

Sicherheitsforschung für Hydrosysteme

Wie sichern wir uns ausreichend sauberes Trinkwasser?



01

Trinkwasserschutz und andere Landnutzungsarten (Landwirtschaft, Verkehr, Industrie, etc.) konkurrieren oft miteinander.

Im Schnitt verbraucht jeder Bundesbürger ca. 122 Liter Leitungswasser pro Tag. 80 Prozent davon werden aus Grundwasser gewonnen. Mit zunehmender Industrialisierung, zunehmendem Verkehr und immer mehr neuen Pestiziden, Medikamentenrückständen sowie Alltagschemikalien stellt sich die Frage nach der Sauberkeit und Sicherheit unserer Trinkwasserversorgung. Vor diesem Hintergrund stellte die WHO (World Health Organization) im Jahre 2004 weltweit erhebliche Gesundheitsrisiken auf Grund mangelhafter Wasserqualität fest – sowohl in Entwicklungs- als auch in Industrieländern. Sie empfiehlt daher, gesetzlich bindende Sicherheitskonzepte für Trinkwasser in nationale Gesetzgebungen aufzunehmen. Konkret bedeutet dies zum Beispiel, dass Wasserversorger alle Gefahren im Schutzgebiet kennen, diese beherrschen und kontrollieren müssen. Am 28. Juli 2010 verabschiedete die Generalversammlung der Vereinten Nationen sogar eine neue Resolution, in welcher sie sicheres und sauberes Trinkwasser zum Menschenrecht proklamiert: Der Zugang zu sauberem Wasser sei „für den umfassenden Genuss des Lebens und aller anderen Menschenrechte zwingend notwendig“.

Im Schnitt verbraucht jeder Bundesbürger ca. 122 Liter Leitungswasser pro Tag. 80 Prozent davon werden aus Grundwasser gewonnen. Mit zunehmender Industrialisierung, zunehmendem Verkehr und immer mehr neuen Pestiziden, Medikamentenrückständen sowie Alltagschemikalien stellt sich die Frage nach der Sauberkeit und Sicherheit unserer Trinkwasserversorgung. Vor diesem Hintergrund stellte die WHO (World Health Organization) im Jahre 2004 weltweit erhebliche Gesundheitsrisiken auf Grund mangelhafter Wasserqualität fest – sowohl in Entwicklungs- als auch in Industrieländern. Sie empfiehlt daher, gesetzlich bindende Sicherheitskonzepte für Trinkwasser in nationale Gesetzgebungen aufzunehmen. Konkret bedeutet dies zum Beispiel, dass Wasserversorger alle Gefahren im Schutzgebiet kennen, diese beherrschen und kontrollieren müssen. Am 28. Juli 2010 verabschiedete die Generalversammlung der Vereinten Nationen sogar eine neue Resolution, in welcher sie sicheres und sauberes Trinkwasser zum Menschenrecht proklamiert: Der Zugang zu sauberem Wasser sei „für den umfassenden Genuss des Lebens und aller anderen Menschenrechte zwingend notwendig“.

1. Einleitung

Diese Situation ist in (02) am Beispiel Baden-Württembergs veranschaulicht. Mit allein 2.124 Altlasten und 14.472 altlastenverdächtigen Flächen gleicht die Karte eher einer Kraterlandschaft als einer idyllisch anmutenden Naturlandschaft. Dabei sind diffuse Quellen aus der Landwirtschaft oder permanente Gefahrenpotentiale wie Gefahrguttransporte in dieser Karte noch nicht enthalten.

Nicht nur bei der Wasserversorgung, sondern in vielen Bereichen wird unsere Gesellschaft in Zukunft zunehmend auf Simulationssysteme zurückgreifen müssen. Sie tut dies im Bestreben, ihre Einflüsse auf die Umwelt besser vorherzusagen und sie, darauf aufbauend, so gering wie möglich zu halten. Im Vordergrund stehen dabei das Vorsorgeprinzip und stärkere Nachhaltigkeitsbegriffe, die mehr als je zuvor Extremereignisse und Vorhersageunsicherheiten in der Umwelt berücksichtigen. Umweltsysteme sind jedoch ein komplexes und dynamisches Zusammenspiel zwischen vielen physikalischen, chemischen und biologischen Prozessen und menschlichen Eingriffen. Materialeigenschaften von Umweltsystemen ändern sich von Punkt zu Punkt. Umweltdaten sind, besonders im Untergrund, schwer zugänglich und teuer zu erheben. Daher sind Umweltsimulationen unsicher und nur mit besonderer Vorsicht in transparenten und abgesicherten Entscheidungsverfahren verwendbar.

Die treibende Vision der Jungwissenschaftlergruppe „stochastische Modellierung von Hydrosystemen“ an der Universität Stuttgart ist, die Kluft zu überbrücken zwischen schwer quantifizierbaren Unsicherheiten einerseits und andererseits den Bedürfnissen nach robuster Optimierung und Regelung, für ein aktives Risikomanagement und zur Unterstützung von Entscheidungsfindungen unter Unsicherheit. Mit ihrer Forschung arbeitet sie darauf hin, Risiken bestehender oder geplanter anthropogener Einwirkungen auf die Umwelt probabilistisch abgesichert zu quantifizieren. Dies ermöglicht neue, rationale Strategien zum Umgang mit Risiken und zur Entscheidungsfindung. Dabei spielen entscheidungstheoretische Ansätze eine grundlegende Rolle, ebenso wie der offene Umgang mit Modellunsicherheiten, und die Bewältigung von enormen

SUMMARY

In 2010, the UN declared supply with clean and safe drinking water to be a new human right. The World Health organization (WHO) finds that poor water quality continues to pose severe risks for human health, both in developing and industrialized countries. They recommend including drinking water safety plans into national legislation. Adequate safety concepts have to unite many competing aspects, including economical demands and competing land use versus sustainable management, robustness against climatic and societal change and active risk management.

The independent young research group „stochastic modelling of hydrosystems“ at the Institute for Modelling Hydraulic and Environmental Systems advances tools to simulate terrestrial hydrosystems, with a specific focus on the uncertainty of model predictions. They develop methods for optimal monitoring, for optimization, robust design and control under uncertainty and for risk assessment, along with decision-theoretical approaches to achieve optimal risk management. Research activities range from fundamental, method-oriented research up to applied projects, collaborating with local water suppliers. The most outstanding feature is to consider all possible sources of uncertainty, from unknown pattern types within soils, uncertain geological boundaries, uncertain model forcing and measurement errors, up to model-structural uncertainties due to ambiguous conceptualization of natural processes. Model reduction techniques help to keep the resulting computational costs at acceptable levels.

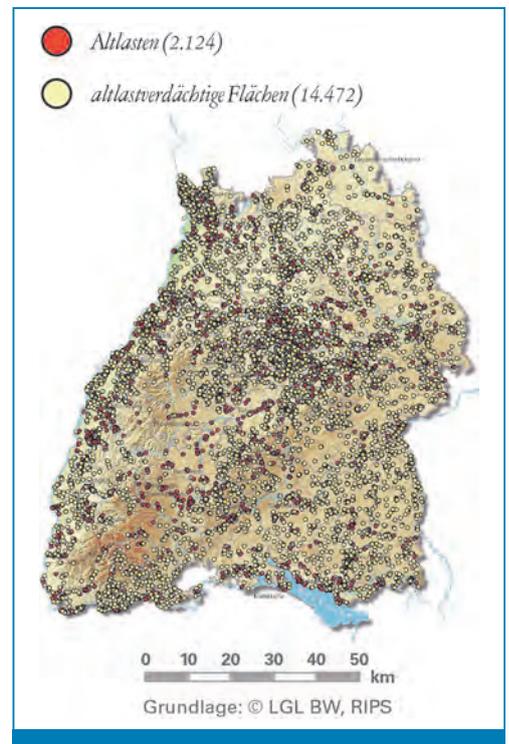
In total, their research output aims at predicting the environment within reliable error bounds, and transparent handling of uncertainty in all subsequent application tasks, ranging from simple optimization and control up to active risk management strategies.

Rechenzeiten, wenn Unsicherheitsbetrachtungen auf Optimierungsaufgaben stoßen.

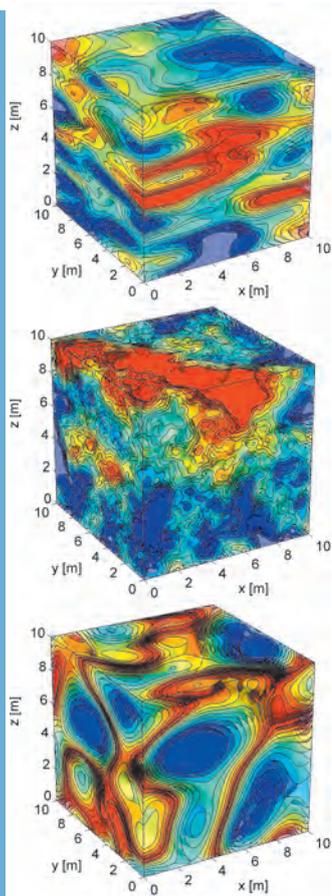
2. Belastbare Ergebnisse trotz unsicherer Modelle

Da Modelle die Realität eines Umweltsystems nur unvollständig abbilden können, müssen die Unsicherheiten ihrer Vorhersagen offen zugegeben, beziffert und in Folge berücksichtigt werden. Unsicherheiten werden vor allem durch vereinfachte konzeptionelle Modellvorstellungen, durch numerische Approximationen, durch Unkenntnis über die geologischen Schichtungen und Fließwege, und nicht zuletzt durch räumliche Variabilität mit unbekanntem Strukturmuster verursacht (03).

Daten, häufig aus aufwendigen und teuren Messverfahren stammend, sind ein hohes aber auch knappes Gut. Erstens hemmen die hohen Kosten hydrogeologischer Er-



Bekannte Altlasten und verdächtige Flächen in Baden-Württemberg, Stand 2010.



Die so genannte Bayes'sche Geostatistik vereint Unsicherheit in Strukturtypen mit Unsicherheit der tatsächlichen Anordnung von Werten im Raum. Die Abbildung zeigt entsprechende Zufallsfelder, welche die Unsicherheit in beiden Aspekten widerspiegeln.

kundungen die Größe verfügbarer Datensätze. Zweitens schränkt die natürliche Variation von Materialeigenschaften des Untergrundes die flächige Gültigkeit von typischerweise punkttartigen Messungen stark ein.

In unseren Forschungsprojekten berücksichtigen wir diese Modell- und Parameterunsicherheit explizit, und quantifizieren die entstehende Vorhersageunsicherheit. Dadurch erhalten involvierte Entscheidungsträger verlässlichere Informationen über ihr System und verfügen über rationale und reflektierte Entscheidungsgrundlagen bezüglich resultierender Risiken. Meist geschieht dies mit Hilfe der Monte-Carlo Simulationsmethode. In dieser Methode werden deterministische Modelle in einer Schleife wiederholt und mit variierenden Parameterwerten und Randbedingungen ausgeführt. In einfachen Worten ausgedrückt benötigt die Simulation vieler wahrscheinlicher Möglichkeiten auch vielfach wiederholte Simulation. Diese Vorgehensweise ermöglicht, sowohl Modellunsicherheit als auch die räumliche Variabilität von Materialeigenschaften zu berücksichtigen.

Als Beispiel zur Verdeutlichung soll hier die modellbasierte Ausweisung von Wasserschutzgebieten dienen. Wasserversorger weisen solche Schutzgebiete um Ihre Brunnenanlagen herum aus, typischerweise mehrere Quadratkilometer groß, um eine sichere Versorgung der Bevölkerung zu gewährleisten. Die zurzeit wichtigste und gesetzlich vorgeschriebene Schutzgebietsgrenze ist die sogenannte 50-Tage-Linie, welche meistens modellbasiert ermittelt wird. (04) zeigt eine Wasserschutzgebietszone für ein beispielhaftes Brunneneinzugsgebiet eines deutschen Wasserversorgers. Schadstoffe, welche außerhalb dieser Zone in den Bodenkörper eindringen, benötigen nach dem Modell länger als 50 Tage Fließzeit, um zum Brunnen zu gelangen. Dahinter steht der Gedanke, dass viele Arten von Verschmutzungen innerhalb von 50 Tagen biologisch oder chemisch im Grundwasser abgebaut werden können.

Wegen der oben erwähnten unvermeidbaren Unsicherheit in Umweltsimulationen lässt sich die Lage der 50-Tage-Linie nicht mit Sicherheit ermitteln. Stattdessen verwenden wir Monte-Carlo Simulationen. Diese ergeben Bereiche, welche mit hoher Wahrscheinlichkeit Bestandteil einer Wasserschutzzone sein sollten, und andere Berei-

che, von denen nur unwahrscheinlich eine Gefährdung für das Trinkwasser ausgeht. In Abhängigkeit der Risikoakzeptanz des Versorgungsunternehmens können dann unterschiedliche Konfidenzbereiche ausgewiesen werden. (04) vergleicht die klassische 50-Tage-Schutzzone mit der benötigten Fläche, um mit nur 10-prozentigem Risiko zu verhindern, dass ein Schadstoff innerhalb von 50 Tagen am Brunnen ankommen kann (10 Prozent Isoperzentillinie, markiert mit „0.1“). Die existierende Zone 2 erfüllt im Erwartungswert und auf 50-Prozent-Level die gesetzlichen Anforderungen bei weitem. Unsere Simulationen zeigen jedoch, dass eine gleich große Fläche mit anderem Umriss das Restrisiko einer früheren Ankunft im Brunnen sogar unter zehn Prozent senken könnte.

Eine derartige Herangehensweise wird als probabilistische Risikoanalyse (PRA) bezeichnet. PRA hat zum Ziel, Sicherheitsansprüche zu validieren und schließbare Lücken zur weiteren Absicherung aufzuzeigen. Der gesamte Entscheidungsprozess wird durch die Unsicherheitsbetrachtung transparenter und liefert somit wertvolle Informationen, welche eine risikobasierte Entscheidung unterstützen.

3. Modellkalibrierung mit unzulänglichen Daten

Die Unsicherheit von Simulationsmodellen lässt sich im Allgemeinen durch Kalibrierung auf beobachtete Daten des realen Systems verringern. In (05) ist beispielhaft dargestellt, wie punktuelle Messungen die Variabilität von Parameterfeldern (z.B. der Durchlässigkeit des Bodens für die Grundwasserströmung) einschnüren können, und somit die Unsicherheit eines darauf aufsetzenden Modells verringern. An den jeweiligen Stellen einer Messung sind die Parameter bis auf einen unvermeidbaren Messfehler bekannt. Je weiter jedoch ein Parameterwert von einer Messstelle entfernt ist, desto größer wird sein mögliches Wertespektrum. Dies ist durch die starke räumliche Variabilität vieler physikalischer Eigenschaften aus geologischen Entstehungsprozessen bedingt.

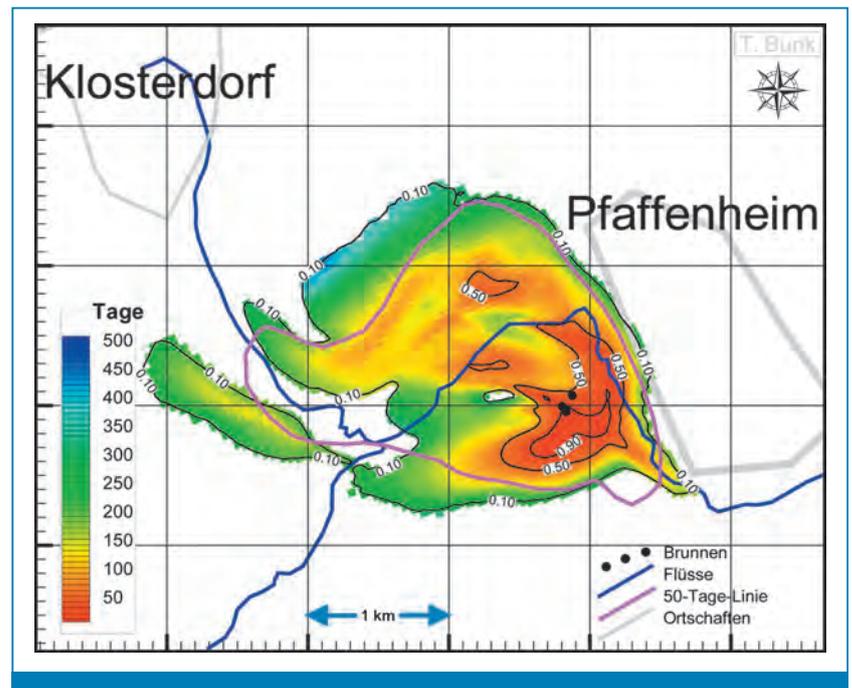
In der stochastischen Simulation bedeutet dies, dass aus wenigen Messwerten viele und vergleichsweise große Parameterfelder generiert werden müssen. Direkte Kenntnis von Parameterwerten an einzelnen Punkten wird mit Hilfe geostatistischer

Interpolationsverfahren (zum Beispiel Kriging) berücksichtigt. Weil zwischen den bekannten Punkten keine eindeutige Lösung existiert, werden viele Möglichkeiten zufällig generiert und an Simulationsmodelle weitergeleitet. Ist die Zahl der Messpunkte groß genug, können zusätzlich Annahmen über die Grundstruktur des Parameterfeldes abgeleitet werden – vergleiche (03). Insgesamt kann somit das riesige Spektrum der möglichen Parameterfelder eingeschränkt werden.

Um diesen Raum der Möglichkeiten weiter einzuschränken, werden auch indirekte Daten verwendet, also beobachtete Reaktionen des Umweltsystems, mit denen Simulationen übereinstimmen sollen. Dies erfordert, in einfachen Worten ausgedrückt, eine stochastische Variante von Modellkalibrierung. Stochastische Kalibrierung ist eine aufwändige, nicht-lineare und hochdimensionale Optimierungsaufgabe, die zwangsweise auf das gesamte Spektrum möglicher Parameterfelder angewandt werden muss. Dies erzeugt einen erheblichen Mehraufwand an Rechenzeiten im Vergleich zu herkömmlichen (deterministisch denkenden) Kalibrierungsvorgängen.

Die intelligente Verflechtung von Kalibrierung mit stochastischer Simulation ist eine Kernherausforderung in unserer Arbeitsgruppe. Wir arbeiten an stochastisch-inversen Methoden zur Modellkalibrierung, welche Heterogenität, unklare Vorstellungen von räumlichen Strukturtypen, Mess- sowie Modellfehler berücksichtigen. Bayes'sche Statistik und Bayes'sche Geostatistik – vergleiche (03) – sind Grundregeln für die Unsicherheitsanalyse, Datenverwendung und Verschmelzung unsicherer Informationen. Diese Verfahren stehen bei uns stark im Vordergrund. Weitere sehr oft nützliche Werkzeuge sind adjungierte Sensitivitätsanalysen. Sie invertieren alle Kausalitäten und die Richtung der Zeitachse in Simulationsmodellen. Dieser konzeptionell sehr abstrakt anmutende Schritt ermöglicht, in beeindruckender Geschwindigkeit die Sensitivität von entscheidenden Modellvorhersagen bezüglich beliebig großer Parameterzahlen, oft mehrerer Millionen Parameter, zu bestimmen.

Ein eindruckliches Beispiel hierfür liefert ein aktuelles Projekt, in dem wir die Architektur von Schadensherden im Untergrund untersuchen. Viele gefährliche Schadstoffe lösen sich extrem langsam im Grundwas-

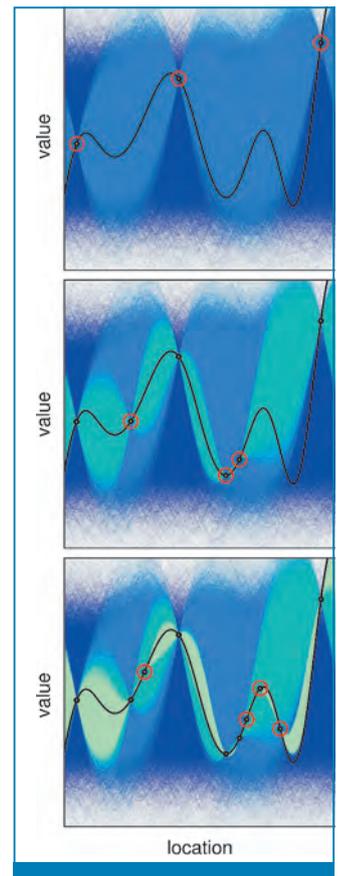


Ausgewiesene 50-Tage-Linie („Zone 2“) und modellbasierte Isoperzentilen (0,1; 0,5; 0,9) der 50-Tage-Linie für ein Brunnenschutzgebiet. Der farbige Hintergrund zeigt den Erwartungswert der Ankunftszeit.

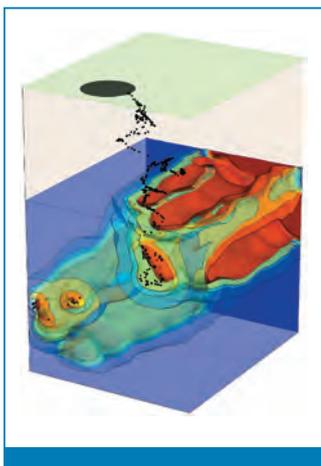
ser und bleiben über Jahre im Boden verankert. Sie stellen daher ein immerwährendes Risiko für die Umwelt und unsere Trinkwasserversorgung dar. Um diese Risiken bestimmen zu können und den Sanierungsbedarf verschiedener Altlasten zu priorisieren, muss die Lösung des Schadstoffes ins Grundwasser und die anschließende Ausbreitung des kontaminierten Grundwassers simuliert werden.

Wie viel Schadstoff das Grundwasser abtransportiert (Massenfluss des Schadstoffes) und wie lange der Schadensherd ein Reservoir für anhaltende Kontamination bleibt, hängt stark von der Form des Schadstoffherdes im Untergrund ab. Eine breite Klasse an Schadstoffen ist prinzipiell nicht mit Wasser mischbar und befindet sich daher als getrennte Flüssigkeitsphase mit abstrakten und bizarren Umrissen im Boden (06). Der Lösungsvorgang ins Grundwasser hängt dabei von der spezifischen Oberfläche des bizarren Umrisses ab, also von der Kontaktfläche des Schadstoffes zum Grundwasser.

Die Heterogenität des Untergrundes spielt sowohl in der Ausprägung dieser bizarren Formen und in der Anströmung des Schadensherdes, als auch für den Abtransport und die relevanten Verdünnungs- und Abbauprozesse weiter unterstrom eine entscheidende Rolle. Um dennoch verläss-

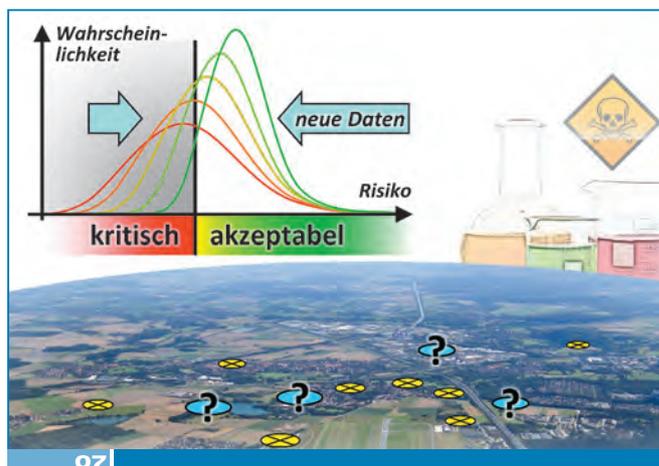


Punktuale Messwerte in heterogenen Systemen schränken die Unsicherheit nur in einem begrenzten Radius ein. Dazwischen besteht eine unendliche Anzahl von möglichen Verläufen. Nur mit unrealistisch vielen, eng gesetzten Messungen würde die Unsicherheit global eliminiert.



06

Bizarrer Umriss einer nicht wasserlöslichen Bodenverseuchung (angedeutet durch schwarze Punktwolke) und resultierende Belastung des durchfließenden Grundwassers (dargestellt durch farbige Isoflächen der Schadstoffkonzentration im Wasser). Heterogenität des Bodens (hier nicht dargestellt) wirkt sich signifikant auf den Lösungsvorgang und auf Verdünnungsprozesse im durchströmenden Grundwasser aus.



07

liche Aussagen treffen zu können, müssen Bayes'sche Geostatistik, inverse Modellierung und adjungierte Zustände kombiniert werden. Dies ermöglicht uns, Vorhersageunsicherheit, unbekannte bizarre Form des Schadensherdes, Heterogenität des Bodens bei unbekanntem Strukturtyp, diverse Messdaten sowie physikalische Prozessbeschreibungen zu einer belastbaren Risikoaussage zu verschmelzen. Bei diesem Vorgang lernen wir auch mehr über den Umriss des Schadensherdes, über resultierende Massenflüsse und über Verweilzeiten des Schadensherdes.

4. Optimales Monitoring: Viel Information für wenig Geld

Wie in Abschnitt 3 beschrieben, verringern Messdaten und geeignete Kalibriermethoden die Vorhersageunsicherheit von Modellen. Oft ist die verbleibende Unsicherheit jedoch noch zu groß für verlässliche Aussagen. Dann müssen zusätzliche Daten erhoben werden. Daten im Untergrund zu erheben ist jedoch extrem kostspielig. Somit liegt es auf der Hand, Erkundungen auf größtmöglichen Nutzen hin zu optimieren. Eine optimale Messkampagne (Art des Experiments, Datentyp, Beprobungsmuster und Zeitintervalle) verspricht bei gleichem Budget den höchsten Nutzen, also die geringste Modellunsicherheit oder die beste Entscheidungsgrundlage – siehe (07). Bei Bohrkosten von über tausend Euro pro Meter in festem Gestein wird der Nutzen optimierter Designs schnell offensichtlich, selbst wenn sie nur eine einzige Bohrstelle einsparen. Die erhebliche Rechenleistung, welche für die Optimierung notwendig ist, wird dagegen immer günstiger: dank „Cloud

Daten aus Messnetzen verringern Modellunsicherheiten und erlauben somit präzisere Abschätzungen von Risiken und verlässlichere Entscheidungen. Um Restrisiken noch besser abschätzen zu können, werden bestehende Messnetze optimal um wenige weitere Punkte ergänzt. So werden die Kosten von Messkampagnen möglichst gering gehalten.

Computing“ können auch kleine Dienstleistungsunternehmen größere Rechenleistung für wenige Cent pro Stunde anmieten.

Der reale Nutzen einer Messkampagne ist vom Ergebnis der Messkampagne selbst abhängig, also von Messwerten, die während der Planungsphase noch unbekannt sind. Daher muss man sich einer aufwändigen Prozess- und Modellanalyse bedienen, um den erwarteten Nutzen von Daten zu bestimmen. Dabei mittelt man für ein vorgeschlagenes Design die Nutzwerte aus allen möglichen Messwerten, die man mit Hilfe eines geeigneten Modells und statistischer Konzepte hypothetisch generieren kann.

Danach schließt sich ein klassisches Optimierungsproblem an, um diejenige Messkampagne mit dem maximalen erwarteten Nutzwert zu finden. Dabei treten zwei Probleme auf. Zum einen ist bei großen Systemen, wie z.B. bei kompletten Wasserschutzgebieten, eine nahezu unendliche Anzahl von möglichen Beprobungsstrategien denkbar. Daher muss ihre Anzahl möglichst intelligent begrenzt und dann geschickt durchsucht werden. Zum anderen ist die Berechnung des Nutzwertes für komplexe Systeme extrem aufwändig, da der Nutzwert selbst eines einzelnen Designs wiederholt für verschiedene mögliche Messergebnisse ausgewertet werden muss. Insgesamt werden während der Optimierung Nutzwerte millionenfach berechnet. Schnelle Implementierungen oder effiziente, schnelle Schätzungen werden extrem wichtig.

Aus diesen Gründen befasst sich ein Projekt der Arbeitsgruppe mit der effizienten Auswertung und Implementierung für Nutzwerte von Designs. Mit Hilfe der Informa-

tionstheorie, welche sonst hauptsächlich in der Elektrotechnik oder Informatik Anwendung findet, kann der Informationsgehalt von Messungen auf verschiedene Weisen abgeschätzt werden. Wir verwenden die sogenannte Transinformation, um den erwarteten Informationsgehalt zu berechnen. Eine bestimmte Symmetrieeigenschaft und Umkehrbarkeit der Transinformation ermöglicht drastische Beschleunigungen: Anstatt die Auswirkungen hypothetischen Wissens seitens möglicher Messergebnisse zu evaluieren, wird hypothetisches Wissen bezüglich der Modellvorhersage angenommen. Anschließend wird ausgewertet, wie viel neues Wissen dies über mögliche und noch unbekannte Daten erzielt. Diejenigen Messdaten, die bei hypothetisch bekanntem Simulationsergebnis nur noch am wenigsten Überraschungen bieten können, werden im Umkehrschluss auch für die Kalibrierung des Simulationsmodells die aussagekräftigsten sein. Der Berechnungsaufwand verringert sich bei dieser Umkehr drastisch. Zukünftig bietet sich damit die Gelegenheit, Messkampagnen für größere und komplexere Systeme zu optimieren.

5. Wirtschaftliches und robustes Risikomanagement

Als Risikomanagement bezeichnet man allgemein den Gesamtprozess, wie auf ein Risiko eingegangen wird. Dabei bedient man sich des PDCA-Zyklus (Plan, Do, Check, Act), in welchem zu Beginn das zu schützende Objekt bzw. Schutzziel definiert wird. Neben der Gefahrenidentifikation, der Risikoabschätzung sowie der Risikobeurteilung und -bewältigung besteht ein kontinuierlicher Beobachtungs- und Kommunikationsprozess, welcher gewährleistet, dass die definierten Sicherheitsziele eingehalten werden.

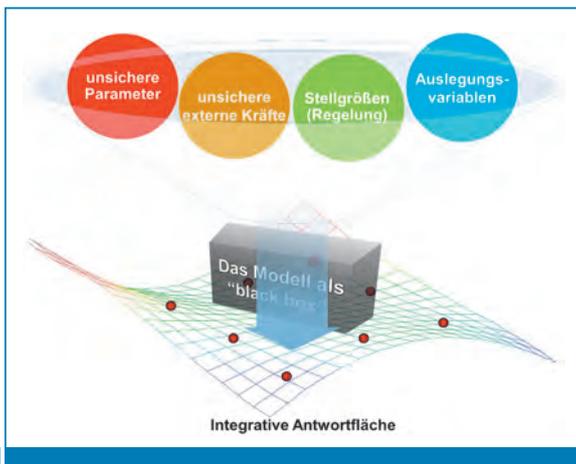
Von einem robusten Risikomanagement sprechen wir, wenn wir für ein Modell und seine Datengrundlage die entsprechenden Modell-, Parameter- und Datenunsicherheiten berücksichtigen. Durch das Eingeständnis von Unsicherheiten werden die von Simulationsergebnissen abgeleiteten Maßnahmen zur Risikoverringerung gegenüber falschen Vorstellungen über Wirkungsgefüge und Eigenschaften des gefährdeten Systems abgesichert. Generell werden dabei die Modellparameter

in zwei Klassen unterteilt. Zum einen sind dies Steuerungsvariablen, die vom Systembetreiber im Rahmen des Risikomanagements selbst gewählt werden können. Zum anderen sind dies unsichere Parameter, welche unser unvollständiges Wissen über die Systemeigenschaften widerspiegeln. Beide Parametergruppen beeinflussen letztlich das Systemverhalten und die Fehlerwahrscheinlichkeit, so dass der Entscheidungsprozess sowohl von den Steuerungsvariablen, der Systemunsicherheit und Fehlerwahrscheinlichkeit, dem gewünschten Sicherheitsniveau und dem erwarteten Nutzwert der möglichen Maßnahmen abhängt.

In einem Projekt der Arbeitsgruppe werden die Simulationsergebnisse, auf welchen Entscheidungsprozesse aufgebaut werden, in Abhängigkeit beider Parametergruppen zugleich ausgedrückt. Die nicht-lineare Änderung von Simulationen bei sich ändernden Werten in beiden Parametergruppen wird als Antwortfläche interpretiert und durch einen Satz geschickter gewählter Polynome angenähert – siehe (08). Die Antwortfläche ist ein elegant gewähltes Polynom aus beiden Parametergruppen, welches über die sogenannte polynomiale Chaos Expansion konstruiert wird. Nach anfänglichem Rechenaufwand zur Erstellung des Polynoms lassen sich beliebig schwierige Aufgaben in nur wenigen Sekunden erledigen. Dazu zählen Modellkalibrierung, Optimierung, Risikoanalyse, Optimierung von Monitoring-Strategien und vieles mehr. Insbesondere die simulationsbasierte Optimierung von Risikomanagement kann in nur geringer Rechenzeit gegen Unsicherheiten in der Systembeschreibung robust gestaltet werden.

Eine eindruckliche Illustration für dieses Konzept bietet sich für die Risikobeherrschung bei der Injektion und Speicherung von Kohlenstoffdioxid im Untergrund. Unter www.simtech.uni-stuttgart.de/forschung/visionen/iee.htm befindet sich ein interaktiver web-basierter Demonstrator zu diesem Thema, der im Rahmen des Exzellenzclusters Simulationstechnik der Universität Stuttgart erstellt wurde. Der Besucher kann hier in Echtzeit Simulationsparameter und Stellgrößen verändern, oder sich die resultierende Unsicherheit bei frei gelassenen Parameterwerten berechnen lassen.

In einem weiteren Projekt soll das Gesamt-



08

Ein intelligent zusammengesetztes Polynom trägt die gesamte Information eines komplexen Modells in kompakter Form als Antwortfläche. Sie beschreibt die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von unsicheren Parametern, Stellgrößen in der Regelungstechnik und Auslegungsvariablen für optimale Auslegungen.

risiko für die Versorgung mit sauberem Trinkwasser analysiert und kostenoptimal minimiert werden. Dafür entwickeln wir einen ganzheitlichen Simulationsansatz von der Gefahrenquelle im Wassereinzugsgebiet bis hin zum Wasserhahn in der Wohnung. Alle Unsicherheiten im Gesamtsystem werden

dadurch quantifiziert und priorisiert. So werden Risikolücken im Versorgungssystem aufgedeckt. Maßnahmen gegen Risiken auf hohem Sicherheitsniveau können teuer sein. Die zentrale Frage für jedes Wasserversorgungsunternehmen ist, welche Investitionsmaßnahme sich am besten eignet, um das Risiko zu steuern und zu minimieren. Zur Auswahl stehen alternative und teurere Wasserbezugsquellen

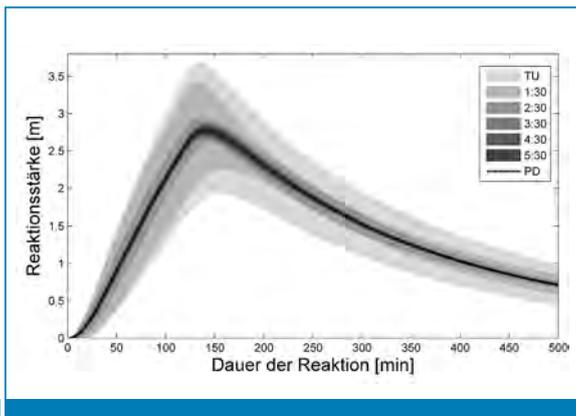
oder größere Wasserschutzgebiete, bessere Überwachungssysteme, genauere Vorhersagemodelle oder eine intensivere und vorsorgliche Wasseraufbereitung. Die Vor- und Nachteile der verschiedenen Handlungsoptionen können während der Planungsphase simulationsbasiert prognostiziert werden. Mit

Hilfe entscheidungstheoretischer Ansätze und der Nutzwerttheorie können Entscheidungsträger diese Alternativen miteinander vergleichen und optimal kombinieren. Daraus resultieren rationale, transparente und risikobewusste Entscheidungen, die bei gleichem Budget zu geringeren Gesamtrisiken führen.

kapazitäten durch technischen Fortschritt stellen die benötigten Rechenzeiten weiterhin eine immerwährende Herausforderung dar. Diese Entwicklung wird vor allem dadurch angefeuert, dass die aktuell von Wissenschaftlern untersuchten Probleme immer komplexere Zusammenhänge auf immer größeren Simulationsgebieten abdecken. Während es vor zehn Jahren noch oft akzeptabel schien, Systeme im Stillstand anzunähern, sind heute dynamische Simulationen gefragt. Besonders die Berücksichtigung von Unsicherheiten führt zu einer weiteren Explosion von Rechenzeiten. Die weitaus größten Rechenzeiten entstehen, wenn Unsicherheit auf Modellkalibrierung, Risikoanalyse oder Optimierungsaufgaben stößt.

Der einzige Ausweg ist dann oft die so genannte Modellreduktion, seit jeher ein Schwerpunkt vieler Forschungsbemühungen weltweit. Modellreduktion reduziert Rechenzeiten oder kann bei gleichbleibendem Rechenaufwand mehr Komplexität oder akkuratere raum/zeitliche Auflösungen größerer Modellgebiete erlauben. Allen Reduktionsmethoden ist gemein, dass sie das Verhalten eines Modells in irgendeiner Hinsicht mathematisch mit geschickten Ansätzen abstrahieren. Man wählt dabei eine Abstraktion, welche Besonderheiten des Systems erkennt und diese möglichst akkurat und effizient abbildet. Manche Reduktionsmethoden verändern das Vorhersagemodell grundlegend. Statt der ursprünglichen Phänomene werden abstrahierte Ersatzwerte berechnet, die anschließend in die gewünschte Vorhersage umgewandelt werden müssen. So erhält man so genannte Modellsurrogate, also vereinfachte Ersatzmodelle für die ursprünglich zu aufwendigen Simulationen, ohne allzu großen Verlust von Genauigkeit. Mit dem Surrogat kann man anschließend Modellvorhersagen generieren, Systeme optimieren, Statistiken durch wiederholte Auswertung berechnen, oder Risiken auswerten.

Beispielsweise wird in einem aktuellen Forschungsprojekt die zeitliche Dynamik des Schadstofftransportes im Grundwasser durch sogenannte zeitliche Charakteristiken abstrahiert. Dies ermöglicht, über 95 Prozent der gewünschten Informationen in weniger als fünf Prozent der Rechenzeit zu erhalten – siehe (09). Ähnliche Ansätze sind aus der Statistik bekannt, wo Mit-



09

Simulation einer Systemreaktion (hier: Grundwasserleiter reagiert auf einen Druckstoß) mittels reduzierter Modelle. Gestrichelte Linie (PD): präzise Dynamik; Grau schattierte Flächen: Reduktionsfehler bei gegebener Zeiterparnis (x:y). Die größte Fläche (TU) illustriert den Fehler bei totaler Unkenntnis des Modells.

6. Die immerwährende Herausforderung: Rechenzeiten

Die Umweltforschung erfährt in den letzten Jahren einen drastischen Anstieg beim Rechenbedarf für Simulationsmodelle. Trotz der Vervielfachung von Rechen-

telwerte, Standardabweichungen, Schiefe und Wölbung verwendet werden, um Verteilungsfunktionen zu beschreiben. Ist das tatsächliche dynamische Systemverhalten gefragt, müssen die gewünschten Zeitkurven aus den Charakteristiken rekonstruiert werden, wofür sich Ansätze wie minimale relative Entropie anbieten. Eine parallele Anstrengung in dieser Forschungsrichtung ist die oben erläuterte polynomiale Chaos-Expansion.

Es ist offensichtlich, dass jede Modellreduktion als Kehrseite der Medaille auch Fehler mit sich bringt. Daher wird bei der Modellreduktion immer auch der Reduktionsfehler quantifiziert. Eine weitere aktuelle Anstrengung zielt darauf ab, zwischen verschiedenen Abstraktionsgraden bei Kombination mehrerer Reduktionstechniken einen derartigen Kompromiss zu finden, dass insgesamt ein Optimum zwischen Genauigkeit und Rechenzeit erreicht wird.

7. Fazit und Ausblick

Die zu Beginn erwähnte Vision für unsere Forschung, mit stochastischen Simulationen transparentes, probabilistisches Risikomanagement und komplexe Optimierungen für Umweltsysteme trotz Unsicherheit durchzuführen, galt weltweit bis vor kurzem als reine Wunschvorstellung. Die Forschungsergebnisse der Jungwissenschaftlergruppe und ihrer Kooperationspartner weltweit leisten jedoch auf dem Weg dorthin bereits einen erheblichen Beitrag.

Dank des grundlagenorientierten Charakters der Forschungsaktivitäten sind die resultierenden Methoden nicht nur für Umweltsysteme, sondern auch auf völlig unterschiedliche technische Systeme anwendbar. So lässt sich zum Beispiel das geringe Risiko, dass Lithium-Akkumulatoren in Elektroautos bei mechanischer Zerstörung Feuer auslösen, mit exakt den gleichen Methoden quantifizieren, regeln und weiter minimieren.

Voraussichtlich wird es in absehbarer Zukunft möglich sein, sogar so komplexe Systeme wie die Umwelt wesentlich umfassender zu beschreiben, und dabei verlässliche Unsicherheitsschranken angeben zu können. Diese ermöglichen den Einsatz von nachvollziehbaren, rationalen Strategien für das Risikomanagement und für die Optimierung komplexer dynamischer

ZUSAMMENFASSUNG

Laut einer UN-Resolution aus dem Jahr 2010 ist der sichere Zugang zu sauberem Trinkwasser ein neues Menschenrecht. Die WHO stellt jedoch nach wie vor weltweit erhebliche Gesundheitsrisiken durch mangelhafte Wasserqualität fest und empfiehlt gesetzlich bindende Sicherheitskonzepte für Trinkwasser. Angebrachte Sicherheitskonzepte müssen viele teils konkurrierende Aspekte vereinen. Dazu zählen neben wirtschaftlichen Interessen und konkurrierenden Landnutzungsarten die nachhaltige Bewirtschaftung und Robustheit gegenüber klimatischem und gesellschaftlichem Wandel. Die Jungforschergruppe "Stochastische Modellierung von Hydrosystemen" am Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung der Universität Stuttgart entwickelt Werkzeuge zur Simulation von terrestrischen Hydrosystemen mit besonderem Augenmerk auf der Unsicherheit von Modellvorhersagen. Darauf aufbauend entwickelt sie Methoden für optimales Monitoring, Optimierung unter Unsicherheit und für Risikoanalysen, sowie entscheidungstheoretische Ansätze für optimales Risikomanagement.

Systeme unter Unsicherheit. So helfen sie der zukünftigen Gesellschaft, ihre Umweltauswirkungen besser vorhersagen und minimieren zu können. Dadurch können die von der WHO geforderten Sicherheitskonzepte für Trinkwasser, zumindest seitens der Wissenschaft und Simulationstechnik, erfüllt und sogar übertroffen werden.

Wolfgang Nowak,
Rainer Enzenhöfer,
Andreas Geiges,
Jonas Koch,
Philipp Leube,
Sergey Oladyshkin

Literatur

- P. Leube, A. Geiges, and W. Nowak. Bayesian assessment of the expected data impact on prediction confidence in optimal sampling design. *Water Resour. Res.*, 2011 (submitted).
- R. Enzenhöfer, W. Nowak, and R. Helmig: Probabilistic exposure risk assessment with advective-dispersive well vulnerability criteria. *Adv. Water Res.*, doi:10.1016/j.adwatres.2011.04.018, 2011 (in press).
- S. Oladyshkin, H. Class, R. Helmig, and W. Nowak: An integrative approach to robust design and probabilistic risk assessment for CO₂ storage in geological formations. *Comput. Geosc.* 15(3), 565–577, doi:10.1007/s10596-011-9224-8, 2011.
- W. Nowak, F. P. J. de Barros and Y. Rubin. Bayesian Geostatistical Design: Task-driven optimal site investigation when the geostatistical model is uncertain. *Water Resour. Res.* 46(W03535), doi:10.1029/2009WR008312, 2010.
- M. Troldborg, W. Nowak, N. Tuxen, P. L. Bjerg, R. Helmig, and P. Binning. Uncertainty evaluation of mass discharge estimates from a contaminated site using a fully Bayesian framework. *Water Resour. Res.* 46(W12552), 2010.

DIE AUTOREN



1 JUN.-PROF. DR.-ING. WOLFGANG NOWAK, M.Sc.

studierte an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und Water Resources Engineering und Management und promovierte dort im Jahre 2004. Im Rahmen seines Studiums und seiner Promotion besuchte er ein Jahr die University of Waterloo (Kanada), vier Monate die Stanford University und zwei Jahre die University of California at Berkeley (beide USA). Seit 2008 leitet er als Juniorprofessor im Rahmen des Exzellenzclusters Simulation Technology die Jungforschergruppe „Stochastische Modellierung von Hydrosystemen“.

2 DIPL.-ING. RAINER ENZENHÖFER

studierte bis 2006 an der University of Waterloo (Kanada) und der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik. Es folgten an der Universität Stuttgart die Koordination des internationalen Doktorandenprogrammes Environment Water (EnWat) und die Leitung des wissenschaftlichen Sekretariates der DFG-Senatskommission für Wasserforschung bis Mitte 2011. Seit 2008 promoviert er in der Jungforschergruppe „Stochastische Modellierung von Hydrosystemen“ an der Quantifizierung und am Management von Risiken in Wasserversorgungssystemen.

3 DIPL.-ING. ANDREAS GEIGES

studierte an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und promoviert seit 2009 in der Jungforschergruppe „Stochastische Modellierung von Hydrosystemen“ über Effiziente Strategien für optimales Design von Messkampagnen und von Monitoring-Netzwerken.

4 DIPL.-ING. JONAS KOCH

studierte an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und promoviert dort seit 2010 in der Jungforschergruppe „Stochastische Modellierung von Hydrosystemen“ über die Architektur von Schadensherden im Untergrund.

5 DIPL.-ING. PHILIPP LEUBE

studierte an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und promoviert seit 2009 in der Jungforschergruppe „Stochastische Modellierung von Hydrosystemen“ über die zeitliche Reduktion von unsicheren Modellen.

6 DR.-ING. SERGEY OLADYSHKIN

schloss 2002 mit Auszeichnung sein Studium in Angewandter Mathematik an der technischen Staatsuniversität Nizhny Novgorod (Russland) ab. 2006 promovierte er am Institut National Polytechnique de Lorraine und arbeitete im Anschluss bis 2008 an der Französischen Akademie der Wissenschaften in Nancy (Frankreich). Seit 2009 arbeitet er als PostDoc am Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung der Universität Stuttgart im Rahmen des Exzellenzclusters „Simulationstechnik“.

Kontakt

Universität Stuttgart
 Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung
 Jungforschergruppe Stochastische Modellierung von Hydrosystemen
 Pfaffenwaldring 5a, 70569 Stuttgart
 Tel. 0711/685-60113
 Fax 0711/685-60430
 E-Mail: wolfgang.nowak@iws.uni-stuttgart.de
 Internet: <http://www.hydrosys.uni-stuttgart.de>