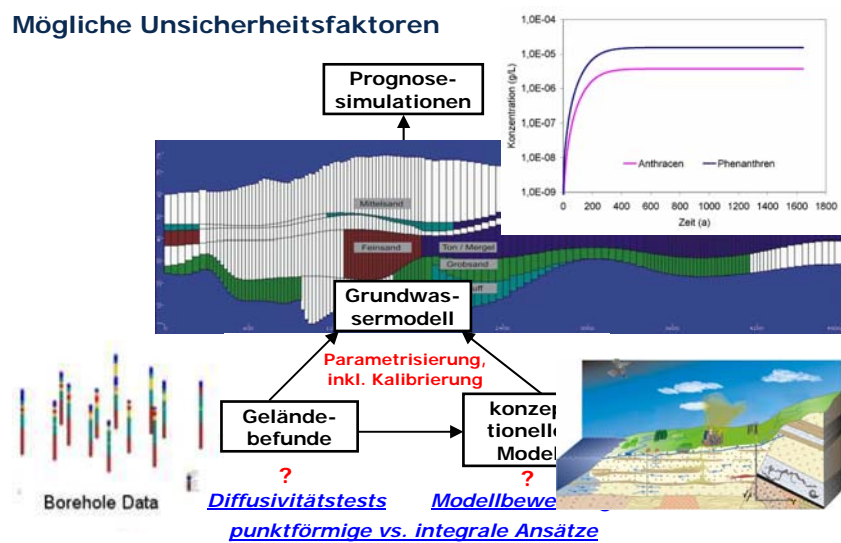


Rudolf Liedl

# Unsicherheiten bei der Grundwassermodellierung – Herausforderungen und Lösungsansätze

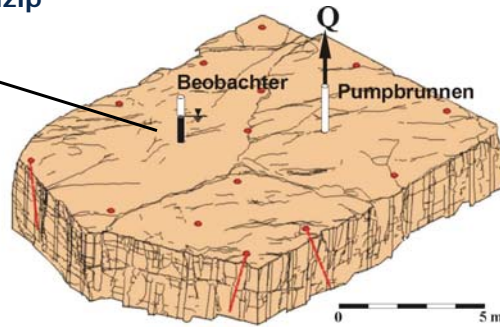
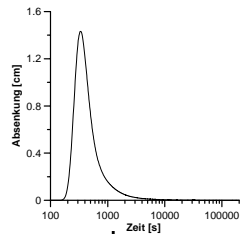
Graz, 24. Juni 2008

## Mögliche Unsicherheitsfaktoren



### Diffusivitätstests: Prinzip

hydraulisches Signal am Beobachter



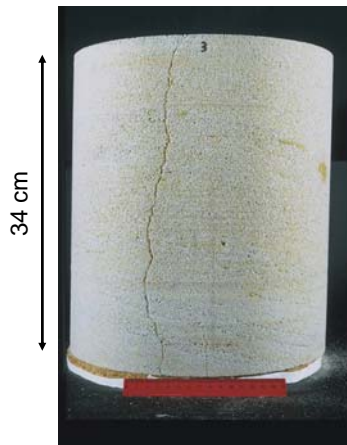
Bestimmung der Signallaufzeit (Peakankunft)

Berechnung der Diffusivität (=  $T/S$ ) zwischen Pumpbrunnen und Beobachter („Rekonstruktion“)

(Teil-)Parametrisierung der Strömungsgleichung

$$S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( T \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( T \frac{\partial h}{\partial y} \right)$$

### Tübinger Laborversuche (mit Luft als Testfluid)

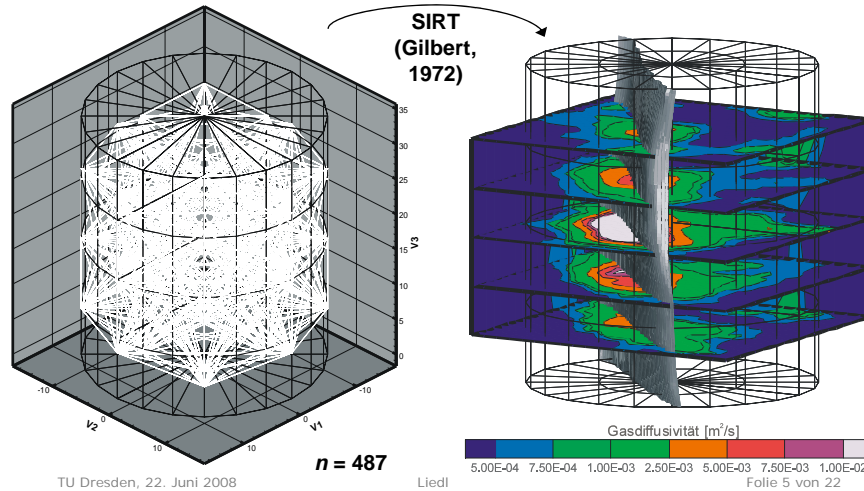


Sandstein (Süddeutschland)



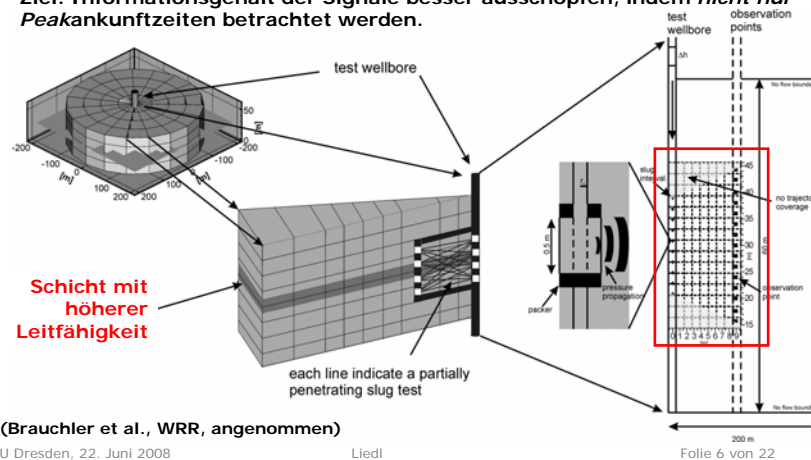
(Versuche von M<sup>c</sup>Dermott, Leven-Pfister, Brauchler)

### Rekonstruktion der Probenstruktur – „pneumatische / hydraulische Tomografie“

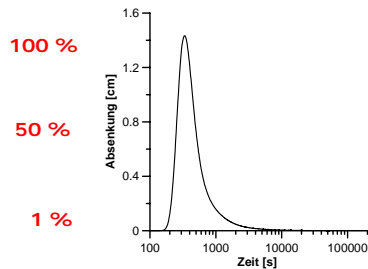


### Erweiterung der Rekonstruktionstechnik

- Durchführung diverser numerischer Experimente (→ Prozessverständnis)
- Ziel: Informationsgehalt der Signale besser ausschöpfen, indem *nicht nur* Peakankunftszeiten betrachtet werden.



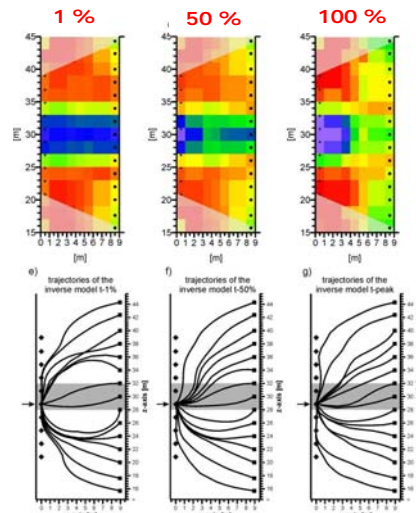
### Erste Ergebnisse



- Über Erstankunftszeiten lassen sich – erwartungsgemäß – Bereiche mit höherer hydraulischer Leitfähigkeit besser identifizieren.
- In die Peakankunftszeiten gehen Einflüsse von Bereichen mit geringerer Leitfähigkeit anteilmäßig mit ein.

TU Dresden, 22. Juni 2008

Liedl

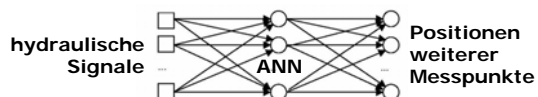
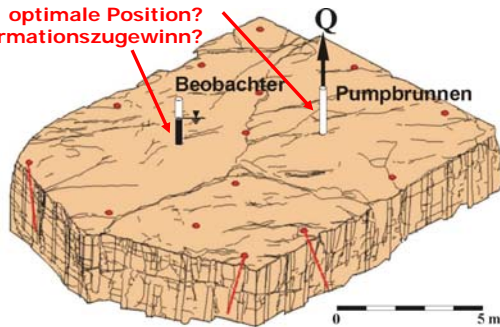


Folie 7 von 22

### Ausblick: Optimierung von Sender - / Empfängerpositionen

optimale Position?  
bestmöglicher Informationszugewinn?

- Ziel ist die Kombination von Diffusivitätstests mit Optimierungsverfahren z. B. auf der Basis neuronaler Netze ("artificial neural networks" – ANN), um die Aussagekraft der Messungen zu erhöhen.
- Dabei sollen die Fähigkeiten von ANNs bei der Mustererkennung (= Rekonstruktion von Aquifereigenschaften aus hydraulischen Signalen) genutzt werden.



TU Dresden, 22. Juni 2008

Liedl

Folie 8 von 22

## „Punktformige“ Erkundung einer Schadstofffahne

- Praktische Fragestellungen können oftmals mit einem geringeren Detaillierungsgrad, d. h. ohne „Punktinformation“ bearbeitet werden.
- Voraussetzung hierfür ist, dass lediglich „integrale“, d. h. auf eine bestimmte Fläche oder auf ein bestimmtes Volumen bezogene Größen benötigt werden.
- Ein Beispiel ist dabei die Bestimmung von Schadstofffrachten im Abstrom von Schadensherden (Bewertung von „Natural Attenuation“).

## Immissionspumpversuche

Pumpversuche Messung von  $\alpha(t)$  → Stoffspezifische Konzentrationsganglinien

Verdachtsfläche  
Schadstoffquellen (Exakte Lage i.a. unbekannt)

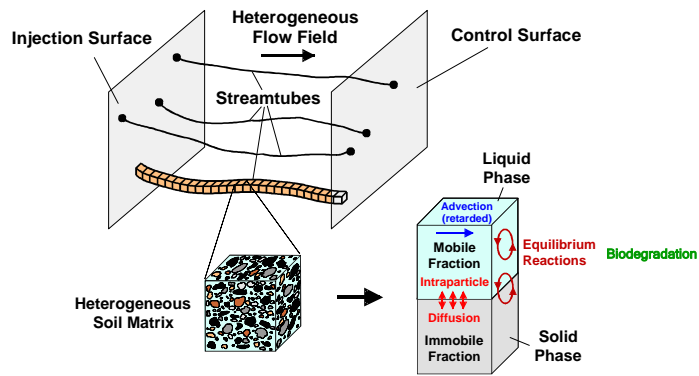
Kontrollquerschnitte  
Isochronen  
Br. 1  
Br. 2  
Br. 3

Fracht und mittlere Konzentration an Kontrollquerschnitten

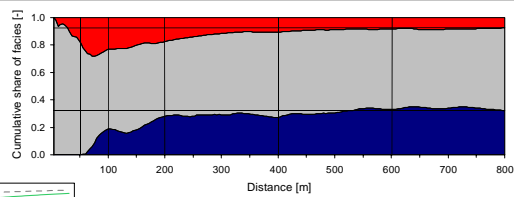
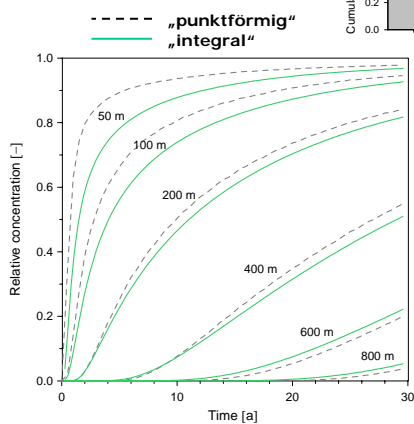
Inversionsalgorithmus (mit num. Strömungs- / Transportmodell)

→ höhere Sicherheit durch „integrale“ Erkundung

### „Integrale Modellierung“: Kontrollquerschnitte



### Ergebnisvergleich



■ Facies G  
 ■ Facies Gm  
 ■ Facies S

- „integrales“ Modell ist rechen-effizienter (1D vs. 2D)
- Die Berücksichtigung der räumlichen Verteilung der lithologischen Komponenten wird für kürzere Transportstrecken relevanter.

### Bewertung von Modellansätzen

- Selbstverständlich kann mit einer zunehmenden Anzahl von Kalibrierparametern eine immer bessere Modellanpassung an den vorhandenen Datenbestand erzielt werden.
- Gleichzeitig geht jedoch die Belastbarkeit der Kalibrierergebnisse zurück. Damit verringert sich i. d. R. die Prognosefähigkeit des Modells.
- Diese konkurrierenden Anforderungen lassen sich im sog. „Akaike Information Criterion“ berücksichtigen.
- Hierin gehen Grundlagen aus der Informationstheorie ein (speziell Qualitätsbewertung bei der Nachrichtenübermittlung).

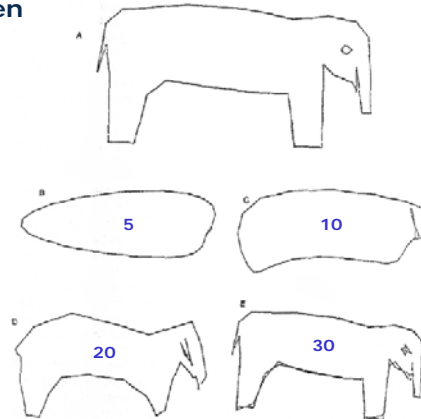


FIGURE 1.2 "How many parameters does it take to fit an elephant?" was answered by Wei (1975). He started with an idealized drawing (A) defined by 36 points and used least squares Fourier sine series fits of the form  $x(t) = a_0 + \sum_{i=1}^K a_i \sin(i\pi/36)$  and  $y(t) = b_0 + \sum_{i=1}^K b_i \sin(i\pi/36)$  for  $i = 1, \dots, N$ . He examined fits for  $K = 5, 10, 20$ , and 30 (shown in B-E) and stopped with the fit of a 30 term model. He concluded that the 30-term model "may not satisfy the third grade art teacher, but would carry most chemical engineers into preliminary design."

### Kriterium von Akaike

$$AIC_c = n \ln \hat{\sigma}^2 - n \ln(2\pi) - n + \frac{2nK}{n - K - 1} \rightarrow \min.!$$

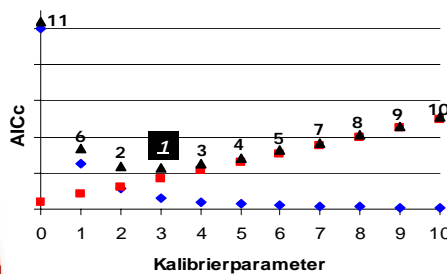
Maß für Abweichung

"penalty term"  
(K-1 = Anzahl Kalibrierparameter)

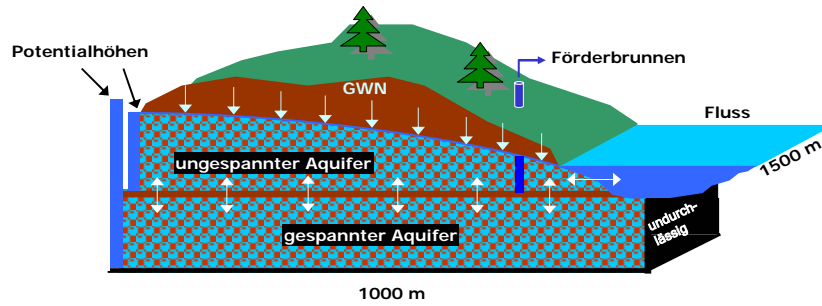


Hirotoku Akaike

AICc = "corrected Akaike Information Criterion"

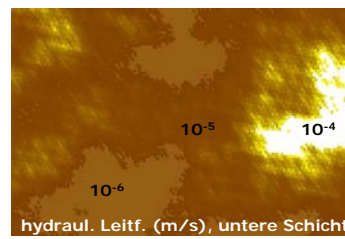
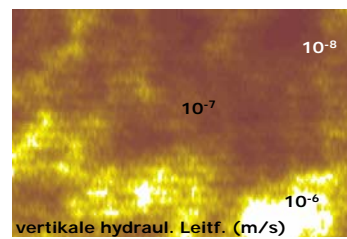
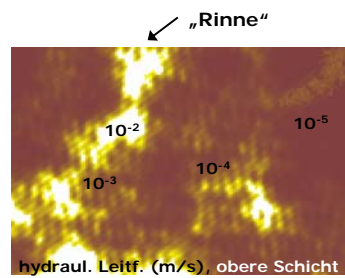
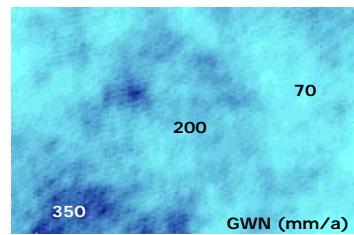


### Demonstrationsbeispiel



einfaches 2D-Grundwassermodell mit rechteckigem Grundriss, zwei Schichten (gespannt und ungespannt), einem Förderbrunnen, einem Fluss, Grundwasserneubildung (GWN) und zwei vorgegebenen Potentialhöhen.

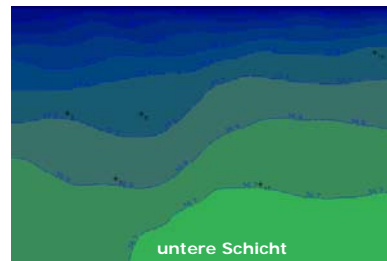
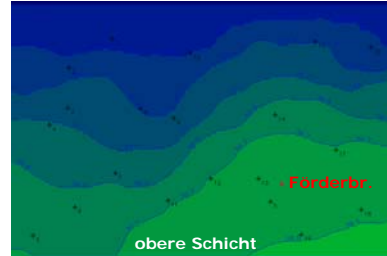
### Heterogenität



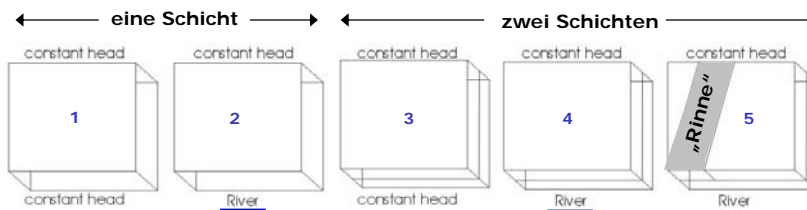


## Hydraulische Potentialhöhen

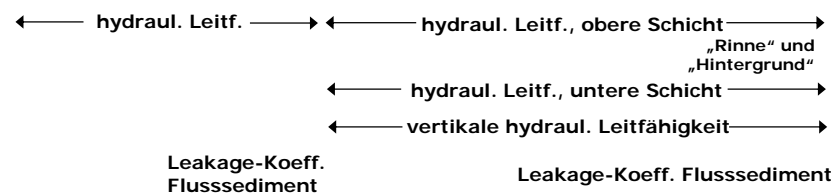
- Modellresultate mit PMWIN für stationäre Grundwasserströmung → computergenerierte Ausgangsbasis ("virtual reality")
- Hauptströmungsrichtung von „Nord“ (vorgegebene Potentialhöhen) nach „Süd“ (Fluss)
- Die hydraulischen Potentialhöhen werden an 19 Messstellen bestimmt.
- Diese Werte bilden den Datenbestand für die nachfolgende Kalibrierung von fünf Modellen mit PEST.



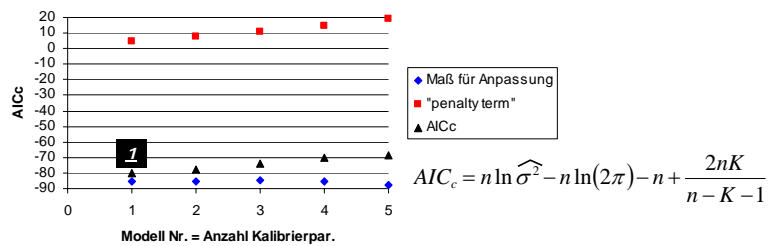
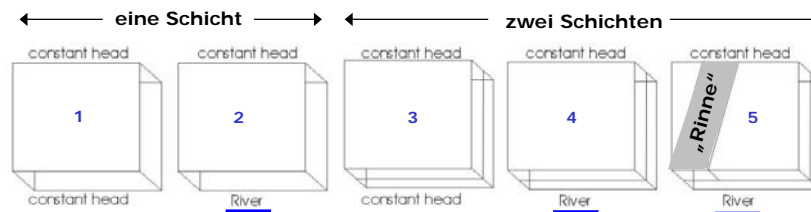
## Die fünf Kandidaten-Modelle



Kalibrierparameter:



"... and the winner is":



### Vorsichtige Bewertung

- Das Modell 1 mit dem kleinstem AIC-Wert ist „optimal“ im Sinne einer guten Modellanpassung bei gleichzeitiger Verwendung von möglichst wenigen Parametern.
- „Optimal“ ist dieses Modell selbstverständlich nur innerhalb der untersuchten Menge von Kandidatenmodellen und bzgl. der zur Eichung verwendeten Daten.
- Das Demonstrationsbeispiel wurde vom einfachsten Modell mit einem homogenen Grundwasserleiter und einer „falschen“ Randbedingung gewonnen.
- Mögliche Gründe:
  - unzureichende Datenbasis  
→ höhere Erkundungsdichte erforderlich?
  - geringe Durchflüsse in der unteren Schicht  
→ keine Notwendigkeit für Zwei-Schichten-Modell?
  - subjektive Auswahl der fünf Modelle  
→ Auswahl der Kandidaten-Modelle niemals durch den „Schöpfer“ der „virtual reality“?

## Kurzes Gesamtresümee

- Die „praktischen“ Probleme in der Grundwassermodellierung liegen seltener beim eigentlichen Software Engineering, sondern in den allermeisten Fällen bei der Parametrisierung der Modelle bzw. bei der Modellbildung.
- Mit Hilfe geeigneter Erkundungs- und Modellbewertungstechniken sollte versucht werden, den Entwicklungsvorsprung des Software Engineering aufzuholen.
- Verbesserungen der Prognosefähigkeit von Grundwassermodellen scheinen erzielbar durch
  - den Einsatz integraler Modellansätze (falls Fragestellung geeignet!)
  - die Verwendung von Ergebnissen aus Diffusivitätstests (als Beispiel für erhöhte räumliche Auflösung bei der Modellparametrisierung),
  - die Qualitätsbewertung von Modellen mit AIC (oder ähnlichen Kriterien).
- Zumindest die beiden letztgenannten Methoden befinden sich im Hinblick auf routinemäßige Anwendungen noch in den Kinderschuhen.

## Dank

- Mitarbeiter am Institut für Grundwasserwirtschaft:  
José Guillermo de Aguinaga Ruíz Esparza, MSc.  
Dr. Edward A. Amankwah  
Dr. Michael Dietze  
Dipl.-Ing. Thomas Reimann
- Kooperationspartner:  
Dr. Ralf Brauchler (Geowissenschaftliches Zentrum, Universität Göttingen)  
Dr. Peter Dietrich (UFZ, Leipzig)  
Dr. Werner Dröge (Institut für Hydrologie und Meteorologie, TU Dresden)  
Dr. Carsten Leven-Pfister (UFZ, Leipzig)  
Prof. Dr. Martin Sauter (Geowissenschaftliches Zentrum, Universität Göttingen)  
Prof. Dr.-Ing. Gerd H. Schmitz (Institut für Hydrologie und Meteorologie, TU Dresden)

**Vielen Dank für die Einladung!**  
**Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!**