



Doctoral Thesis

Computationally efficient methods for the quantification of uncertainties in groundwater modelling

Author(s):

Kunstmann, Harald G.

Publication Date:

1998

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-002003209> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No 12772

Computationally Efficient Methods for the Quantification of Uncertainties in Groundwater Modeling

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZÜRICH
for the degree of
Doctor of Natural Sciences

presented by
HARALD G. KUNSTMANN
Diplom-Physiker, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Germany
born July 18, 1968
in Nürnberg (Germany)

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Wolfgang Kinzelbach, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, examiner
Prof. Dr. Dennis B. McLaughlin, Massachusetts Institute of Technology, co-examiner

Zürich, 1998

ZUSAMMENFASSUNG

Trotz der weiten Verbreitung, die die Grundwassermodellierung erfahren hat, wird die Aussagekraft von Modellen oft überschätzt. Die Sicherheit von Modellaussagen wird durch die mangelhafte Kenntnis der Aquiferstruktur, der Randbedingungen, der Aquiferparameter und der zukünftigen hydrologischen Eingangsgrößen eingeschränkt. Fehlende Aquiferparameter können zwar durch den Prozeß der Kalibrierung ergänzt werden, aber auch eine perfekte Kalibrierung kann die Unsicherheit nicht vollständig beseitigen, da das inverse Problem keine eindeutige Lösung haben muß. Doch auch aus unsicheren Modellen lassen sich sinnvolle Entscheidungen ableiten, solange es gelingt die Unsicherheiten zu quantifizieren.

In der vorliegenden Arbeit wird untersucht, wie sich die Unsicherheit von Aquiferparametern in die Unsicherheit von Piezometerhöhen und Tracer- oder Schadstoffkonzentrationen fortpflanzt. Die älteste Methode zur Beherrschung von Unsicherheiten besteht in der Betrachtung des ungünstigsten Falles (wie z.B. in der Intervallarithmetik). Konsekutive konservative Annahmen führen jedoch zu unrealistisch konservativen Entscheidungen und damit ineffizienter Ressourcennutzung. Eine bessere und häufig angewandte Methode ist die Monte Carlo Methode. Sie erfordert jedoch einen hohen Aufwand an Rechenzeit, der zudem nicht a-priori angegeben werden kann. Es werden deshalb alternative Algorithmen untersucht. Es wird gezeigt, daß die Gauß'sche Fehlerfortpflanzung und ihre Verallgemeinerung, die First Order Second Moment (FOSM) Methode, auf effiziente Algorithmen führen, die, im Rahmen ihres Gültigkeitsbereichs, die Monte Carlo Simulation ersetzen können.

Die FOSM Methode wird für die Lösung der Grundwasserströmungs- und Transportgleichung auf eine Weise formuliert, die ihre Anwendung auf reale Feldfälle gestattet. Die dafür benötigten Sensitivitätsmatrizen werden direkt berechnet und benötigen nicht die wiederholte Auswertung der Differentialgleichung selbst. Durch diese Technik werden zudem die Algorithmen zur Parameterschätzung beschleunigt. Die FOSM Methode wird für die Berechnung der Unsicherheit von stationären Piezometerhöhen und stationären Konzentrationsverteilungen verwendet. Zusätzlich wird sie dafür eingesetzt stochastische Brunneneinzugsgebiete zu berechnen. Die Ergebnisse werden mit entsprechenden Monte Carlo Simulationen verglichen. Die Konditionierung der berechneten Unsicherheiten durch Piezometerhöhen- oder Konzentrationsmessungen wird in die FOSM Methode integriert. Parameterunsicherheiten, die aus der Nichteindeutigkeit des inversen Problems resultieren, können damit quantifiziert werden. Das vorgestellte „Prinzip der gegenseitigen Unsicherheit“ quantifiziert den Zusammenhang der Unsicherheit von Transmissivität und Neubildungsrate, der durch die Modellkalibrierung entsteht. Die unkonditionierte FOSM Methode zeigt gegenüber der Monte Carlo Methode einen Rechenzeitvorteil von einem Faktor fünf bis zehn. Bei

Konditionierung liegt der Vorteil sogar bei einem Faktor 50 bis 100 gegenüber der üblichen inversen stochastischen Simulation mittels Monte Carlo Methoden. In ihrer vorliegenden Formulierung kann die FOSM Methode für moderate Unsicherheiten der Inputparameter verwendet werden und für Grundwassermodelle, deren Knotenzahl auf etliche tausend beschränkt ist.

Die FOSM Methode wird auf zwei Feldbeispiele angewendet: erstens, auf die Berechnung des stochastischen Einzugsgebiets zweier Trinkwasserbrunnen in Gambach (Deutschland), und zweitens auf die Quantifizierung der Unsicherheit der Grundwasserneubildung des Palla Road Aquifers im semi-ariden Botswana. In beiden Fällen ist die Quantifizierung der Unsicherheit von grundsätzlicher Bedeutung für die langfristige nachhaltige Nutzung des betreffenden Aquifers.

ABSTRACT

Results from groundwater flow and transport models are always uncertain. The sources of this uncertainty are manifold. They include parameter uncertainty, uncertainty in boundary conditions, even uncertainty in the conceptualization of the aquifer. Uncertainty is, however, not prohibitive for rational management based on models as long as it can be quantified.

Here the quantification of uncertainty in the model output arising from the imperfect knowledge of the input parameters is discussed. Numerous methods to cope with this type of uncertainty exist. A traditional one consists of choosing worst or best case scenarios. A better and more formal method of this analysis is the Monte Carlo method. However, it usually requires a huge computational effort, which cannot be quantified a priori. Computationally more efficient alternative approaches such as Interval Arithmetic, Gaussian Error Propagation and the First Order Second Moment technique (FOSM) are investigated. Interval Arithmetic is shown to fail when being applied to the partial differential equations used in groundwater modeling, whereas Gaussian Error Propagation and its generalization, the FOSM method, can successfully be applied to the direct calculation of uncertainty propagation.

The FOSM method is applied to both the groundwater flow and solute transport equations in a way suitable for application to field studies. The relevant sensitivity matrices are directly calculated and do not require the repeated evaluation of the equation; this computationally efficient technique is also used in parameter estimation algorithms. The FOSM method is used to compute the uncertainty of steady state heads or drawdowns and of steady state solute concentrations. It is also applied to the calculation of stochastic wellhead protection zones. Results are compared to straightforward Monte Carlo simulation. Conditioning by measured head and concentration data is incorporated in a natural fashion diminishing the uncertainty range of the results. Parameter uncertainties also arise from the non-uniqueness of the inverse problem. Yet, through calibration on the basis of measured heads, feasible transmissivities and recharge rates are related to each other. This "Principle of Interdependent Uncertainty" is incorporated in the method and quantified. The unconditioned FOSM method reveals a computational advantage of a factor of 5 to 10 against the Monte Carlo Method in terms of CPU time requirements. Conditioned FOSM shows an even larger advantage with a factor of 50 to 100 against the usual inverse stochastic modeling method based on Monte Carlo techniques. In its proposed formulation, the FOSM method can be used for cases of moderate input parameter uncertainties where the number of relevant nodes for model output uncertainty is limited to several thousands.

The method is illustrated by application to two field studies: first, in determining the stochastic wellhead protection zone pattern of a pumping well group in Gambach/Germany; secondly, to quantify the uncertainty range of the groundwater

recharge of the Palla Road aquifer in semi-arid Botswana. Both case studies allow the quantification of the failure probability of the proposed water management schemes, which is of basic importance for a safe long-term sustainable water management.