

Erfassung der Parameterunsicherheit im Rahmen der Sickerwasserprognose durch Markov-Chain-Monte-Carlo-Simulation (MCMC)

S. Iden¹, N. Gronwald¹, A. Peters¹, U. Buczko² und W. Durner¹

Einleitung

Die simulationsgestützte Prognose von Schadstofffrachten und -konzentrationen aus der ungesättigten Bodenzone ins Grundwasser im Rahmen der Sickerwasserprognose erfordert neben der Bestimmung von Modellparametern eine zuverlässige Abschätzung der Prognoseunsicherheit. Diese ergibt sich aus verschiedenen Unsicherheitsquellen, wie beispielsweise Messfehlern (Anfangs- und Randbedingungen, Kalibrierungsdaten) und Unsicherheiten der Modellstruktur. Zur Bestimmung von Transportparametern und mobilisierbaren Schadstoffvorräten aus kontaminierten Substraten werden an der TU Braunschweig im Rahmen des BMBF-Schwerpunktprogramms „Sickerwasserprognose“ instationäre ungesättigte Säulenversuche durchgeführt. Dieser Beitrag konzentriert sich auf den Teilkomplex Parameterunsicherheit.

Materialien und Methoden

Folgendes Szenario liegt den Ausführungen zu Grunde: aus einer gepackten Laborsäule aus kontaminiertem Bodenmaterial werden insgesamt ca. sieben Porenvolumina eluiert. Die instationäre Durchführung des Experiments mit einer mehrtägigen Flussunterbrechung ermöglicht die Identifikation ratenlimitierter Desorptionsprozesse für den Übergang von Schadstoffen von der Festphase in die Bodenlösung. Ein typischer Konzentrationsverlauf am unteren Rand einer Bodensäule ist in Abb. 1 dargestellt. Bei bekannten hydraulischen Eigenschaften der Bodenmatrix ergibt sich die Dynamik der flussgemittelten Konzentration aus den vier Parametern Verteilungskoeffizient K der Freundlichisotherme, Exponent n der Freundlichisotherme, Ratenparameter α und der Anfangskonzentration in der Bodenlösung c_0 . Zur inversen Bestimmung der vier Modellparameter können Verfahren der nichtlinearen Regression angewendet werden. In diesem Kontext ist die Erfassung der Unsicherheit der Modellparameter nur durch vereinfachende statistische

Annahmen (Linearität des Modells bzgl. der Parameter, Normalverteilung der Parameter) möglich, die jedoch für nichtlineare Modelle zu fehlerhaften Ergebnissen führen.

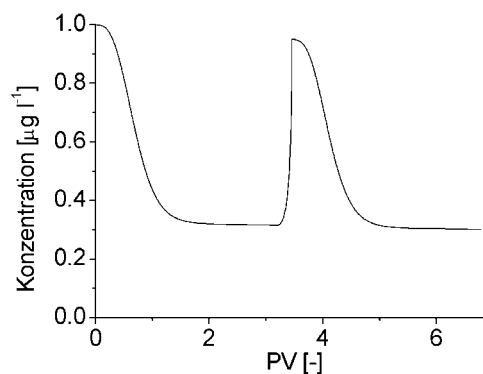


Abb. 1: Konzentrationsverlauf im Ausfluss einer Laborsäule

Als Alternative hierzu bieten sich MCMC-Verfahren an, welche die statistische Verteilung der Modellparameter exakt abzubilden in der Lage sind. Ein MCMC-Algorithmus generiert eine Sequenz von Modellparametern, die eine Stichprobe aus der statistischen Verteilung der Parameter darstellen. Die Konvergenz des Algorithmus kann durch Simulation paralleler Sequenzen und Untersuchung des Mischungsverhaltens (Gelman und Rubin, 1992; Vrugt und Bouten, 2002) festgestellt werden. Die Untersuchung wurde mit synthetischen Daten mit einem normalverteilten Messfehler von 5% durchgeführt. Es wurde angenommen, dass für eine analytische Bestimmung der Schadstoffe ein Beprobungsvolumen von 300ml notwendig ist. Auf diese Weise ergaben sich 16 flussgemittelte Konzentrationen am unteren Rand.

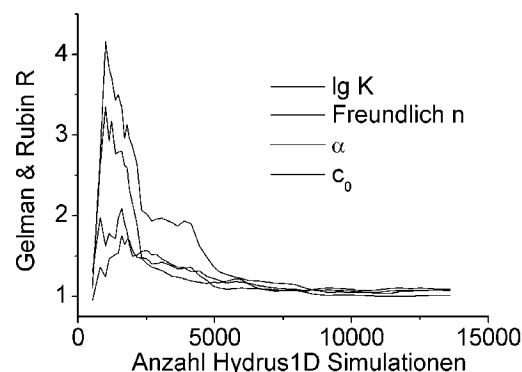


Abb.2: Konvergenz des MCMC-Algorithmus. Der Faktor R gibt die erwartete Reduktion der Varianz der generierten Parameter an. Konvergenz kann für Werte kleiner 1.2 angenommen werden.

¹ Institut für Geoökologie, TU Braunschweig, e-mail: s.iden@tu-bs.de

² Lehrstuhl für Hydrologie, Universität Bayreuth

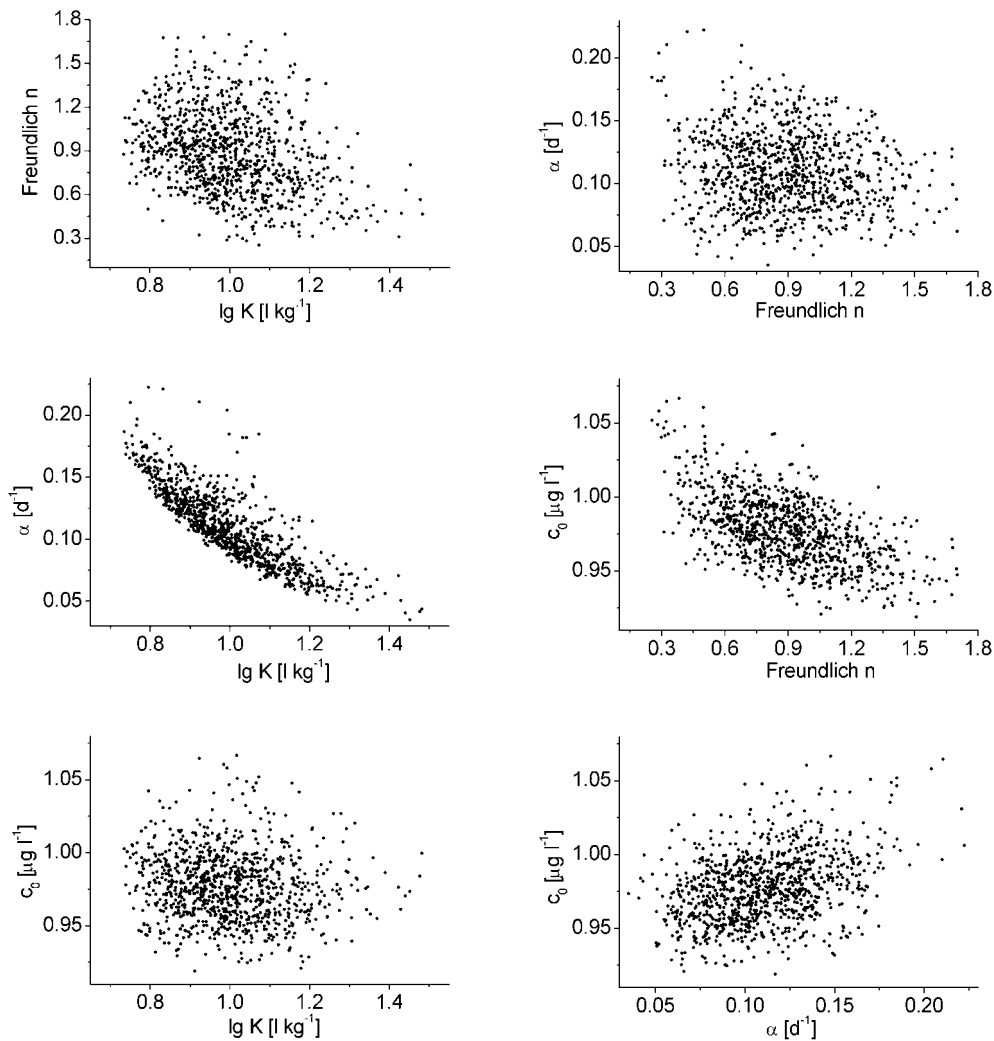


Abb. 3: Zweidimensionale Projektionen der vierdimensionalen Verteilung der Modellparameter. Die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Parameterkombination kommt über die Punktdichte zum Ausdruck.

Ergebnisse und Diskussion

Zweidimensionale Projektionen der Verteilung der Modellparameter sind in Abb. 3 dargestellt. Die Korrelation der Modellparameter ist i.a. gering, lediglich der Verteilungskoeffizient der Freundlich-Isotherme und der Ratenparameter sind deutlich negativ korreliert. Tabelle 1 zeigt die Erwartungswerte und Variationskoeffizienten der Modellparameter. Offensichtlich können die Krümmungseigenschaften der Sorptionsisotherme nur mit mäßiger Genauigkeit bestimmt werden, ähnliches gilt für den Ratenparameter α .

	Wert	EW	CV
$\lg K [l \text{ kg}^{-1}]$	1.0	1.00	13%
Freundlich n	0.7	0.89	39%
$\alpha [d^{-1}]$	0.1	0.11	30%
$c_0 [\mu\text{g l}^{-1}]$	1.0	0.98	2%

Tab. 1: Wahre Werte, Erwartungswerte und Variationskoeffizienten der Modellparameter.

Schlussfolgerungen und Ausblick

Die Durchführung von MCMC-Simulationen ist für Säulenversuche mit vertretbarem Aufwand durchführbar und verschafft wichtige Einblicke in die Interaktion und Unsicherheit von über inverse Simulation ermittelten Modellparametern. Die generierten Parametersätze können direkt für die Berechnung von Vorhersageunsicherheiten herangezogen werden. Die Notwendigkeit des Einsatzes ergibt sich in Abhängigkeit von der Nichtlinearität der Modellstruktur. Im Rahmen der Sickerwasserprognose wäre für die Zukunft eine umfassende Analyse der Validität von Linearisierungsansätzen in Abhängigkeit vom gewählten Modellszenario (Modellstruktur, Randbedingungen, Parameterwerte, Fehlerverteilungen) denkbar und wünschenswert.

Literatur

- Gelman und Rubin (1992). *Statistical Science* 7: 457-511.
 Vrugt und Bouten (2002). *Soil Sci. Soc. Am. J.* 66: 1740-1751