Strukturvarianz .....	17
4.	Stochastische Grundwassermodelle .....	21
4.1	Allgemeines .....	21
4.2	Strömungs- und Transportprobleme .....	22
4.3	Unkonditionierte und konditionierte Modelle, Modellkalibrierung .....	23
4.4	Ablauf einer stochastischen Grundwasser- modellierung .....	26
5.	Einsatzbereiche .....	41
6.	Anmerkungen zum Rechenaufwand und zur Softwaresituation .....	43
7.	Ausblick .....	45
8.	Literaturverzeichnis .....	49
9.	Verwendete Programme .....	53



# 1

## Einleitung

Analytische und numerische Modelle sind seit Jahrzehnten bewährte Hilfsmittel zur Berechnung von Strömungs- und Transportvorgängen im Grundwasser (z. B. SPITZ & MORENO, 1996). Mit der Verfügbarkeit leistungsstarker Kleinrechner seit den 80er Jahren haben diese Modelle auch zunehmend Eingang in die ingenieurtechnische Praxis gefunden. Standen am Anfang noch Strömungsmodelle, insbesondere im Rahmen der Grundwasserbewirtschaftung, im Vordergrund, so haben sich in den letzten Jahren die Interessen stark in Richtung auf Transportprobleme, vor allem im Zusammenhang mit Grundwasserverunreinigungen und ihrer Sanierung, verlagert.

Seit rund 20 Jahren werden in der wissenschaftlichen Grundlagenforschung stochastische (zufallsbeeinflusste) Ansätze verwendet, um die Unsicherheit bezüglich maßgeblicher Aquiferparameter und ihrer räumlichen Verteilung zu behandeln (z. B. DELHOMME, 1979; SCHAFMEISTER-SPIERLING, 1990). Anfangs zielten diese Ansätze auf analytische Lösungen, die die beschriebenen Phänomene in ihrer summarischen Wirkung, insbesondere als hydrodynamische Dispersion, beschreiben (z. B. GELHAR & AXNESS, 1983). Im Verlauf der 80er Jahre setzten sich dann zunehmend Monte Carlo-Ansätze durch, die auch komplexe Systeme, die keine geschlossene analytische Lösung besitzen, beschreiben können. Es liegt also eine parallele Entwicklung zu den Grundwassermodellen vor, die von analytischen Lösungen für Systeme mit einfachen Randbedingungen (z. B. Brunnenfunktion nach THEIS, 1935) ausgingen und später zu universellen numerischen, nur mit Computern bearbeitbaren, Lösungen übergingen.

Im zunehmenden Maße werden diese Ansätze auch auf die Lösung praktischer Probleme übertragen. Hierbei handelt es sich

noch überwiegend um Bearbeitungen durch Forschungseinrichtungen. Privatwirtschaftlich organisierte Ingenieurunternehmen setzen stochastische Berechnungsverfahren nur in Einzelfällen, meist in Kooperation mit Forschungseinrichtungen, ein. In jüngster Zeit sind jedoch stochastische Ansätze auch in allgemein zugänglicher Software implementiert (KINZELBACH & RAUSCH, 1995).

Die vorliegende Schrift soll einen kurzen Überblick über die technischen Möglichkeiten der stochastischen Grundwassermodellierung, ihre Einsatzbereiche und ihre Grenzen geben. Auf mathematische Hintergründe wird nicht näher eingegangen, da diese im Fachschrifttum hinreichend erläutert sind (z. B. DAVIS, 1986; AKIN & SIEMES, 1988; JOURNEL & HUIJBREGTS, 1978; DEUTSCH & JOURNEL, 1992; LUO, 1993).

Am Ende soll eine Einschätzung stehen, welchen Stellenwert stochastische Modelle in der ingenieurtechnischen Praxis mittelfristig haben können.

Für die kritische Durchsicht des Manuskripts und fruchtbare Diskussionen habe ich den Herren Karl Cron, Udo Quek und Kai Radmann, Hamburg, zu danken.

# 2

## Vom Umgang mit Parameterunsicherheit

In der ingenieurtechnischen Praxis haben sich über die Jahrhunderte verschiedene Konzepte für den Umgang mit der Unsicherheit bei den Eingangsparametern für konstruktive Lösungen entwickelt. Alle diese Ansätze sind heute noch nebeneinander im Gebrauch, wenn auch nicht in allen Bereichen des Ingenieurwesens.

### **Konzept 1: Erfahrung**

Das Erfahrungskonzept verzichtet auf die Bestimmung oder Abschätzung von Parametern. Es werden keine Berechnungen durchgeführt, sondern das Bauwerk nach Erfahrungswerten hergestellt. Im geologischen Bereich ist hier die Errichtung von einfachen Gebäuden auf erfahrungsgemäß standfesten Böden mit einfachen Streifenfundamenten ohne bodenmechanische Berechnungen zu nennen. Eine Nachrechnung derartiger Maßnahmen zeigt durchweg sehr hohe Sicherheitsfaktoren, so daß dieses Konzept auch heute buchstäblich „tragfähig“ ist.

### **Konzept 2: Verbesserung der Datenbasis**

Eine unzureichende Datenbasis für eine notwendige Berechnung oder Abschätzung wird durch die Erhebung zusätzlicher Daten verbessert. Ein typisches Beispiel hierfür ist die Ausführung von Baugrunderkundungsbohrungen im Bereich unzureichend erschlossener Baugrundstücke.

### **Konzept 3: Sicherheitszuschläge**

Restunsicherheiten über wesentliche Parameter entstehen typischerweise daraus, daß für ihre Ermittlung Proben einer größeren Grundgesamtheit untersucht werden. Die Repräsentativität dieser Proben kann immer nur begrenzt sein. Außerdem gibt es statistische Genauigkeitsgrenzen (Reproduzierbarkeit) der einzelnen Untersuchung. In der Praxis sind zwei Arten von Sicherheitszuschlägen zu unterscheiden:

Explizite Sicherheitszuschläge erfolgen nach einer Berechnung, die von exakt bestimmten Eingangsparametern ausgeht. Sie sind in vielen Regelwerken vorgeschrieben und sind abhängig von der erfahrungsgemäßen Unsicherheit der Parameter und dem Sicherheitsbedürfnis der geplanten Maßnahme. So werden bei Standsicherheitsberechnungen für Dammbauwerke höhere Sicherheitszuschläge gefordert als für einfache Böschungen. Explizite Sicherheitszuschläge haben den Vorteil, sowohl für den Bearbeiter als auch für den Kunden erkennbar und nachvollziehbar zu sein.

Implizite Sicherheitszuschläge sind in abgeschätzten Eingangsparametern und/oder Berechnungsverfahren versteckt. Hierzu zählen z. B. bodenmechanische Normwerte, die ohne eine experimentelle Bestimmung der örtlichen Werte verwendet werden. Ein Beispiel für einen impliziten Sicherheitszuschlag im Bereich der Grundwasserhydraulik ist die Verwendung der Reichweitenformel nach Sichardt (KYRIELEIS & SICHARDT, 1930) bei der Berechnung des Wasserandrangs bei der Entspannung eines Grundwasserleiters zur Verhinderung des hydraulischen Grundbruchs. Implizite Sicherheitszuschläge haben den Nachteil, daß sie oft selbst dem technischen Bearbeiter einer Maßnahme nicht bewußt sind und daher zu Planungsfehlern führen können.



**Konzept 4: Worst-Case-Variante**

Liegen Daten für die relevanten Parameter vor, die schon ihre Variabilität und damit Unsicherheit anzeigen, so führt man seine Berechnungen im Rahmen einer Worst-Case-Betrachtung durch, bei der alle relevanten Parameter an das für die Planungsaufgabe ungünstige Ende der Variabilität gesetzt werden. Dieses Verfahren gibt den voraussichtlich ungünstigsten Fall (englisch: *worst case*) wieder. Die Vorteile dieses Verfahrens liegen darin, daß zum einen die natürliche Variabilität der Eingangsparameter berücksichtigt wird, zum anderen durch die Worst-Case-Strategie gegenüber den wahrscheinlichsten (mittleren) Parameterwerten ein sehr hohes Maß an Sicherheit gewonnen wird. Es ergeben sich typischerweise sehr hohe konventionell auf der Basis mittlerer Parameterwerte berechnete Sicherheitsfaktoren. Diese hohen Sicherheiten werden aber in vielen Fällen durch wirtschaftlich nicht vertretbare Kosten einer Maßnahme erkauft.

**Konzept 5: Szenarien**

In Abwandlung der Worst-Case-Methode wird bei der Berechnung von Szenarien eine Variation nicht mit den ungünstigsten Annahmen für alle relevanten Parameter durchgeführt, sondern im Rahmen realistischer Parameterkombinationen (KINZELBACH & RAUSCH, 1995). Hierdurch ergibt sich in vielen Fällen eine deutliche Reduktion der geforderten Sicherheiten. Die Szenarientechnik erfordert regelmäßig ein hohes Maß an gutachterlichem Sachverstand.



# 3

## Stochastische Konzepte

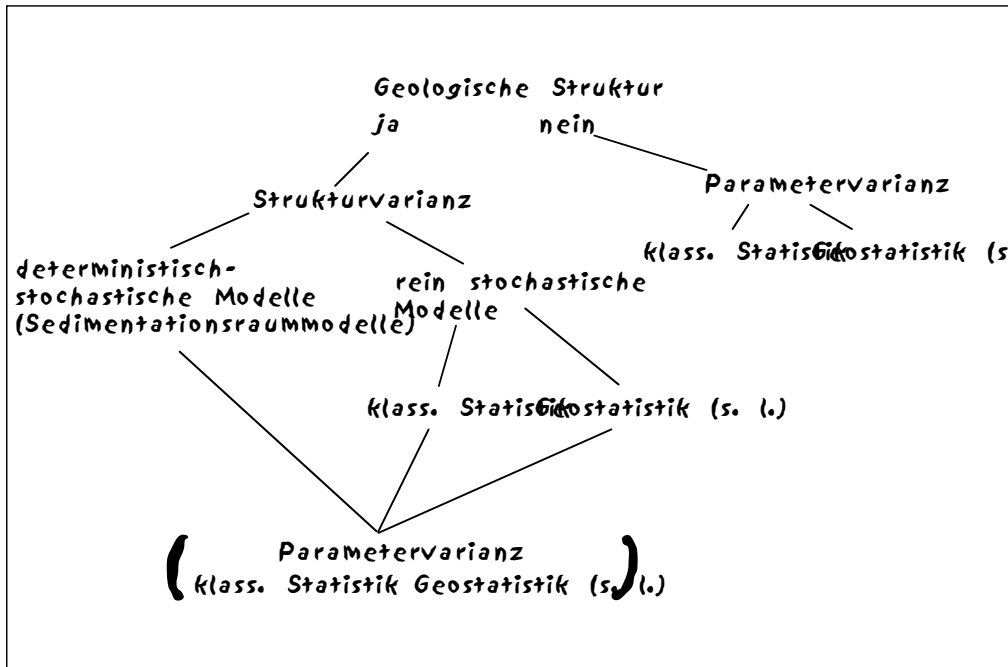


Abb. 1: Überblick über die stochastischen Ansätze

### 3.1 Parametervarianz

Das Konzept der Parametervarianz geht davon aus, daß der Betrachtungsraum aus einem einheitlichen geologischen Körper besteht. Innerhalb dieses Körpers, z. B. einer Schicht, Formation etc., unterliegt der Wert eines relevanten Parameters, z. B. der Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$ , einer örtlichen Varianz. Die räumliche Änderung der Werte erfolgt im wesentlichen kontinuierlich.

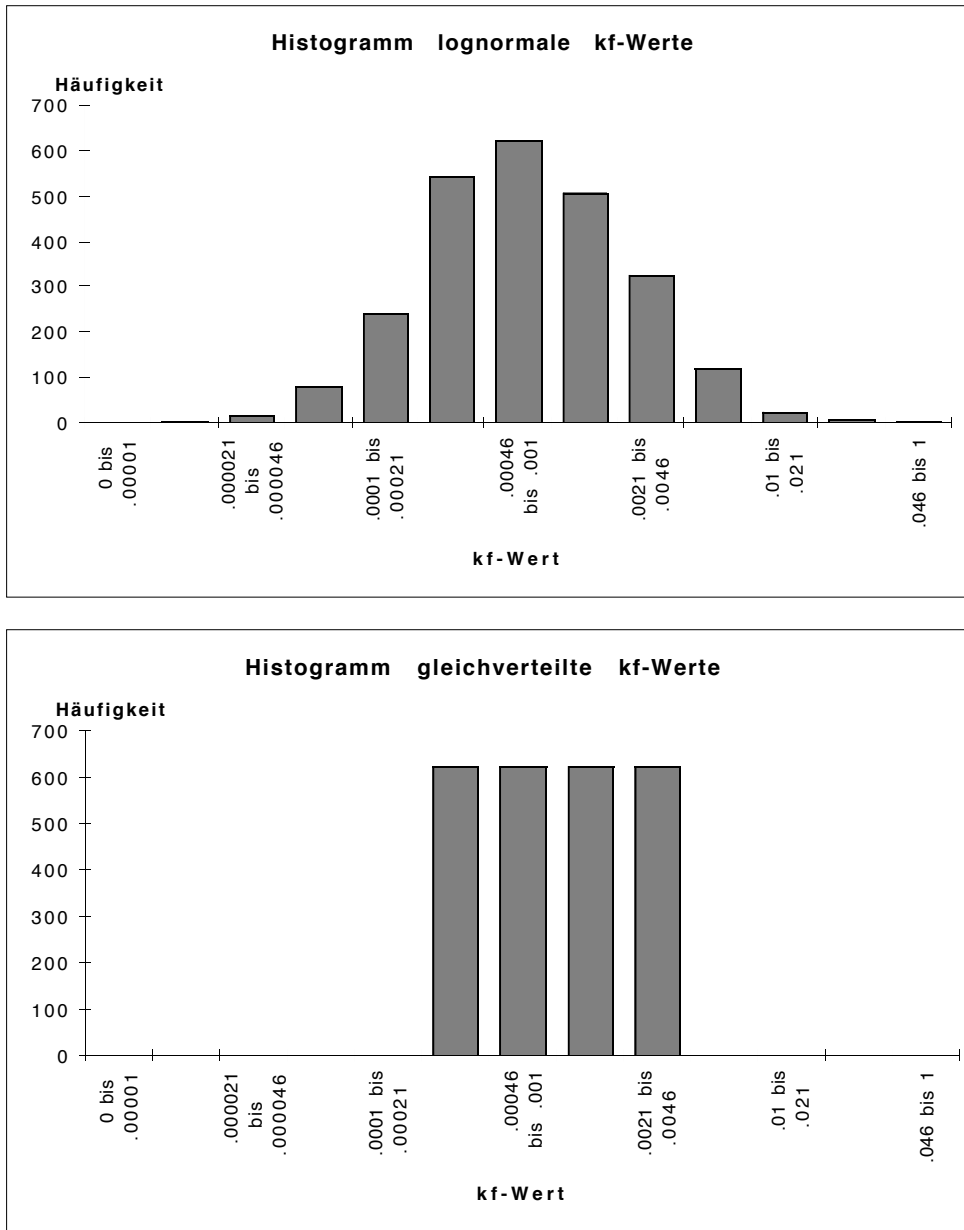
Der Ansatz der „klassischen Statistik“ geht davon aus, daß an jedem Ort des Betrachtungsgebietes dieselben statistischen

Wahrscheinlichkeiten für den Wert des Parameters bestehen, d. h. es gibt keine Abhängigkeit eines Wertes von seiner Umgebung. Diese Annahme erscheint auf den ersten Blick für einen strukturierten geologischen Körper als unplausibel. Sie kann aber bei der Wahl größerer Integrationsvolumina, z. B. Zellen eines regionalen Grundwasserströmungsmodells mit Zellengrößen von mehreren 100 m, durchaus hinreichend zutreffen. Voraussetzung hierfür ist, daß die Variabilität (Heterogenität) des betrachteten Parameters in einem wesentlich kleineren Entfernungsmaßstab als die Zellengröße liegt.

Die Werte der fraglichen Parameter können innerhalb eines plausiblen Wertebereichs als gleichverteilt, d. h. mit gleich hoher Wahrscheinlichkeit realisiert, normal- bzw. lognormalverteilt, d. h. nach den Gesetzen der Gauss'schen Normalverteilung zwischen  $-\infty$  und  $+\infty$  um einen wahrscheinlichsten Wert gestreut, oder nach einer anderen Wahrscheinlichkeitsfunktion verteilt angenommen werden (Abb. 2).

Für den zu simulierenden Parameter müssen also sowohl die Art der Wahrscheinlichkeitsverteilung als auch deren statistische Parameter, z. B. Mittelwert und Standardabweichung der Gauss'schen Normalverteilung, bekannt sein.

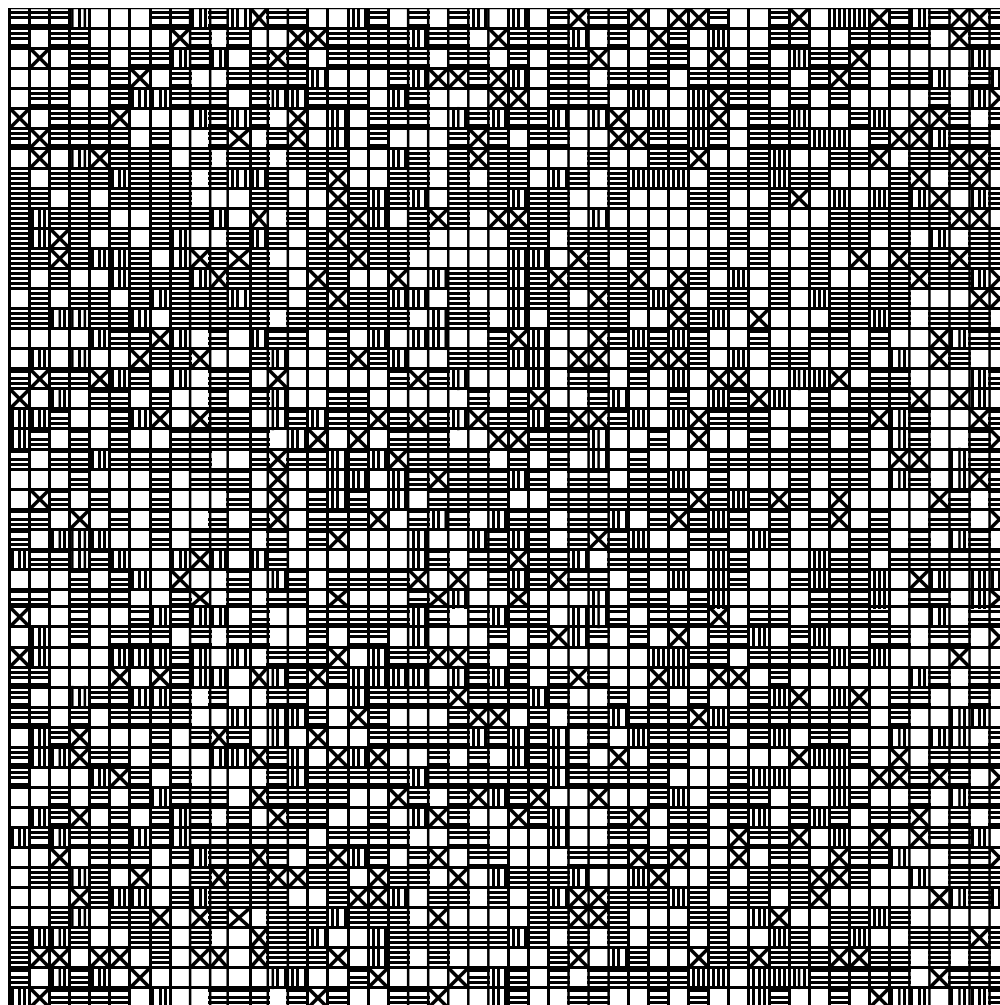
Die Generierung derartiger reiner Zufallfelder erfolgt nach dem „Monte-Carlo“-Verfahren. Dabei werden aus der statistisch beschriebenen Grundgesamtheit Zufallswerte gezogen. Diese sind voneinander unabhängig. Sie entsprechen damit den Verhältnissen beim Roulettespiel, bei dem mit jeder Ausspielung die Wahrscheinlichkeit für alle Zahlen gleich hoch ist. Bei Verwendung einer stetigen Normalverteilung erfolgt die Simulation einer *kontinuierlichen Variablen*, für die die höchste Wahrscheinlichkeit für dem Mittelwert gegeben ist. Alternativ können *diskrete Materialien* definiert werden, z. B. Bodenarten mit festem  $k_f$ -Wert. In diesem Fall entspricht die Ziehung der Werte der Entnahme farbiger Kugeln aus einer Grundgesamtheit, für



**Abb. 2:** Statistische Häufigkeitsverteilungen

die das Zahlenverhältnis der Farben vorgegeben ist. Nach jeder Ziehung wird die Kugel zurückgegeben, so daß die Wahrscheinlichkeiten durch den Simulationsvorgang nicht verändert werden. Die Generierung reiner Zufallsfelder stellt niedrigste Anforderungen an Hard- und Software (Abb. 3).

## Simulation 1



□ Kies

▨ Grobsand

▩ Mittelsand

⊗ Feinsand

Kies:  $k_f > 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$

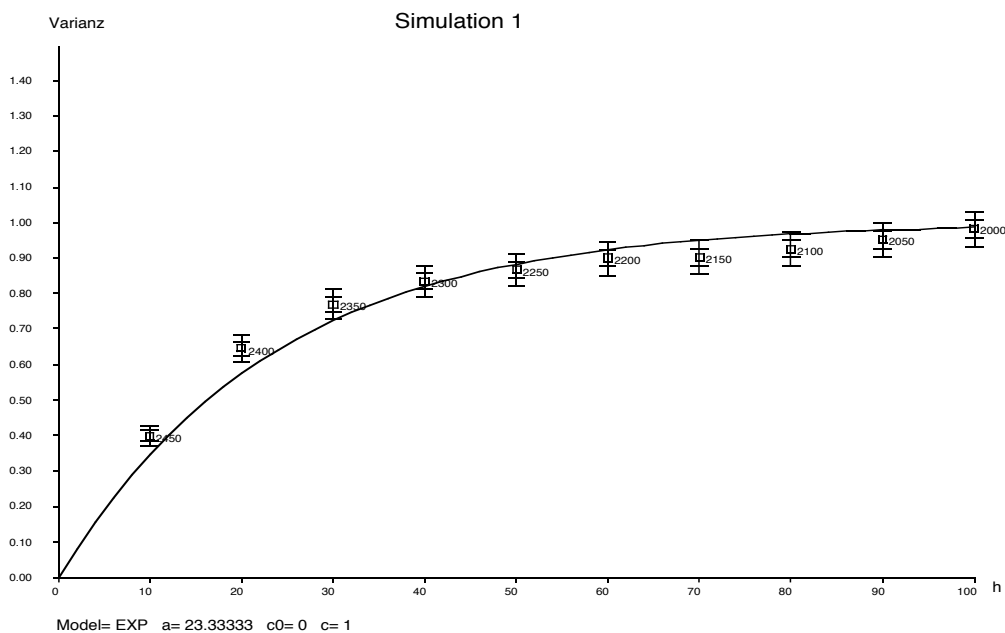
Grobsand:  $k_f = 5,5 \cdot 10^{-4} \dots 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$

Mittelsand:  $k_f = 1,7 \cdot 10^{-4} \dots 5,5 \cdot 10^{-4}$

Feinsand:  $k_f < 1,7 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$

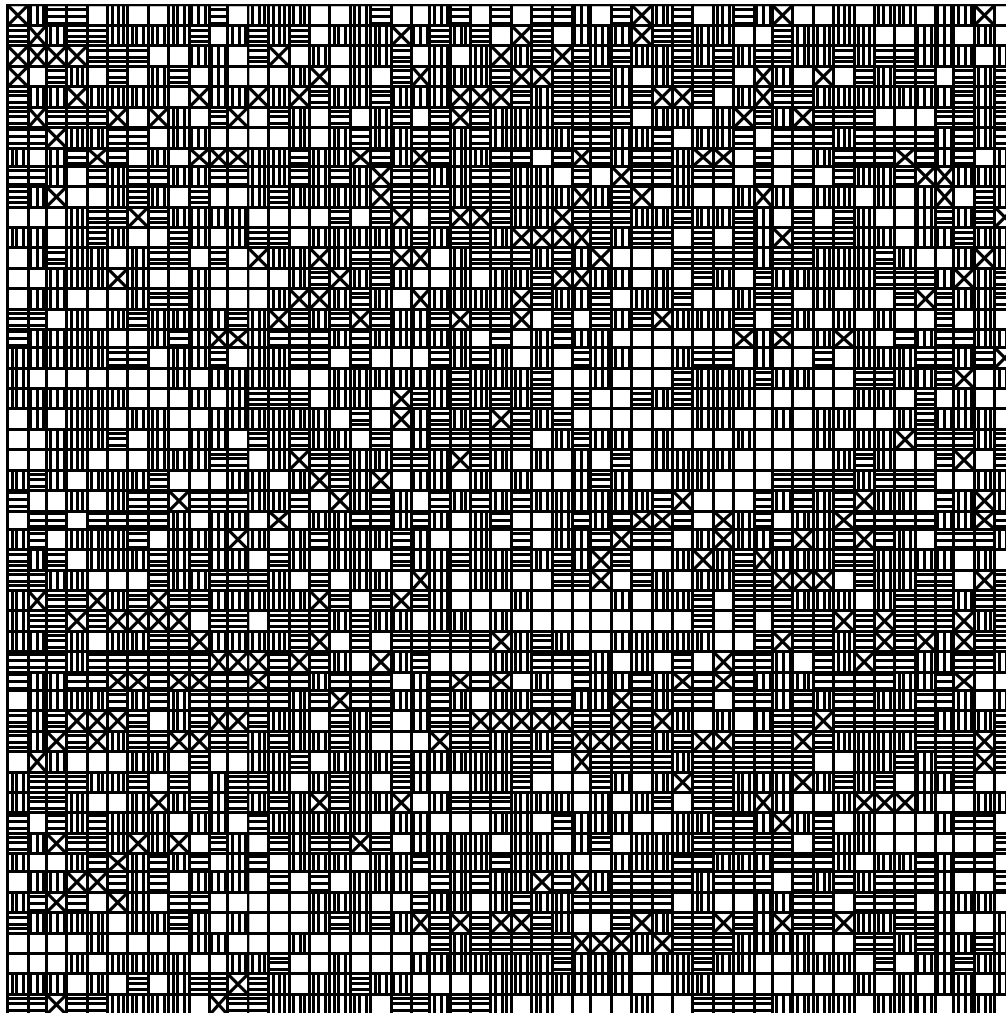
**Abb. 3:** Zufallsfeld auf der Grundlage einer Häufigkeitsverteilung (Gauss'sche Normalverteilung)

Der Ansatz der **Geostatistik** (im weiteren Sinne) geht von einer Abhängigkeit der Realisation eines Parameters an einem Ort von seiner Umgebung aus (räumliche Korrelation). Dieser Ansatz erfaßt auch bei feinerer Diskretisierung die Heterogenität eines insgesamt einheitlichen geologischen Körpers. Zusätzlich zu den Anforderungen an Modelle der klassischen Statistik (Kenntnis der Art der Verteilung und ihrer Parameter) benötigt man hier Gesetzmäßigkeiten für die räumliche Korrelation der Werte. Diese erhält man aus der Analyse eines (Semi-)Variogramms (AKIN & SIEMES, 1988; Abb. 4).



**Abb. 4:** Beispiel eines (Semi-)Variogramms. Dargestellt ist das (Semi-)Variogramm in Richtung der einen Hauptachse des Systems. In Richtung der zweiten Hauptachse gilt dasselbe exponentielle (Semi-)Variogramm mit einer Korrelationslänge  $a = 3,2$ . Die Varianz ist bezogen auf die Gesamtvarianz der Durchlässigkeit dargestellt. Die Quadrate zeigen das experimentelle Variogramm aus der Auswertung von Felddaten in einem Testgebiet. Die Ziffern geben die Zahl der zur Berechnung verwendeten Datenpaare, die Balken die Standardabweichungen. Die durchgezogene Linie gibt das angepaßte theoretische Variogrammmodell.

## Sekundär diskretisiertes Meija-Feld



Kies                       Grobsand                       Mittelsand                       Feinsand

Kies:  $k_f > 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$

Grobsand:  $k_f = 5,5 \cdot 10^{-4} \dots 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$

Mittelsand:  $k_f = 1,7 \cdot 10^{-4} \dots 5,5 \cdot 10^{-4}$

Feinsand:  $k_f < 1,7 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$

**Abb. 5:** Mit geostatistischer Simulation (Algorithmus nach MEJIA & RODRIGUEZ-ITURBE, 1974, aus KINZELBACH & RAUSCH, 1995) generiertes Zufallsfeld, statistische Parameter entsprechend Abb. 3, (Semi-)Variogramm entsprechend Abb. 4.



Mit Hilfe kommerziell verfügbarer Software ist es möglich, an jedem Ort in einem Betrachtungsraum nach diesem Verfahren Parameterwerte zu generieren, die nicht nur in ihren klassischen statistischen Parametern (z. B. Mittelwert) den Vorgaben entsprechen, sondern auch die räumliche Struktur beibehalten (z. B. mittlere Größe geologischer Substrukturen). Für den Aufbau eines Grundwassermodells aus Zellen werden die Parameterwerte nach definierten mathematischen Verfahren über den Zwischenschritt von Punktschätzungen integriert (Block-Kriging-Verfahren).

Die Generierung derartiger geostatistischer Zufallfelder stellt erhebliche Anforderungen an Hard- und Software, insbesondere wenn vorgegebene Feldwerte, z. B.  $k_f$ -Werte aus Pumpversuchen, einbezogen wird (Konditionierung, vgl. Abschn. 4.4) (Abb. 5).

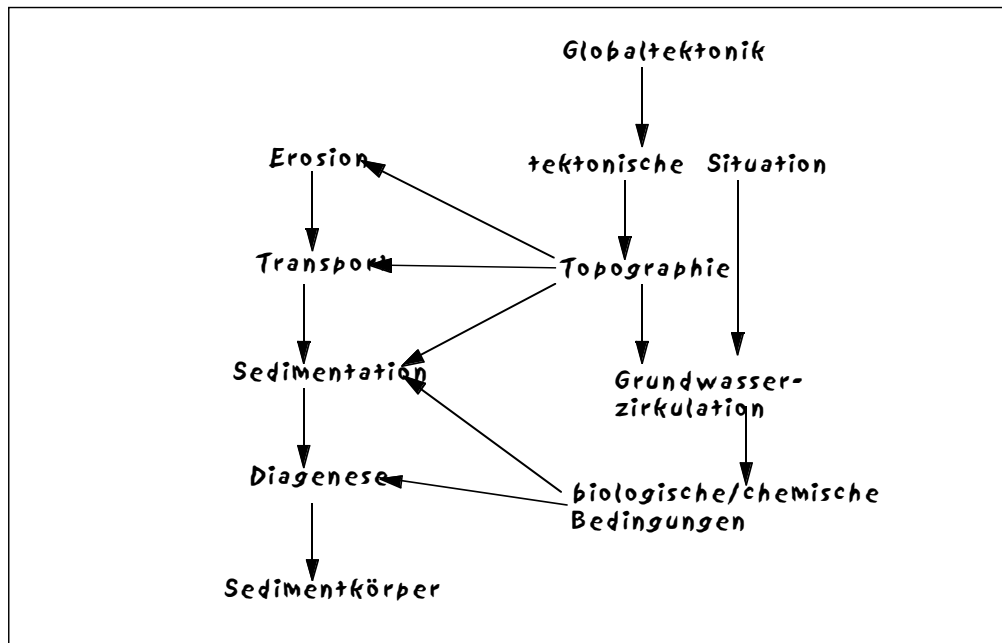
### 3.2 Strukturvarianz

Das Konzept der Strukturvarianz geht davon aus, daß innerhalb des Betrachtungsraums oder einer größeren geologischen Einheit der Wert eines relevanten Parameters, z. B. der Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$ , einer örtlichen Varianz durch die Untergliederung in primäre geologische Einzelkörper, z. B. Rinnen- und Beckenfüllungen, unterliegt. Die räumliche Änderung der Werte erfolgt sprunghaft an den Grenzen der Körper. Innerhalb der Einzelkörper kann Parameterkonstanz oder Parametervarianz angesetzt werden. Da die strukturellen Effekte die Effekte der Parametervarianz überwiegen, wird man in vielen Fällen darauf verzichten, diese innerhalb der Einzelkörper zu simulieren (vgl. SCHAFMEISTER-SPIERLING, 1990: 98ff.).

Es sind zwei Typen von Simulationen zu unterscheiden:

1. deterministisch-stochastische Simulationen, die die Entstehung der geologischen Körper beschreiben (z. B. PRICE, 1975;

ALLEN, 1978; BRIDGE & LEEDER, 1979). Die Randbedingungen des Sedimentationsprozesses, z. B. tektonische Bewegungen, werden stochastisch variiert. Die Simulation erfolgt dann deterministisch nach physikalisch-chemisch begründeten Gesetzmäßigkeiten, z. B. Erosion und Sedimentation in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit als Ergebnis der Topographie (Gefälle) (Abb. 6, 7).

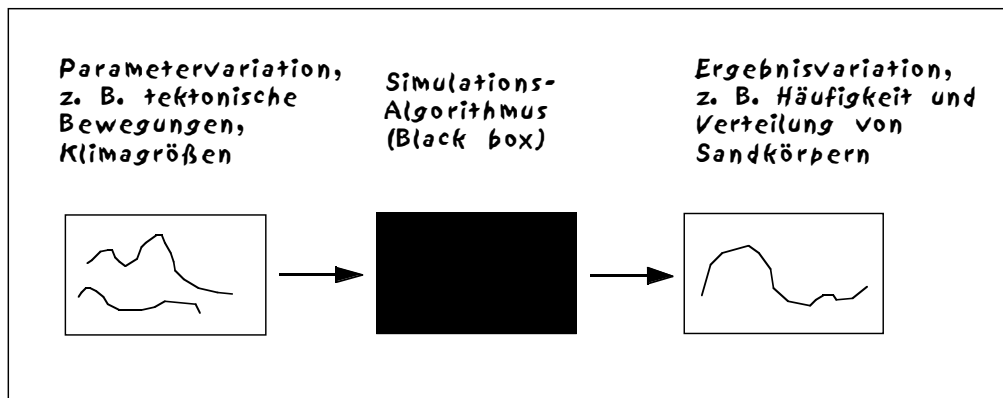


**Abb. 6:** Grundkonzept deterministisch-stochastischer Simulationen

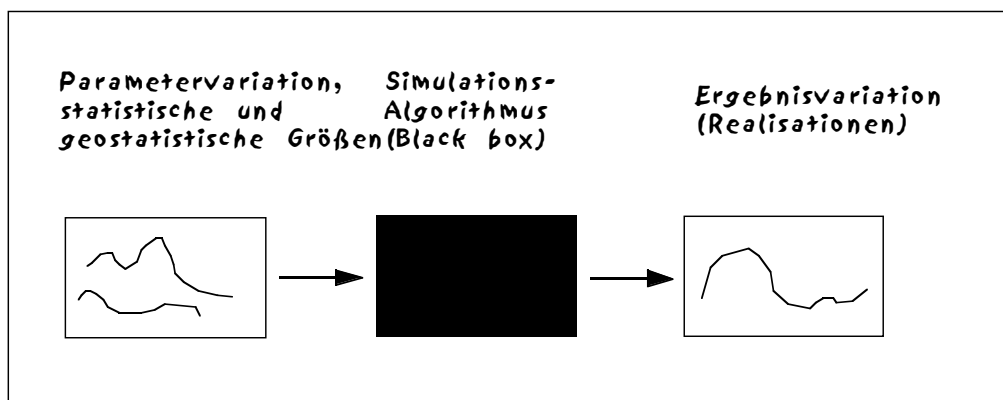
2. rein stochastische Simulationen, die die Fazies der geologischen Körper rein phänomenologisch beschreiben (z. B. LIN & HARBAUGH, 1984) (Abb. 8). Für die Simulation stehen entsprechend den Verhältnissen bei der Parametervarianz Ansätze der klassischen Statistik und der Geostatistik im weiteren Sinne zur Verfügung. Im Bereich der Geostatistik s. str. handelt es sich um die sogenannten Indikator-Verfahren (z. B. DEUTSCH & JOURNEL, 1992; PTAK, 1993). Daneben gibt es die mathematisch weniger flexiblen, aber wesentlich einfacheren

Markov-Ketten-Verfahren (LUO, 1993). Neuerdings werden mehrstufige Verfahren zur Beschreibung komplexer sedimentologischer Abfolgen vorgeschlagen (DEUTSCH & WANG, 1996).

Alle stochastischen Simulationen können wie deterministische Simulationen an Geländebefunden abgeglichen (konditioniert) werden, d. h. sie verwenden die bekannten Meßwerte der simulierten Größe.



**Abb. 7:** Durchführung deterministisch-stochastischer Simulationen



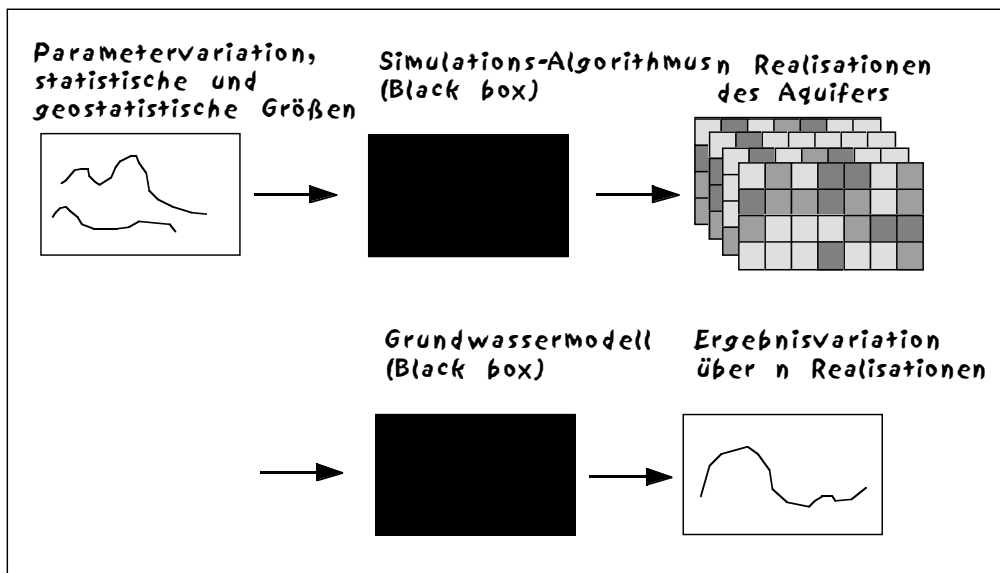
**Abb. 8:** Durchführung rein stochastischer Simulationen



# 4 Stochastische Grundwassermodelle

## 4.1 Allgemeines

Die Aufgabe stochastischer Grundwassermodelle besteht darin, aus der Unsicherheit bei der Abschätzung wesentlicher hydraulischer Parameter bzw. der unvollkommenen Erkundung auf die Unsicherheit der Modellergebnisse, insbesondere der entscheidungsrelevanten Extrapolationen, zu schließen. Hierzu werden bei 2-dimensionalen Modellen im Regelfall 100–200 gleichwertige Realisationen des Grundwasserleiters generiert und für diese die Modellierung durchgeführt (Abb. 9). Die Anzahl der Simulationen muß in jedem Anwendungsfall empirisch optimiert werden.



**Abb. 9:** Durchführung stochastischer Grundwassermodellierungen

Grundsätzlich können stochastische Ansätze im Zusammenhang mit analytischen und numerischen Modellen verwendet wer-

den. Ein einfaches stochastisches Modell auf der Grundlage eines analytischen Ansatzes ist das Modell SIC (KINZELBACH & RAUSCH, 1991a). Bei diesem Modell zur Berechnung eines Trinkwasserschutzgebietes wird die 50-Tage-Linie (Grenze der Schutzzone II) berechnet. Der Grundwasserleiter wird als homogen, isotrop und unendlich ausgedehnt angenommen. Alle relevanten hydraulischen Parameter können mit einer Unsicherheit behaftet sein und damit eine Unsicherheit bei der Berechnung des Schutzgebietes erzeugen:

Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$   
durchflußwirksame Porosität  $n_f$   
Mächtigkeit  $M$   
Richtung der natürlichen Grundwasserströmung  $\varphi$   
Gefälle der natürlichen Grundwasserströmung  $i_0$

Das Modell führt eine Bahnlinien-/Laufzeitenberechnung mittels einer numerischen Integration auf der Grundlage eines analytischen Grundwassermodells (Superposition der parallelen Grundströmung und der radialen Brunnenanströmung) durch. Es werden typischerweise 100–500 Rechenläufe durchgeführt. Das Modell integriert alle Ergebnisse und gibt Wahrscheinlichkeiten an, mit denen ein bestimmter Ort innerhalb der 50-Tage-Linie liegt.

Im Regelfall werden stochastische Ansätze jedoch im Zusammenhang mit einer numerischen (diskretisierten) Lösung des Strömungs- bzw. Transportproblems verwendet (Abb. 9).

## 4.2 Strömungs- und Transportprobleme

Stochastische Modelle werden überwiegend im Zusammenhang mit Transportproblemen eingesetzt. Dies begründet sich daraus, daß Strömungsprobleme wesentlich robuster gegenüber Parametervariationen reagieren bzw. ihre mögliche Abhängigkeit von

der Parametervarianz oft mit einfacheren Mitteln abgeschätzt werden kann. Unter komplexen geologischen Verhältnissen kann bei der Strömungsmodellierung ein stochastischer Ansatz die Kalibrierung (Eichung) des Modells unterstützen (MEYER, 1996). Dies gilt insbesondere für unterbestimmte Systeme (weniger Meßwerte als variable Parameter).

Bei einer üblichen wasserwirtschaftlichen Berechnung mit Hilfe eines regionalen Grundwasserströmungsmodells, z. B. die Abschätzung der langfristig für die Trinkwasserversorgung gewinnbaren Wassermenge, sind die wesentlichen Parameter die mittlere effektive Grundwasserneubildungsrate (Wasserdargebot) und die mittlere Transmissivität des Grundwasserleiters. Die zuverlässig gewinnbare Wassermenge bestimmt sich aus der Grundwasserneubildung im Einzugsgebiet der Wasserfassung in Trockenjahren (vgl. THOMSEN, 1990, 1993). Eine stochastische Modellierung bringt hier im Regelfall keine zusätzliche Information.

Im Gegensatz hierzu kann die Gestalt des Einzugsgebiets (Trinkwasserschutzgebiet) und insbesondere der engeren Schutzzone (Zone II, 50-Tage-Linie) durch mehrere voneinander unabhängige Aquiferparameter (vgl. Abschnitt 4.1) beeinflusst werden und dadurch sehr unterschiedliche Gestalt annehmen. Hier kann eine stochastische Modellierung zur Feststellung der möglichen Varianz der Gestalt des Einzugsgebietes und der Wahrscheinlichkeiten für die Einbeziehung bestimmter Orte in das Schutzgebiet über Bahnlinienberechnungen nützlich sein (KINZELBACH ET AL., 1994).

### **4.3 Unkonditionierte und konditionierte Modelle, Modellkalibrierung**

Grundsätzlich zu unterscheiden ist zwischen unkonditionierten Modellen, in die für die simulierten Parameter keine Geländedaten eingehen, und konditionierten Modellen, die Geländebefun-

de einbeziehen, d. h. die innerhalb des stochastisch simulierten Wertefeldes an vorgegebenen Meßpunkten die dort erhobenen Meßwerte (z. B.  $k_f$ -Werte aus Pumpversuchen) reproduzieren.

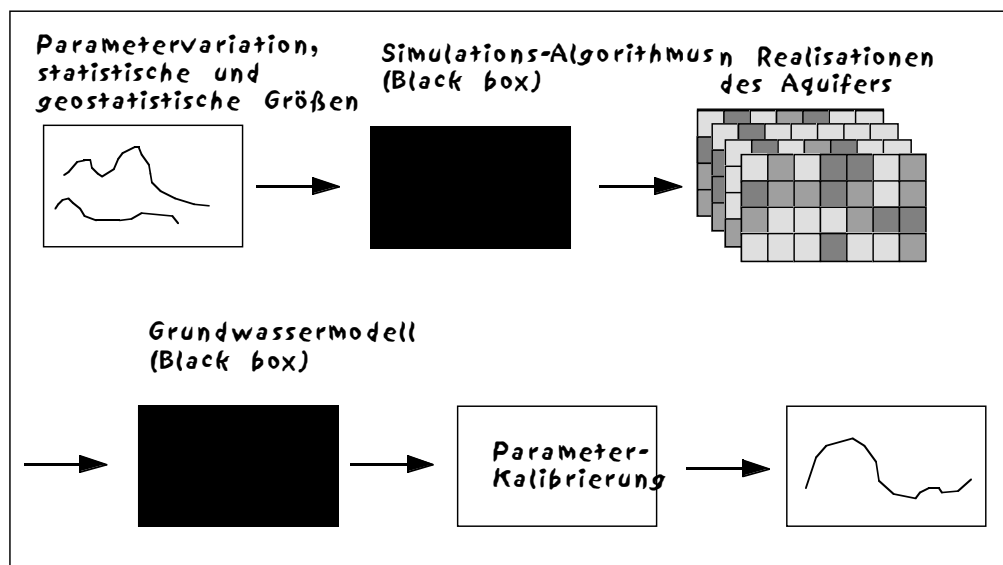
Unkonditionierte stochastische Modelle werden benutzt, um die prinzipiellen Zusammenhänge zwischen Parameterunsicherheit und Ergebnisunsicherheit abzuschätzen. Sie haben den Vorteil, insbesondere bei den klassischen geostatistischen Simulationsmethoden, einen deutlich geringeren Rechenaufwand zu haben als konditionierte Modelle. Dies kann vor dem Hintergrund begrenzter rechentechnischer Ressourcen von Bedeutung sein.

Konditionierte Modelle zeigen eine geringere Ergebnisvarianz, da alle Simulationen an den vorgegebenen Meßpunkten mit Festwerten belegt sind. Mit zunehmender Zahl von Meßpunkten wird die Varianz der Ergebnisse weiter reduziert, da die Kenntnis über die tatsächlichen Verhältnisse des betrachteten Systems zunimmt. Bei einer sehr umfassenden Erkundung nimmt die relative Zahl der Meßpunkte zum gesamten Modellgebiet so stark zu, daß die stochastische Simulation nur noch wenige Freiheitsgrade besitzt und das Modell somit deterministisch festgelegt ist (Grenzfall der Anwendung).

Die üblichen rein deterministischen Grundwassermodelle werden an Geländebefunden geeicht (kalibriert). Aufgabe der Kalibrierung und ggf. Modellvalidierung ist es, eine größtmögliche Übereinstimmung zwischen Geländedaten, z. B. Grundwasserstände, Stoffkonzentrationen, und Modellergebnissen zu erzielen. Unmittelbar ermittelte hydraulische Parameter, z. B. Durchlässigkeiten aus Pumpversuchen, werden dabei dem Modell vorgegeben. Die Kalibrierung bezieht sich auf jene Bereiche (Modellzellen), für die keine direkt bestimmten Werte vorliegen. Im Regelfall ist dies der überwiegende Teil des Modellgebiets. Treten erhebliche Schwierigkeiten bei der Eichung auf, so kann auch von den direkt bestimmten Parameterwerten im Rahmen ihrer vermutlichen Bestimmungsgenauigkeit abgewichen werden.



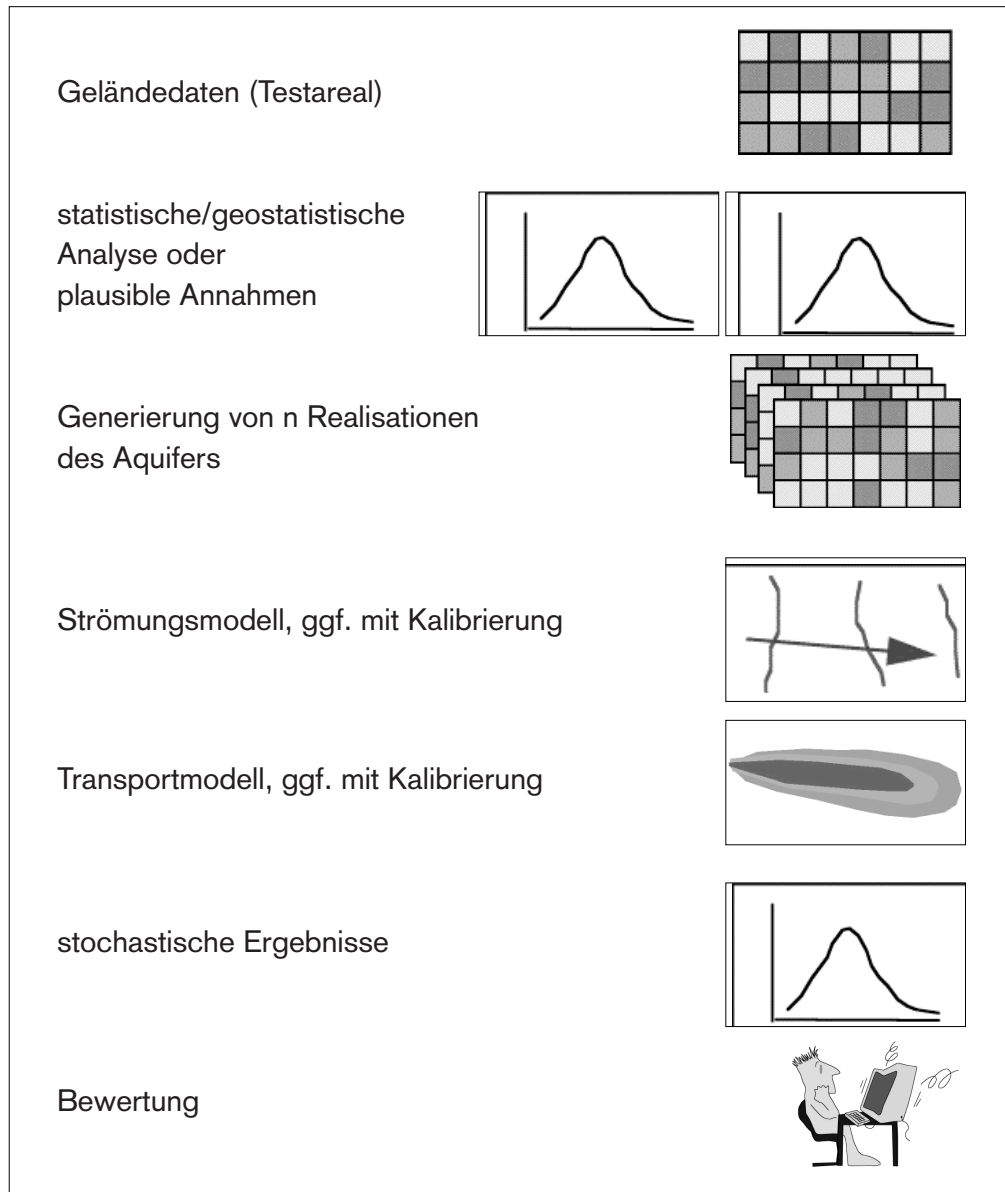
Eine vollständige stochastische Simulation erfordert die Kalibrierung jeder einzelnen Modellrealisation. Die Arbeitsschritte sind in Abb. 10 schematisch dargestellt. Typischerweise erfolgt eine stochastische Variation der Durchlässigkeit. Die Kalibrierung auf die gemessenen Grundwasserstände erfolgt dann durch Veränderung der Grundwasserneubildungsraten. Man erhält somit  $n$  geeichte Modelle. Ein Teil dieser Realisationen kann dann verworfen werden, wenn der kalibrierte Parameter in unrealistische Wertebereiche gerät. Hieraus ergeben sich Hinweise auf un plausible Annahmen über die Wertebereiche der simulierten Parameter bzw. über unwahrscheinliche Kombinationen dieser Parameter (KINZELBACH ET AL., 1994). Für die weitere Betrachtung muß jedoch eine aussagefähige Anzahl an zugelassenen Modellen übrig bleiben (DEUTSCH & JOURNEL, 1992). Die Kalibrierung erfordert *nicht* die Konditionierung des Modells. An den Modellzellen, die zur Eichung herangezogen werden, sind für die Eichung Wasserstände (Strömungsmodell) bzw. Konzentrationen (Transportmodell) erforderlich, nicht jedoch die Vorgabe der Durchlässigkeit bzw. anderer stochastisch simulierter Parameter.



**Abb. 10:** Durchführung geeichter stochastischer Grundwassermodellierungen

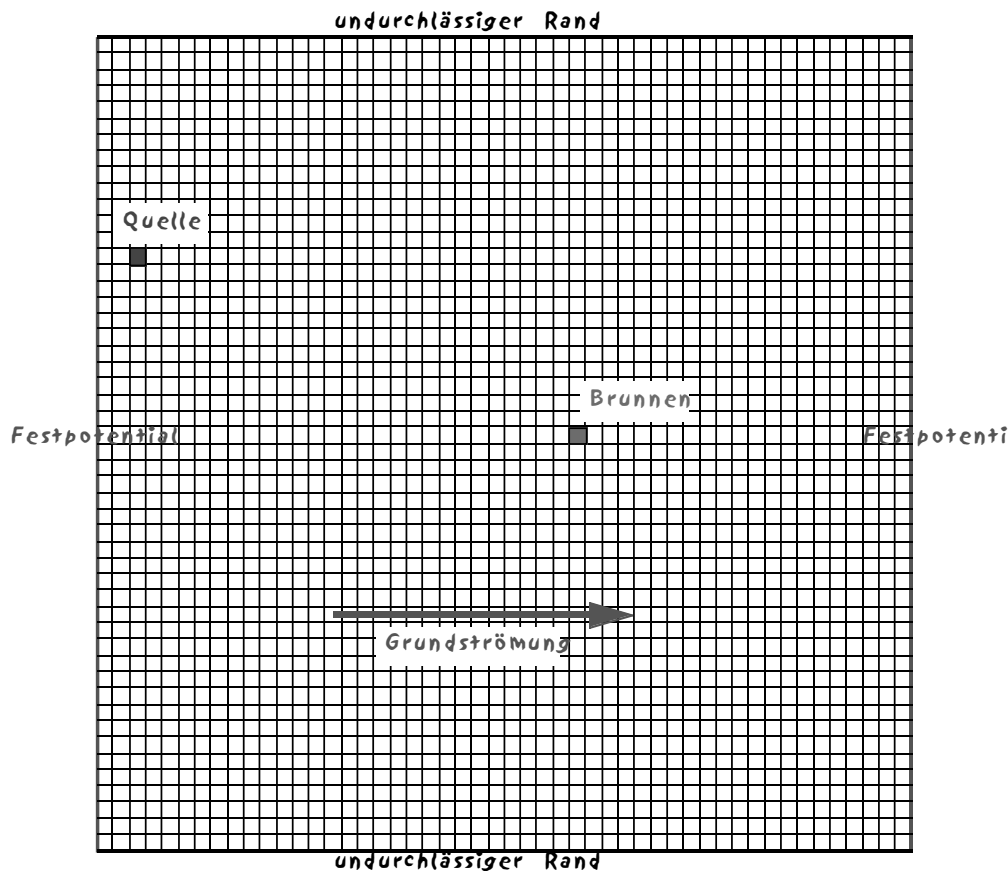
#### 4.4 Ablauf einer stochastischen Grundwassermodellierung

Der Gesamtablauf einer stochastischen Modellierung ist in Abb. 11 zusammengefaßt.



**Abb. 11:** Ablaufschema für stochastische Grundwassermodellierungen

Im folgenden sollen die Ergebnisse eines Beispielfalls vorgestellt werden. In Abb. 12 ist das vereinfachte numerische Modell dargestellt. Durch Festpotentiale und undurchlässige Ränder (Stromlinien) ist die Grundströmung definiert. Innerhalb des Modellgebiets wird ein Brunnen betrieben. Es soll geklärt werden, ob und wann eine Verunreinigung (Quelle) den Brunnen erreicht. Handelt es sich bei diesem Brunnen um einen Wasserwerksbrunnen, so dient diese Betrachtung der Entscheidung über die Dringlichkeit für weitergehende Maßnahmen. Handelt es sich dagegen um einen Abwehr- bzw. Sanierungsbrunnen, so wird im folgenden die Zuverlässigkeit der Maßnahme abgeschätzt. Das Modell hat eine Größe von  $500 * 500 \text{ m}^2$ .



**Abb. 12:** Schematischer Plan des Berechnungsbeispiels

Das Beispiel wurde bewußt so angelegt, daß es praxistypische Eigenschaften aufweist, aber nicht gezielt auf die stochastische Modellierung angelegt wurde. Die Diskretisierung des Modells ist im Hinblick auf die angenommenen geostatistischen Parameter etwas zu grob angesetzt, so daß den hier gezeigten Ergebnissen nur orientierender Charakter zukommt. Der latente Verstoß gegen die Regeln der Geostatistik erlaubt es uns hierbei, ein Gefühl für die Robustizität der verschiedenen Verfahren gegenüber dem Einsatz am Rand oder etwas außerhalb ihres strikten Definitionsbereichs zu entwickeln.

Die einzelnen Modelle wurden nicht kalibriert. Durch die rigiden Randbedingungen unterscheiden sich die berechneten Wasserstände nicht wesentlich von den Verhältnissen in einem homogenen Grundwasserleiter.

Bei geringem Erkundungsgrad, wie er für den Beginn eines Projektes typisch ist, liegen geostatistische Parameter des Aquifers nicht vor. Es liegt daher nahe, eine Modellierung mit klassischen statistischen Ansätzen zu versuchen. Setzt man voraus, daß es sich um einen heterogenen Aquifer mit engräumigen Änderungen der Durchlässigkeit handelt, so wird man für jede Modellzelle ( $10 * 10 \text{ m}^2$ ) einen Parameterwert simulieren. Auf der Grundlage geologischer Vorinformationen (allgemeine geologische Erkundung und/oder Bohrprofile) kann man sich für einen kontinuierlichen oder Strukturansatz entscheiden. In unserem Beispiel nehmen wir an, daß das Sediment Korngrößen zwischen Feinsand und Feinkies mit Durchlässigkeiten zwischen  $1 * 10^{-4}$  und  $3 * 10^{-3} \text{ m/s}$  aufweist. Es überwiegen Feinkiese und Mittelsande (bimodale Verteilung, Tab. 1).

Die Simulation des Durchlässigkeitsfeldes erfolgt durch Annahme einer kontinuierlichen Lognormalverteilung der Durchlässigkeit und unabhängige Entnahme der Durchlässigkeit aus dieser Verteilung für jede Modellzelle (Abb. 2 und 3). Im diskreten Ansatz erfolgt die Simulation unabhängig für jede Zelle durch Er-

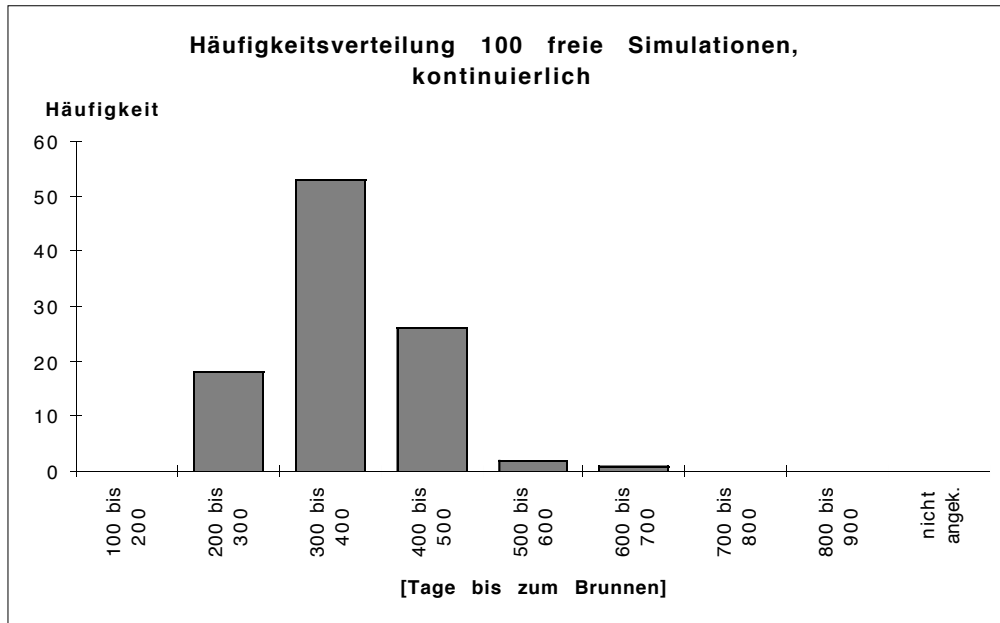
Bodenart	relativer Anteil am Aquifer [%]	$k_f$ -Wert [m/s]
Kies	35	$3 * 10^{-3}$
Grobsand	15	$1 * 10^{-3}$
Mittelsand	40	$3 * 10^{-4}$
Feinsand	10	$1 * 10^{-4}$

**Tab. 1:** Bodenarten für die Rechenbeispiele

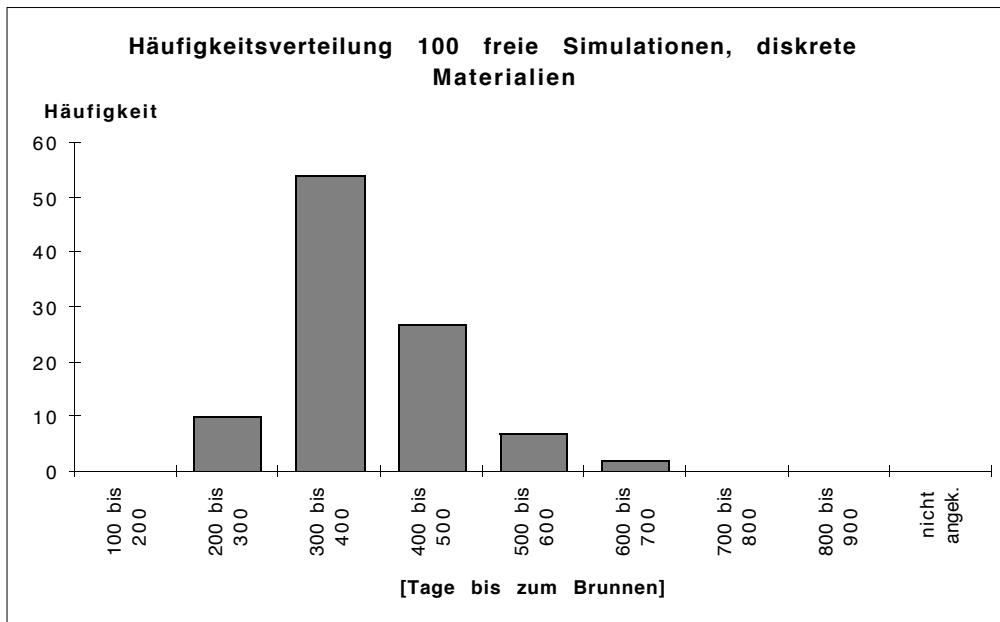
mittlung eines Materialtyps (Feinsand, Mittelsand, Grobsand, Feinkies; „diskrete Materialien“) entsprechend den angenommenen relativen Häufigkeiten dieser Typen am Aufbau des Aquifers. Den Zellen wird dann entsprechend ihrem Typ ein fester  $k_f$ -Wert gemäß Tab. 1 zugewiesen.

Es werden jeweils 100 Felder der Durchlässigkeit simuliert, für diese die Strömung berechnet und darauf aufbauend mittels eines Particle-Tracking-Algorithmus die Fließzeit von der Schadstoffquelle zum Brunnen bestimmt. Alle Berechnungen erfolgen mit einer veränderten Version von ASM 3 (KINZELBACH & RAUSCH, 1991b). Dispersion und Diffusion werden vernachlässigt (vgl. GORELICK ET AL., 1993). Die durchflußwirksame Porosität wird für alle Materialien einheitlich mit 0,3 angesetzt. Die Eintreffzeiten der Verunreinigung werden zum Schluß statistisch in Histogrammen ausgewertet. Die Anzahl der Simulationen wurde willkürlich festgelegt und nicht statistisch abgesichert. Da sich in allen Fällen plausible kontinuierliche Häufigkeitsverteilungen der Ergebnisse ergeben, ist sie jedoch als hinreichend anzusehen. Im realen Anwendungsfall wäre eine statistische Absicherung der Repräsentativität erforderlich.

Für das Beispiel ergeben sich die Ergebnisse nach Abb. 13 und 14.



**Abb. 13:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer frei laufenden Simulation,  $k_f$ -Werte aus Lognormalverteilung



**Abb. 14:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer frei laufenden Simulation, diskrete Materialien entsprechend relativem Anteil am Gesamtsediment

Beide Simulationsmethoden erzeugen dasselbe Ergebnis. Die modellierten Eintreffzeiten gruppieren sich in Gestalt einer angenäherten Normalverteilung um den wahrscheinlichsten Wert. Dieses Ergebnis entspricht der Erwartung. Der Fließweg von der Quelle zum Brunnen integriert über eine große Zahl von Zellen. Dadurch kommt es auf dem Fließweg zu einer ungefähren Mittelung über die Durchlässigkeiten bzw. lokalen Strömungsgeschwindigkeiten. Der Aquifer kann also als homogen mit der mittleren Durchlässigkeit der Materialien beschrieben werden. Die stochastische Modellierung ist vor dem Hintergrund der getroffenen Annahmen über das Systemverhalten somit nicht sinnvoll. Für die praktische Entscheidungsfindung genügt das Rechnen mit mittleren Durchlässigkeiten unter Berücksichtigung angemessener Sicherheitszuschläge.

Eine andere Situation ergibt sich, wenn die Modellierung von größeren geologischen Körpern ausgeht, so daß keine Mittelungswirkung gegeben ist. Hier ist im Einzelfall zu klären, ob eine stochastische Modellierung sinnvoll ist oder mit Hilfe von Einzelszenarien oder Worst-Case-Betrachtungen operiert werden kann.

In einem zweiten Experiment werden jetzt geostatistische Parameter gemäß dem Variogrammodell nach Abb. 4 hinzugenommen.

Im kontinuierlichen Ansatz (Abb. 5) wie im diskreten Ansatz (Markov-Ketten, Abb. 15) ergeben sich aus der Anisotropie des Variogrammodells deutlich in x-Richtung gestreckte geologische Körper einheitlichen Materials. Dieser Effekt ist bei dem diskreten Ansatz noch ausgeprägter als im kontinuierlichen Ansatz. Diese Anisotropie hat einen erheblichen Einfluß auf die Ergebnisse der Modellierung.

Obwohl beide Ansätze prinzipiell von demselben statistischen Modell ausgehen, zeigt die Modellierung mit kontinuierlich si-

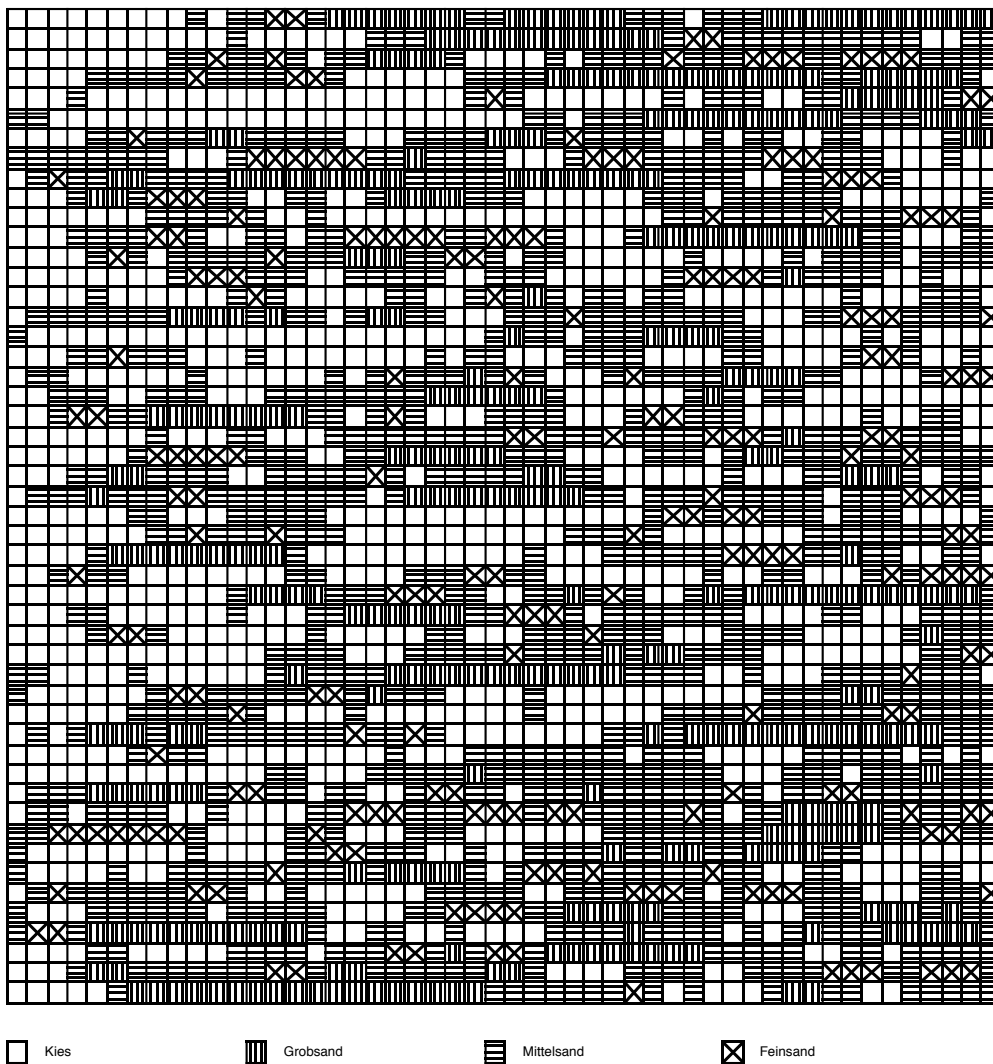
mulierte Durchlässigkeitsfeld ein deutlich breiteres Ergebnisfeld. Für praktische Belange besonders wichtig ist hierbei das relativ wahrscheinliche sehr frühe Eintreffen der Verunreinigung am Brunnen und der hohe Anteil von Modellen, bei denen die Verunreinigung vom Brunnen nicht erfaßt wird. Dieser Unterschied im Verhalten der beiden Simulationsansätze erklärt sich daraus, daß das Transportgeschehen wesentlich von den durchlässigsten Teilen des Aquifers („Kies“) bestimmt wird. Für dieses Material ist im diskreten Ansatz ein fester Wert angesetzt, während der kontinuierliche Ansatz zum Teil wesentlich höhere Werte simuliert. Im Zusammenhang mit der Autokorrelationsstruktur entstehen hierdurch bevorzugte Wegsamkeiten, die das Transportverhalten dominieren.

Diese Modellrechnungen zeigen, daß die konzeptionellen statistischen Vorgaben gravierenden Einfluß auf das Modellergebnis haben. Die Annahme, daß die Gesamtheit der angetroffenen Bodenarten einer statistischen Grundgesamtheit zugerechnet werden können und die Durchlässigkeit innerhalb dieser Gesamtheit einer Lognormalverteilung folgt, ist die Ursache der zum Teil sehr hohen Durchlässigkeiten bei der kontinuierlichen Simulation. Zerlegt man die geologische Einheit jedoch primär in mehrere diskrete Sedimenttypen, werden sich für die einzelnen Typen voraussichtlich Parameterverteilungen mit wesentlich geringerer Standardabweichung ergeben. Hieraus folgt ein deutlich geringerer Anteil an besonders hochdurchlässigen Zellen. Die Nachteile der „Schwänze“ von Normalverteilungen lassen sich durch die Begrenzung der Verteilungen mit Minimal- und Maximalwerten zum Teil beseitigen.

Daten aus übertägigen Aufschlüssen in derselben Formation oder geologischen Körpern vergleichbarer Fazies können wertvolle Informationen über die tatsächlichen statistischen Gegebenheiten liefern. Die Berücksichtigung ausschließlich von Bohrungsdaten bzw. -unterlagen ist im Regelfall nicht ausreichend. Bei hinreichender Datenlage kann auch eine Kombina-

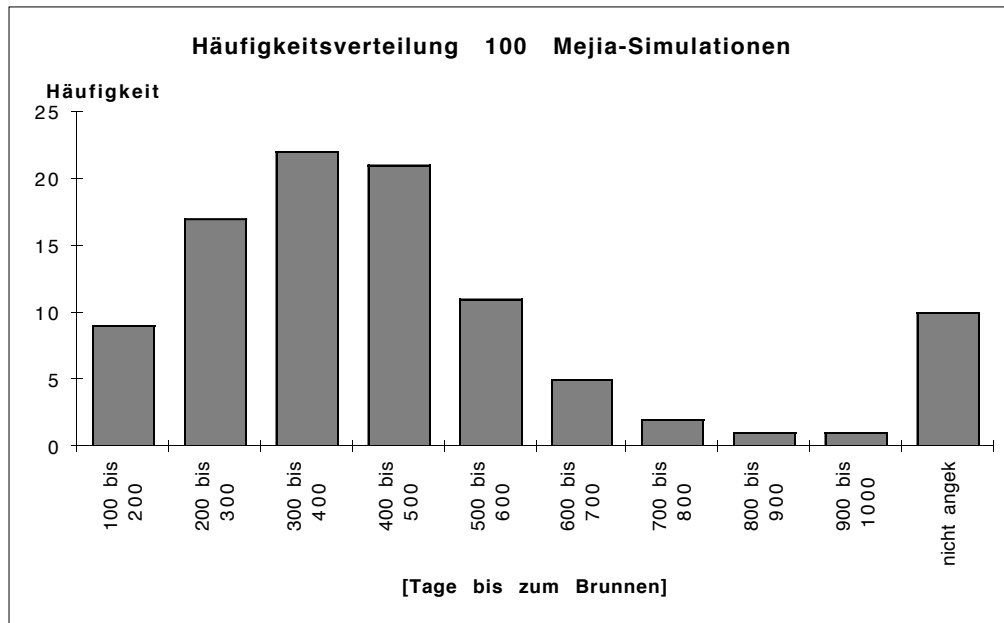


## Simulation 1

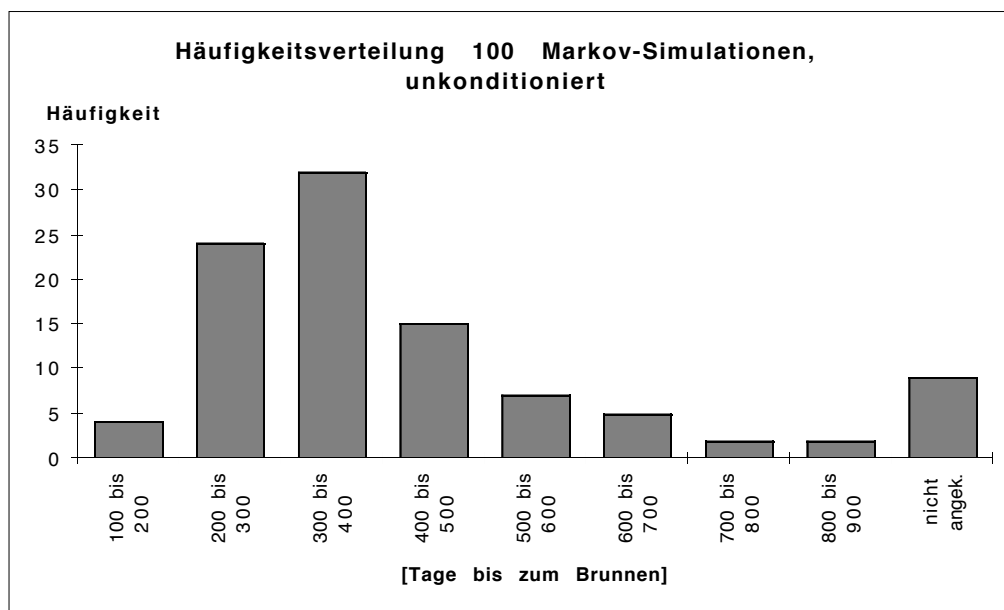


**Abb. 15:** Simulation diskreter Materialtypen mittels Markovketten, unkonditioniert, (Semi-)Variogramm entsprechend Abb. 4

tion von Struktursimulation und kontinuierlichem Ansatz innerhalb der einzelnen Strukturelemente sinnvoll sein (SCHAFMEISTER-SPIERLING, 1990: 98ff.; HALDORSEN & DAMSLETH, 1990).



**Abb. 16:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer unkonditionierten kontinuierlichen Simulation nach dem Algorithmus nach MEJIA & RODRIGUEZ-ITURBE (1974)



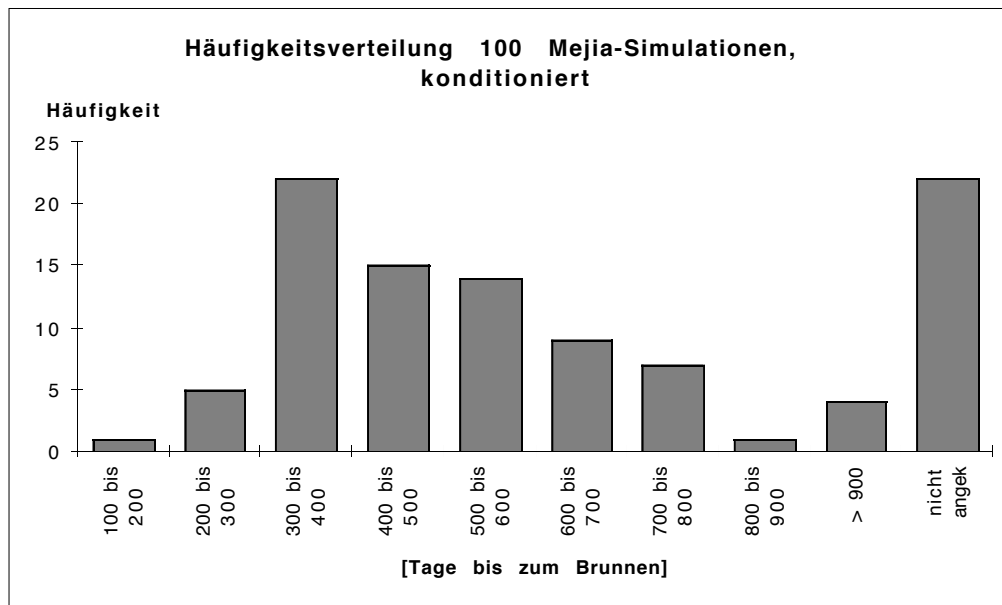
**Abb. 17:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer unkonditionierten Markov-Simulation

Im übrigen ist darauf hinzuweisen, daß der für die kontinuierliche Feldgenerierung eingesetzte Algorithmus nach MEJIA & RODRIGUEZ-ITURBE (1974) wie alle geostatistischen Generatoren Punktwerte erzeugt und daher für endliche Modellzellen durch Block-Kriging oder numerische Integration Mittelwerte gebildet werden müßten. Auf diesen Zwischenschritt wurde verzichtet, da die Übertragung von Punktschätzungen auf kleine endliche Modellzellen im Fachschrifttum als übliche Vorgehensweise beschrieben und in der gängigen Software implementiert ist. Für Modellzellen, die groß im Vergleich zur Korrelationslänge sind, wie dies in unserem Beispiel der Fall ist, führt dies zu einer Ungenauigkeit der Ergebnisse in Richtung auf eine vergrößerte Ergebnisstreuung.

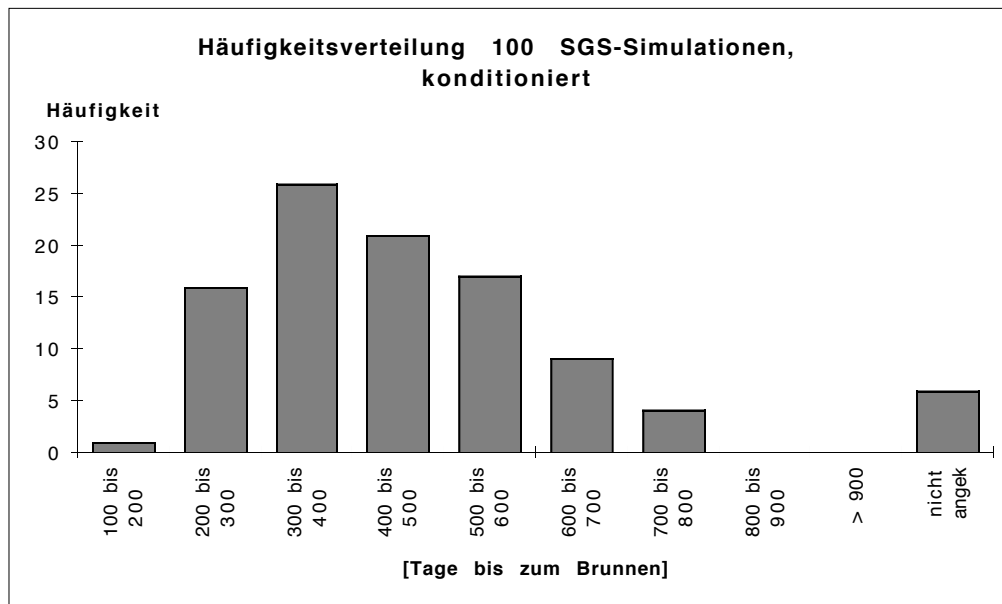
In einem letzten Experiment soll die Wirkung der Konditionierung der simulierten Parameterfelder, d. h. die Berücksichtigung vorgegebener Parameterwerte, untersucht werden. Es ist zu erwarten, daß die Varianz der Modellergebnisse durch die Konditionierung abnimmt. Einen wesentlichen Einfluß kann sie jedoch erst erreichen, wenn ein erheblicher Teil des modellierten Strömungsfeldes innerhalb der geostatistischen Reichweite (Range) von vorgegebenen Werten liegt. Bei größeren Probenabständen liegt ein wesentlicher Teil des Modellgebietes im Bereich der Gesamtvarianz und damit sozusagen im unbestimmten Niemandsland.

Im vorliegenden Beispiel beträgt die Reichweite (Range), das ist diejenige Entfernung im Variogramm (Abb. 4), bei der das Variogrammodell den Wert der Gesamtvarianz annimmt, in x-Richtung ca. 7 Zellen (70 m), in y-Richtung nur 1 Zelle (10 m). (Das Beispiel wurde aus der Analyse eines Vertikalschnittes entwickelt.) Zur Konditionierung der Simulationen werden daher nicht einzelne Zellen besetzt, sondern komplette Zellenspalten.

Bei der kontinuierlichen konditionierten Simulation (Abb. 18) zeigt sich im Vergleich zur unkonditionierten Simulation (Abb. 16)



**Abb. 18:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer konditionierten kontinuierlichen Simulation (Konditionierung nach CHIANG & KINZELBACH, 1996: 4-24 f.)

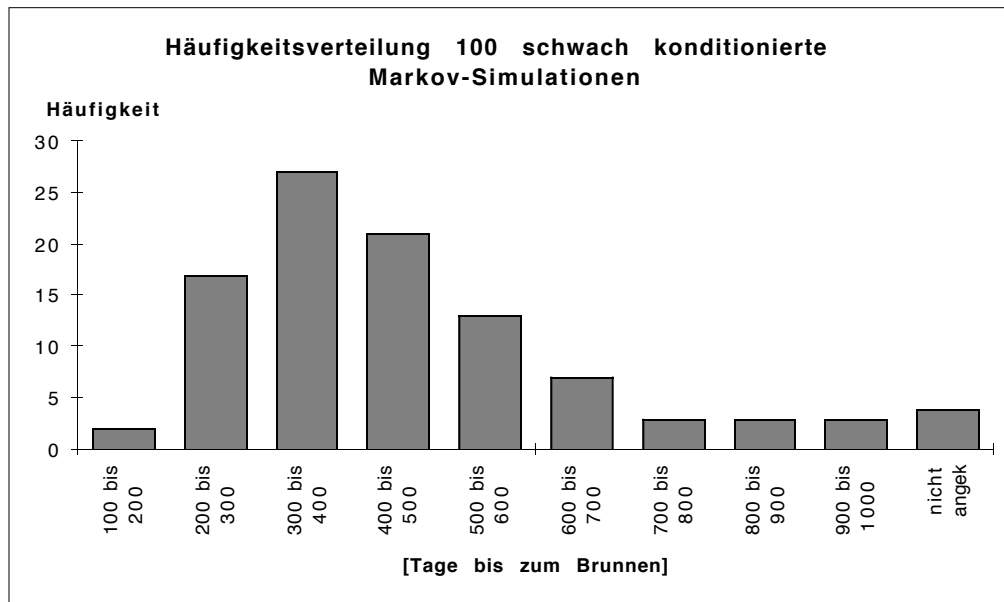


**Abb. 19:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer konditionierten sequentiellen Gauss-Simulation (150 Festwerte)

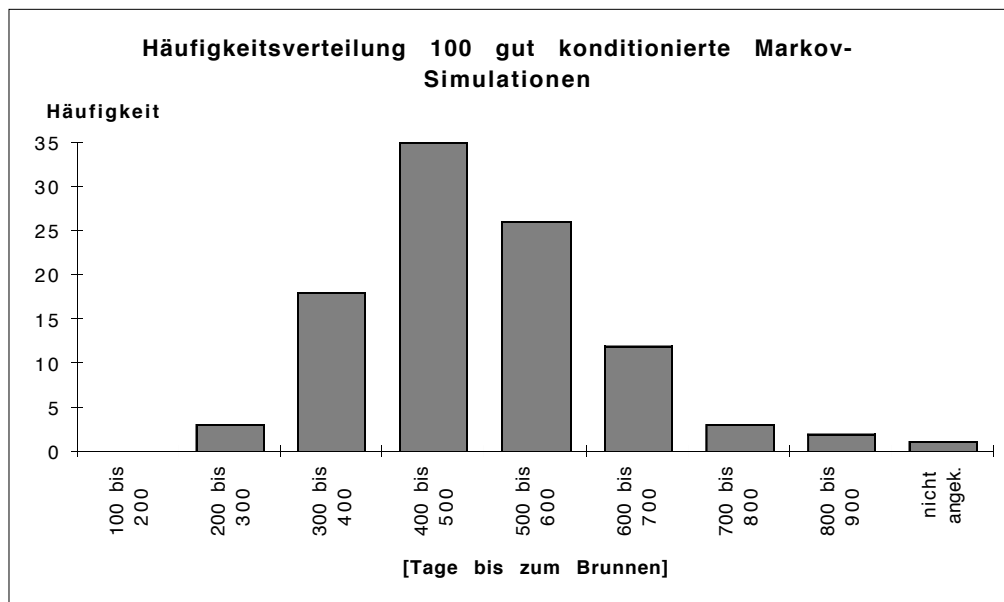
keine wesentliche Erhöhung der Aussagesicherheit durch die Zunahme der eingeflossenen Information. Die Festlegung von 150 Zellen (3 Reihen in Abständen von 12 bzw. 8 Zellen zwischen Quelle und Brunnen) erbringt keine signifikante Einschränkung des Ergebnisraums, sowie auf Grund der spezifischen Randbedingungen eine Verschiebung des Mittelwertes zu höheren Ankunftszeiten. Eine Überprüfung der statistischen und geostatistischen Parameter zeigt, daß Mittelwert und Standardabweichung erhalten bleiben, das (Semi-)Variogramm jedoch nach der Konditionierung nicht mehr reproduziert wird. Die so generierten Modelle sind also *keine* zulässigen Realisationen des Aquifers. Die vorgegebenen Daten reichten für die Konditionierung nicht aus. Hierbei handelt es sich um einen charakteristischen Effekt der zweistufigen Vorgehensweise mit einer Entkoppelung von stochastischer Simulation und Konditionierung. Entsprechendes geschieht auch bei der Verwendung des klassischen „Turning bands“-Algorithmus.

Verwendet man zur Simulation dagegen einen Algorithmus, der die Konditionierung in den Simulationsschritt integriert (sequentielle Gauss-Simulation, SGS, nach DEUTSCH & JOURNAL, 1992), so bleiben die geostatistischen Eigenschaften des Systems bewahrt. Die konditionierten Simulationen zeigen erwartungsgemäß einen deutlich eingegengten Ergebnisraum (Abb. 19). An dieser Stelle ist darauf hinzuweisen, daß das verwendete Programm in der Lage ist, auch nicht normalverteilte Parameter zu simulieren.

Bei der diskreten Simulation mittels Markov-Ketten (Abb. 20 und 21) zeigt sich im Vergleich zur unkonditionierten Simulation (Abb. 17) die Erhöhung der Aussagesicherheit durch die Zunahme der eingeflossenen Information. Die Festlegung von 150 Zellen (3 Reihen in Abständen von 12 bzw. 8 Zellen zwischen Quelle und Brunnen) erbringt bereits eine signifikante Einschränkung des Ergebnisraums, sowie auf Grund der spezifischen Randbedingungen eine Verschiebung des Mittelwertes zu



**Abb. 20:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer schwach konditionierten Markov-Simulation (50 Festwerte)



**Abb. 21:** Häufigkeitsverteilung des Eintreffens einer Verunreinigung am Brunnen auf der Grundlage einer gut konditionierten Markov-Simulation (150 Festwerte)

höheren Ankunftszeiten. Das (Semi-)Variogramm bleibt wie bei der sequentiellen Gauss-Simulation erhalten. Die mittlere Ankunftszeit liegt bei der diskreten Simulation höher als bei der kontinuierlichen. Dieser Effekt ist durch das Auftreten deutlich höherer Durchlässigkeiten am oberen Ende der angesetzten Normalverteilung zu erklären.





# 5

## Einsatzbereiche

Stochastische Modelle sind dort sinnvoll einsetzbar, wo einerseits eine erhebliche Parameterunsicherheit gegeben ist, andererseits eine Abschätzung mit Sicherheitszuschlägen oder der Worst-Case-Technik nicht möglich ist oder zu wirtschaftlich nicht vertretbaren Lösungen führt. Sie setzen dabei eine prinzipielle Kenntnis über die Variabilität der relevanten Parameter voraus.

Stochastische Grundwassermodelle können schon in einer frühen Phase der Projektbearbeitung wertvolle Informationen liefern. Es ist möglich, den vermutlichen Zugewinn an Aussagesicherheit durch zusätzliche Erkundungsmaßnahmen, insbesondere Bohrungen, zu objektivieren, indem man fiktive Datenpunkte für die Konditionierung des simulierten Parameterfeldes einsetzt (vgl. Abb. 17 und 21). Im Gegensatz zu üblichen geostatistischen Verfahren (Minimierung der Kriging-Varianz) wird hierbei die Verbesserung der Aussagesicherheit nicht allgemein, sondern im Hinblick auf die konkrete Fragestellung (z. B. Geschwindigkeit der Schadstoffausbreitung) bewertet.

Durch iterative stochastische Schritte und Abgleich mit gemessenen Werten (Wasserstände, Konzentrationen) ist eine grobe Kalibrierung durch Einengung des wahrscheinlichen Wertebereichs möglich (MEYER, 1996). Dieses Verfahren wird in vielen Fällen der Datenlage besser gerecht als eine eindeutige Modellkalibrierung mit Hilfe entsprechender Optimierungsverfahren.

Die stochastische Abgrenzung von Brunneneinzugsgebieten (Schutzgebieten) wird von KINZELBACH ET AL. (1994) und FRANZETTI & GUADAGNINI (1996) behandelt.

Der Schwerpunkt des Einsatzes außerhalb rein wissenschaftlicher Fragestellungen zeichnet sich im Bereich der Gefährdungsabschätzungen und Grundwassersanierungen ab. Hier müssen oft auf mäßiger Datenbasis weitreichende Entscheidungen getroffen werden oder weitergehende (teure) Erkundungsarbeiten begründet werden.

Bei Gefährdungsabschätzungen werden zunehmend stochastische Ansätze verwendet, da Worst-Case-Betrachtungen wirtschaftlich unvertretbare Sanierungsanforderungen nach sich ziehen. Dabei wird außer dem Schadstofftransport auch die Schadstoffwirkung am Schutzgut nach Wahrscheinlichkeitsbetrachtungen abgeschätzt (ANDRICEVIC & CVETKOVIC, 1996).

Der Einsatz stochastischer Modelle erlaubt die Festlegung von Sicherheitszuschlägen bei der Dimensionierung von Grundwassersanierungen. Bei dem in Abschnitt 4.4 verwendeten Beispiel könnte man z. B. die Förderrate des Brunnens so bestimmen, daß sie auch bei Annahme ungünstiger geostatistischer Parameter des Durchlässigkeitsfeldes ausreicht, die Verunreinigung zuverlässig zu fassen.

SCHAD & TEUTSCH (1996) beschreiben die Anwendung eines stochastischen Ansatzes auf die Dimensionierung eines passiven Sanierungsverfahrens (Funnel-and-Gate) in einem ausgeprägt heterogen-anisotropen Aquifer. Notwendige Sicherheitszuschläge bei der Auslegung des Systems werden dadurch auf eine rationale Basis gestellt und nicht „nach Gefühl“ angesetzt.

# 6

## Anmerkungen zum Rechenaufwand und zur Softwaresituation

In der Vergangenheit waren die in Ingenieurbüros gängigen rechen-technischen Ressourcen für viele Modellierungsaufgaben begrenzend. Durch die stürmische Entwicklung auf dem Hardwaresektor sind heute aber auch mit „einfachen“ Rechnern selbst stochastische Modellierungen wirtschaftlich machbar. Die in dem oben verwendeten Beispiel nötigen Rechenläufe benötigten einschließlich Simulation der jeweiligen Parameterfelder wenige Minuten CPU-Zeit mit einem Intel-Pentium-Prozessor. Den größten Rechenaufwand stellt die Überprüfung der Variographie an den simulierten Feldern dar. Diese benötigte einige Stunden.

Die verwendete Software ist in Abschn. 9 aufgeführt. Geostatistische Simulationssoftware ist noch unzureichend verfügbar. Das verwendete Programmpaket GSLIB wird auf Diskette für IBM-kompatible Rechner als Programmcode ohne Benutzeroberfläche geliefert. Es ist für Unix-Rechner entwickelt worden. Bei der Compilierung mit dem auf PCs weit verbreiteten Fortran-Compiler der Firma Lahey treten Schwierigkeiten auf, deren Behebung zumindest Grundkenntnisse der Programmierung voraussetzt. Die Programme von ANLAUF ET AL. (1988) enthalten einige Fehler, die für diese Arbeit berichtigt wurden.

Der Algorithmus nach MEJIDA & RODRIGUEZ-ITURBE, der in ASM (Version 5 und höher) und Processing Modflow enthalten ist, ist nur beim Vorliegen eines exponentiellen Variogrammodells anwendbar. Ein Block-Kriging für die Übertragung der Punktschätzungen auf größere Modellzellen ist nicht vorgesehen. In der gegenwärtigen Form ist die Konditionierung der simulierten Wertefelder nicht automatisiert. Bezüglich der Probleme bei der Konditionierung wird auf Abschn. 4.4 verwiesen.

Bis auf weiteres wird daher die Anwendung stochastischer Modelle auf Forschungseinrichtungen und einzelne Spezialunternehmen beschränkt bleiben.

Es ist nicht zu erwarten, daß in absehbarer Zeit eine benutzerfreundliche und gegen alle denkbaren Formen unsachgemäßer Anwendung abgesicherte Software entwickelt wird.

# 7

## Ausblick

Stochastische Verfahren zur Simulation von Parameterfeldern in Verbindung mit (numerischen) Grundwassermodellen haben im Bereich der Wissenschaft einen festen Platz unter den gängigen Methoden erworben. In Anbetracht der heute allgemein verfügbaren rechentechnischen Ressourcen ist die Anwendung derartiger Verfahren auf ingenieurtechnische „Alltagsprobleme“ möglich und wird daher in der nächsten Zeit zunehmen.

Es muß davon ausgegangen werden, daß unter den Bedingungen der ingenieurtechnischen Praxis nicht in allen Fällen mit der notwendigen Sorgfalt auf die Einhaltung der Voraussetzungen und Grenzen der verwendeten Verfahren geachtet wird. Es ist daher zu empfehlen, soweit möglich mathematisch robusten Verfahren den Vorzug vor empfindlicheren Methoden zu geben (siehe Abschn. 4.4). Als robuste Verfahren sind alle Simulationsverfahren zu betrachten, die stochastische Simulation und Konditionierung in einem Schritt integrieren, insbesondere sequentielle Gauss-Simulation, sequentielle Indikator-Simulation und Markov-Ketten. Zwei-Schritt-Verfahren, die die Konditionierung von der Simulation entkoppeln, führen bei geringer Zahl von Datenpunkten, wie dies für praktische Anwendungsfälle die Regel ist, zu Schwierigkeiten. Dies gilt insbesondere für den „Turning bands“-Algorithmus und den Algorithmus nach MEJIA & RODRIGUEZ-ITURBE (1974), der in verschiedenen Grundwassermodellen integriert ist.

Zur Zeit gibt es noch keine benutzerfreundliche Software, so daß im Regelfall die Anwendung stochastischer Konzepte auf Unternehmen beschränkt bleibt, die selber Programme entwickeln oder vorhandene Programme modifizieren können.

Stochastische Methoden können ein Hilfsmittel bei der Modellkalibrierung sein. Dies gilt insbesondere für komplexe Strömungssituationen, bei denen gängige Parameteroptimierungsalgorithmen Konvergenzschwierigkeiten aufweisen. Möglicherweise sind zweistufige Kombinationen von stochastischem Ansatz (Eingrenzung des Ergebnisraums) und automatisierter Kalibrierung (Bestimmung der optimalen Parameter) sinnvoll.

Eine weitergehende Nutzung der Möglichkeiten stochastischer Ansätze hängt wesentlich von der Akzeptanz bei den Geldgebern ab. Numerische Grundwassermodelle, die auch erst seit einigen Jahren als allgemein gängiges Werkzeug durchgesetzt sind, bestechen durch ihre eindeutigen Ergebnisse. Betrachtungen zur Modellsensitivität werden zwar regelmäßig angestellt, haben aber meist einen geringen Stellenwert.

Stochastische Modelle legen die Unsicherheiten des Modells und damit die Fragwürdigkeiten der Extrapolation (Prognose) offen. Sie stellen dabei aber eine rationale Basis für die Bewertung der Modellergebnisse dar. Sie bilden eine Erweiterung der konventionellen Sensitivitätsanalyse. Konventionelle Strategien des Umgangs mit den Unsicherheiten (pauschale Sicherheitszuschläge, Worst-Case, Szenarien-Technik) sind bei komplexen Fragestellungen, insbesondere Transportproblemen in dreidimensionalen Strömungsfeldern, unterlegen.

Ein wesentlicher Schwachpunkt stochastischer Ansätze zum gegenwärtigen Zeitpunkt ist das weitgehende Fehlen systematischer Erhebungen statistischer und geostatistischer Parameter für die Hauptgrundwasserleiter. Hier muß man gegenwärtig weitgehende Annahmen treffen, die durch Daten nur unzureichend gestützt sind. In dem in Abschnitt 4.4 verwendeten Beispiel hätte man korrekterweise außer der Simulation von Wertefeldern mit einem vorgegebenen Variogrammodell auch dieses Modell, bzw. seine Parameter, variieren müssen. Dies hätte die Zahl der erforderlichen Simulationsläufe drastisch erhöht.

Für regionale Betrachtungen (Wasserwirtschaftsmodelle, Modellgrößen von einigen 10er bis 100er km<sup>2</sup>) kann auf Daten der regionalen Grundwassererkundung zurückgegriffen werden. Hierdurch sind jedoch nur großräumige Korrelationsstrukturen (typischerweise im km-Bereich) zu erfassen (z. B. CHRISTENSEN, 1997). Derartige Großmodelle werden im allgemeinen von Forschungseinrichtungen, den geologischen Landesämtern und großen Wasserversorgungsunternehmen betrieben.

Im Bereich der statistischen Analyse, insbesondere für kleinräumige Betrachtungen, die den typischen Bereich des ingenieurtechnischen Tagesgeschäfts bilden, ist noch erheblicher Nachholbedarf gegeben (z. B. SCHAFMEISTER & SCHRÖTER, 1992).

Abschließend sind daher folgende Forderungen zu stellen:

1. Bei Fehlen konkreter statistischer Werte der zu simulierenden Parameter ist einfachen Ansätzen der Vorzug vor komplizierten geostatistischen Ansätzen zu geben, z. B. Gleichverteilung vor Normalverteilung (vgl. MEYER, 1996).
2. Geostatistische Parameter sollten möglichst nicht aus Bohrungsdaten, sondern aus kontinuierlich erschlossenen Profilen, z. B. Kiesgruben, bestimmt werden. Da in jüngerer Zeit derartige Aufschlüsse selten geworden sind und meist schnell wieder verfüllt werden, muß auch auf qualitative Auswertungen von Aufschlußaufnahmen aus der Vergangenheit zurückgegriffen werden. Hierzu gibt es umfangreiches Material in den geologischen Landesämtern, den regional tätigen wissenschaftlichen Einrichtungen und ggf. Wirtschaftsunternehmen.

Hilfsweise kann auch auf Daten aus intensiv erbohrten Bereichen oder aus obertägig zugänglichen Schichten vergleichbarer Fazies zurückgegriffen werden (HALDORSEN & DAMSLETH, 1990).

3. Der Einsatz stochastischer Grundwassermodelle entbindet in der konkreten Entscheidungsfindung nicht von der gutachterlichen Bewertung der Modellergebnisse mit dem Ansatz sachgemäßer Sicherheitszuschläge.



# 8

## Literaturverzeichnis

- AKIN, H. & SIEMES, H. (1988): *Praktische Geostatistik*. – Springer: X + 304 S.; Berlin
- ALLEN, J. R. L. (1978): *Studies in fluvial sedimentation: an exploratory quantitative model for the architecture of avulsion-controlled alluvial suites*. – *Sedim. Geol.*, **21**: 129–147; Amsterdam
- ANDRICEVIC, R. & CVETKOVIC, V. (1996): *Evaluation of risk from contaminants migrating by groundwater*. – *Water Resour. Res.*, **32**: 611–621; Washington, D.C.
- BRIDGE, J. S. & LEEDER, M. R. (1979): *A simulation model of alluvial stratigraphy*. – *Sedimentol.*, **26**: 617–644; Oxford
- CHRISTENSEN, S. (1997): *On the strategy of estimating regional-scale transmissivity fields*. – *Ground Water*, **35**: 131–139; Westerville, OH
- DAVIS, J. C. (1986): *Statistics and data analysis in geology*. – Wiley: X + 646 S.; New York
- DELHOMME, J. P. (1979): *Spatial variability and uncertainty in groundwater flow parameters: a geostatistical approach*. – *Water Resour. Res.*, **15**: 269–280; Washington, D.C.
- DEUTSCH, C. V. & JOURNEL, A. G. (1992): *GSLIB – Geostatistical software library and user's guide*. – Oxford University Press: X + 340 S.; New York/Oxford
- DEUTSCH, C. V. & WANG, L. (1996): *Hierarchical object-based stochastic modeling of fluvial reservoirs*. – *Math. Geol.*, **28** : 857–880; New York / London
- FRANZETTI, S. & GUADAGNINI, A. (1996): *Probabilistic estimation of*

- well catchments in heterogeneous aquifers. – *J. Hydrol.*, **174**: 149–171; Amsterdam
- GELHAR, L. W. & AXNESS, C. L. (1983): Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. – *Water Resour. Res.*, **19**: 161–180; Washington, D.C.
- GORELICK, S. M., FREEZE, R. A., DONOHUE, D. & KEELY, J. F. (1993): Groundwater contamination – optimal capture and containment. – CRC Lewis: XXVIII + 385 S.; Boca Raton, FL
- HALDORSEN, H. H. & DAMSLETH, E. (1990): Stochastic modeling. – *J. Petrol. Tech.*, **42**: 404–412; Dallas, TX
- HARBAUGH, J. W. & BONHAM-CARTER, G. (1970): Computer simulation in geology. – Wiley-Interscience: XIV + 575 S.; New York
- JOURNAL, A.G. & HUIJBREGTS, C. J. (1978): Mining geostatistics. Academic: X + 600 S.; New York
- KINZELBACH, W., LI, G. M. & VASSOLO, S. (1994): Stochastische Bestimmung von Brunneneinzugsgebieten. – 14. Jahrestagung der Fachsektion Hydrogeologie der Deutschen Geologischen Gesellschaft, Kurzfassungen der Vorträge und Poster: **11**; Mainz
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1991a): SIC – Statistische Verteilung von Isochronen um einen Einzelbrunnen in Grundströmung. – In: KINZELBACH & VOSS (1996): 157–163; Berlin
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995): Grundwassermodellierung. – Bornträger: 283 S.; Berlin/Stuttgart
- KINZELBACH, W. & VOSS, A. (1996): Altlastenhandbuch des Landes Niedersachsen. Materialienband Berechnungsverfahren und Modelle. – Springer: 216 S.; Berlin
- KYRIELEIS, W. & SICHARDT, W. (1930): Grundwasserabsenkung bei Fundierungsarbeiten. – Springer: VIII + 286 S.; Berlin
- LIN, C. & HARBAUGH, J. W. (1984): Graphic display of two- and

- three-dimensional Markov computer models in geology. – Van Nostrand Reinhold: XII + 180 S.; New York
- LUO, J. (1993): Konditionale Markovsimulation 2-dimensionaler geologischer Probleme. – Berliner geowiss. Abh., D, **4**: 1–103; Berlin
- MEJIA, J. M. & RODRIGUEZ-ITURBE, I. (1974): On the synthesis of random field sampling from the spectrum: an application to the generation of hydrologic spatial processes. – Water Resour. Res., **10**: 705–711; Washington, D.C.
- MERKEL, B., DIETRICH, P. G., STRUCKMEIER, W. & LÖHNERT, E. P. (Hrsg.) (1996): Grundwasser und Rohstoffgewinnung. – von Loga: 551 S.; Köln
- MEYER, L. (1996): Generelle Sensitivitätsanalyse der Grundwasserströmung eines pleistozänen Rinnensystems. – Mitt. Inst. Wasserwirt., Hydrol. landwirt. Wasserbau Univ. Hannover, **82**: 185–330; Hannover
- PRICE, W. E. (1975): Simulation of alluvial fan deposition by a random walk model. – Water Resour. Res., **10**: 263–274; Washington, D.C.
- PTAK, T. (1993): Stofftransport in heterogenen Porenaquiferen: Felduntersuchungen und stochastische Modellierung. – Mitt. Inst. Wasserbau Univ. Stuttgart, **80**: X + 176 S.; Stuttgart
- SCHAD, H. & TEUTSCH, G. (1996): Einfluß von Untergrundheterogenitäten auf die Dimensionierung von passiven Systemen zur Sanierung kontaminierter Standorte. – In: MERKEL ET AL. (1996): 436–441; Köln
- SCHAFMEISTER-SPIERLING, M.-T. (1990): Geostatistische Simulationstechniken als Grundlage der Modellierung von Grundwasserströmung und Stofftransport in heterogenen Aquifersystemen. – Schelzky & Jeep: 143 S.; Berlin
- SCHAFMEISTER, M.-T. & SCHRÖTER, J. (1992): Praktische Erfahrun-

gen bei der Erfassung der räumlichen Struktur von Durchlässigkeiten ( $k_f$ -Wert) in unterschiedlichen porösen Medien. – Beitr. Math. Geol. Geoinf., **3**: 80–84; Köln

SPITZ, K. & MORENO, J. (1996): A practical guide to groundwater and solute transport modeling. – Wiley: XVII + 461 S.; New York

THEIS, C. V. (1935): The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using groundwater storage. – American Geophysical Union Transactions, **16**: 519–524; Washington, D.C.

THOMSEN, R. (1990): Effect of climate variability and change in groundwater in Europe. – Nordic Hydrol., **21**: 185–194; Copenhagen

THOMSEN, R. (1993): Future droughts, water shortages in parts of western Europe. – EOS, Transactions of the American Geophysical Union, **74**: 161–165; Washington, D.C.

# 9

## Verwendete Programme

- ANLAUF, R.; KERSEBAUM, K.C.; PING, L.Y.; NUSKE-SCHÜLER, A.; RICHTER, J.; SPRINGOB, G.; SYRING, K.M. & UTERMANN, J. (1988): Modelle für Prozesse im Boden. – Enke: 232 S.; Stuttgart [diverse bodenkundliche Programme; einschließlich 2D-Variographie und -Kriging; Source-Code]
- CHIANG, W.-H. & KINZELBACH, W. (1996): Processing Modflow, Version 4.0 [3D-Finite Differenzen, Strömung und Transport; einschließlich eines unkonditionierten stochastischen 2D-Feldgenerators]
- DEUTSCH, C. V. & JOURNAL, A. G. (1992): GSLIB – Geostatistical software library, Version 1 [Unterprogrammsammlung in Fortran für geostatistische Analysen und Simulationen, 2D und 3D; Source-Code]
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1991b): ASM, Version 3.01 [2D-Finite Differenzen, Strömung und Transport; Source-Code]
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995): ASM, Version 5.0. – Beilage zu: Kinzelbach, W. & Rausch, R. (1995) [2D-Finite Differenzen, Strömung und Transport; einschließlich eines unkonditionierten stochastischen Feldgenerators; Source-Code]