

Geostatistische Simulationsverfahren als Werkzeug der Quantifizierung der Unsicherheit geologischer Untergrundmodelle für die Stadtplanung

Christian GAU

(Dipl.-Ing. Christian Gau, Technische Universität Berlin, Fachgebiet Ingenieurgeologie,
Sekt. ACK 8, Ackerstraße 76, Berlin, c.gau@inggeo.tu-berlin.de)

1 EINLEITUNG

In verstärktem Maße werden Informationen über den geologischen Untergrund für die Stadtplanung benötigt. Dies resultiert einerseits aus der zunehmenden Verlagerung von Infrastruktureinrichtungen (z. B. Verkehrsanlagen u. ä.) in den Untergrund als Folge der Schonung innerstädtischer Freiflächen, andererseits auch aus der Projektierung zunehmend komplexer werdender Bauwerke (Hochhäuser etc.) mit erhöhtem Erkundungsbedarf.

Dank der Ableitung ursprünglich für die Exploration mineralischer Rohstoffe konzipierter Verfahren und deren Implementation in Geographische Informationssysteme ist es nun möglich, dreidimensionale Modelle des Untergrundes eines geplanten Projektes zu erstellen, die bei Verwendung von Schichtmächtigkeiten als geologisch oder bei Verwendung von physikalischen (oder aus Ihnen abgeleiteten) Bodeneigenschaften als geotechnisch bezeichnet werden. Zwar liefern die dabei verwendeten sogenannten Kriging-Verfahren ein im wesentlichen objektives Bild der geologischen Gegebenheiten, jedoch unterschätzen sie stets die Heterogenität der Parameter und deren Einfluss auf das Ergebnis.

Hinzu kommt, dass das Kriging nur eine mögliche Realisation des geologischen Prozesses abbildet. Auch unterliegt das visualisierte Ergebnis sowohl einer Unsicherheit aufgrund der natürlichen Variabilität, gepaart mit der nur punktuellen Kenntnis durch Bohrungen und Sondierungen, als auch einer Unbestimmtheit hinsichtlich der subjektiven und oft nicht vollständig dokumentierten Parameterwahl bei der Erstellung des Modells.

Die geostatistischen Simulationsverfahren liefern nun eine beliebig hohe Zahl weiterer und gleich wahrscheinlicher Realisationen, so dass dann lokale Häufigkeitsverteilungen an jedem Schätzgitterpunkt aufgestellt werden können. Auf dieser Basis können die getroffenen Modellannahmen bewertet und die mit ihnen einhergehende Unsicherheit quantifiziert werden. Diese Ergebnisse können signifikante Auswirkungen auf die Wahl von Bauverfahren, auf Sanierungsentscheidungen in der Umweltgeologie oder auf die Platzierung zukünftiger Erkundungs- oder Messstellen haben.

In dem Beitrag sollen sowohl die Notwendigkeit zur Anwendung solcher Verfahren aufgezeigt als auch beispielhafte Anwendungen demonstriert werden.

2 ZUR NUTZUNG GEOLOGISCHER UNTERGRUNDMODELLE

Mit der zunehmenden Verbreitung Geographischer Informationssysteme (GIS) und geeigneter Visualisierungstechniken gehört es zum Handwerkszeug der Ingenieurgeologie, dreidimensionale Modelle geologischer Strukturen zu erzeugen. Dabei wurden vielfach aus anderen Bereichen der angewandten Geowissenschaften Methoden übernommen und für spezifische Fragestellungen adaptiert.

Die Hauptaufgabe einer jeden geologischen Modellierung stellt die Bestimmung der räumlichen Verteilung geologischer Parameter dar. Im Falle der stets notwendigen Interpolation an bisher nicht erkundeten Stellen erfolgt durch diese Modelle daher eine räumliche Prädiktion. Nach der Entwicklung der hierzu verwendeten Schätzverfahren für die Belange des Bergbaus in den 1950er und 1960er Jahren (vgl. Matheron 1963), ihrer baldigen Anwendung auch auf Projekte der Erdöl- und -gasexploration sowie ihrer Verwendung zur Charakterisierung von Umweltbedingungen im letzten Jahrzehnt des 20. Jahrhunderts werden diese Methoden in jüngerer Zeit auch für baugewissenschaftliche und geotechnische Zwecke herangezogen.

Für die Stadtplanung in besonderem Maße relevant ist der durch bautechnische Zwecke beanspruchte flache Untergrund, da die meisten lastabtragenden Strukturen und viele Infrastruktur- und Versorgungseinrichtungen innerhalb der oberen 50 m lokalisiert sind (Rosenbaum & Turner 2003). Dieser bereits in Kap. 1 beschriebene Trend wird sich sicherlich zukünftig noch stärker ausprägen. Hinsichtlich seiner Eigenschaften unterscheidet dieser Bereich sich jedoch erheblich von den bisherigen Anwendungsdomänen geologischer Modelle, wie etwa dem Bergbau. So ist etwa dieser Bereich Produkt einer Vielzahl geologischer Prozesse und zudem vielfältigen anthropogenen Einflüssen ausgesetzt. Auch ist für bautechnische Zwecke eine höhere Auflösung unerlässlich, die ein dichteres Erkundungsnetz und eine Vielzahl unterschiedlicher Untersuchungen erforderlich machen. Im einzelnen sind für bautechnische Zwecke zu gewinnen:

geologische Daten über Tiefe, Ausdehnung und Dicke der Schichten, die in zweidimensionalen Modellen interpoliert und dann gestapelt dargestellt werden können;

bodenphysikalische Daten (Wichte, Wassergehalt etc.) und geotechnische Eigenschaften (Kohäsion, Reibungswinkel etc.), die beide einer dreidimensionalen Abhängigkeit unterliegen;

Informationen über das Verhalten des Baugrundes bei Veränderung der Grundwasser- oder der Spannungsbedingungen (Steifemodul, Elastizitätsmodul etc.).

Es existieren mittlerweile computergestützte Systeme, um diese ausgesprochen heterogenen Daten zusammenfassend darzustellen. Empirische oder deterministische Modelle erweisen sich dabei oft als unzureichend bzw. als nicht anwendbar, sofern diese Daten nicht nur dargestellt, sondern auch zu einer Prädiktion herangezogen werden sollen. Eine geostatistische Schätzung, die für dieses Problem eine objektive Lösung anbietet, ist mithin erforderlich (vgl. Kap. 3). Auch hierfür existieren zahlreiche Programme. In verstärktem Maße jedoch ist die Benutzung derartiger Systeme auch durch Nicht-Geologen zu beobachten – eine Entwicklung, die seitens der Software-Produzenten durch Voreinstellungen bei der Varianten- und Parameterauswahl und durch vereinfachte

Benutzerführungen teilweise sogar forciert wird. Zukünftige Nutzer von Untergrundmodellen sind demnach auch Bauträger, Raumplaner, Versicherungen und Behörden (vgl. Evans 2003).

Das führt indes auch dazu, dass diese Verfahren oftmals „eingesetzt [werden], ohne die dafür notwendigen fachlichen und mathematischen Rahmenbedingungen zu prüfen.“ (Jäkel 2000). Häufige Folge sind Fehlinterpretationen. Nur unter Berücksichtigung aller mathematischen und geologischen Ausgangs- und Rahmenbedingungen jedoch hat eine solche Modellierung Erfolg in dem Sinne, dass sie plausibel und reliabel ist. Gerade in Kombination mit der immer noch weiter zunehmenden Darstellungsfähigkeit der Modelle durch die Programme birgt dies ernste Probleme. So wird der unbedarfte Benutzer die Darstellung für eine vollständige Wiedergabe der Realität halten, jedoch handelt es sich hierbei nicht um eine Repräsentation derselben, sondern lediglich um eine auf den vorhandenen Daten basierende Interpretation unter Verwendung der in den Programmen implementierten Rechenverfahren!

Dieser Aspekt ist als einer der wesentlichen Kritikpunkte durch Rosenbaum & Turner (2003) benannt worden. Daneben ist auch aufgeführt worden, dass viele der neueren Methoden zur Modellierung des geologischen Untergrundes zwar eine verbesserte Interpolation anstreben, hinsichtlich der stets verbleibenden Unsicherheit jedoch sowohl deren Quantifizierung als auch ihre effektive Darstellung innerhalb des Modells nicht ermöglichen bzw. nicht hinreichend berücksichtigen.

Zukünftig wird auch die Versicherungswirtschaft ein erhöhtes Interesse an geologischen Untergrundmodellen und ihrer Unsicherheit bekunden (Culshaw 2003), da in Abhängigkeit von spezifischen geologischen Parametern geologische Prozesse stattfinden, die eine Schadensfolge bewirken können. Beispielhaft sind die Austrocknung und das Quellen für Tone zu nennen, die Lösung von Gips und Kalkgesteinen, das Schwellen von Anhydrit, langanhaltende Setzungen auf stark organischen Böden oder auch der Zusammenbruch flachliegender bergmännischer Hohlräume, etwa in Bereichen mit Braunkohlevorkommen. Das Risiko eines solchen Schadensfallens ist mit den bisherigen Methoden nicht ausreichend genau abzuschätzen und erfordert die Quantifizierung der Unsicherheit des Modells. Der Bedarf hierzu ergibt sich auch aus der Einführung neuer bautechnischer Normen und Regeln, die zu einer Abkehr von der konservativen Bauweise führen sollen, um bspw. die kostenrelevante Überdimensionierung einer Gründung zu vermeiden.

Das ursprüngliche Ziel einer geologischen Modellierung, Daten zu visualisieren, wird mehr und mehr verdrängt durch den Bedarf, objektive Entscheidungen aus ihnen abzuleiten (Nasser *et al.* 2003). Geologische Modelle dienen damit nicht mehr nur dem wissenschaftlichen Erkenntnisgewinn per se, sondern vielmehr auch als Ausgangsbasis für Berechnungen und als Grundlage von Parameterstudien.

Im folgenden Kapitel 3 soll die geostatistische Schätzung vorgestellt werden, die zwar vielfach bereits zur Modellierung herangezogen wird, eine Quantifizierung der verbleibenden Unsicherheit jedoch nicht ermöglicht. Dabei ist es auch Ziel, die Unterschiede zur geostatistischen Simulation (Kap. 4) herauszustellen.

3 GEOSTATISTISCHE SCHÄTZUNG

3.1 Ablauf der geostatistischen Schätzung

Die in der Geologie auftretenden Phänomene stellen kontinuierlich variierende Parameterfelder dar. Da sie aufgrund der nur punktuellen Erkundung nicht vollständig bekannt sind, bedient man sich einer stochastischen Beschreibung, mittels derer man sie als Ergebnis einer Zufallsfunktion betrachten kann. Da der geologische Untergrund aus ökonomischen Gründen nur punktuell oder nadelstichtartig beprobt wird, kann es nur eine finite Anzahl von Messpunkten geben, die innerhalb gewisser Entfernungen voneinander ähnliche Werte aufweisen (Autokorrelation). Die bekannten Werte bezeichnet man als regionalisierte Variable. Die regionalisierte Variable kann als eine Realisation des Zufallsprozesses betrachtet werden (Wackernagel 2003). Die Realität ist zwar eindeutig festgelegt, jedoch eben nicht oder nur an sehr wenigen Stellen bekannt. Demnach handelt es sich nicht um eine „potentielle Unbestimmtheit“ (Bandemer 1993) als Ausdruck der Unsicherheit über den Ausgang eines stochastischen Experimentes, sondern eher um die Unkenntnis der eindeutig bestimmten Realität.

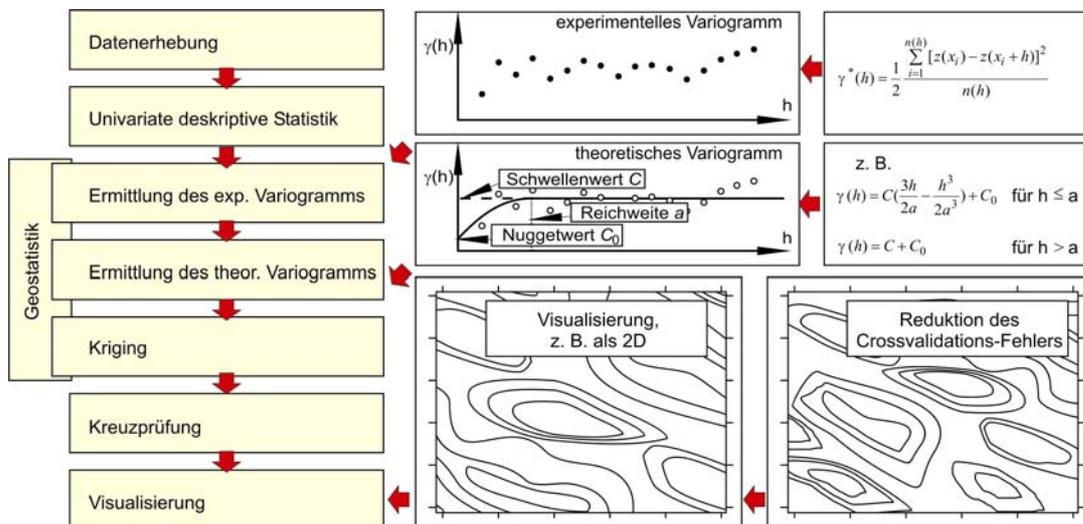


Abb. 1: Schematischer Ablauf der geostatistischen Schätzung

Unter den Voraussetzungen von Ergodizität und Stationarität (vgl. Deutsch & Journel 1997, Chiles & Delfiner 1999) kann mittels der Kriging-Verfahren eine Interpolation an den unbeprobten Lokationen erfolgen (Abb. 1). Dabei werden zunächst im Rahmen der

Variographie die Unterschiede eines bestimmten geologischen Parameters zwischen zwei Punkten jeweils gleicher Abstände berechnet und gegen die Entfernung aufgetragen. An dieses experimentelle Variogramm ist das theoretische Variogramm durch Auswahl einer Funktion aus einer Familie explizit dafür geeigneter Modelle anzupassen. Dieses theoretische Variogramm wird im wesentlichen durch das Zahlentripel der Parameter Schwellenwert C , Reichweite a und Nuggetwert C_0 typisiert, die in charakteristischer Weise Einfluss auf das Ergebnis der Interpolation haben.

Das anschließende Kriging führt schließlich nun zur Interpolation der Werte an allen Punkten des Schätzgitters. Zur Schätzung des Wertes an jedem einzelnen Gitterpunkt bedient es sich aller innerhalb der durch die Reichweite des Variogramms bestimmten Ellipse liegenden Messwerte, weist diesen in Abhängigkeit von der Variogrammfunktion entsprechende Gewichte zu und bestimmt so einen flächenhaft gewichteten Mittelwert. Schließlich sind die erhaltenen Daten in der Kreuzprüfung (Stone 1974, Dubrule 1983, Davis 1987, Myers 1997) zu validieren. Neben den Standardwerken der geostatistischen Literatur, die sich zumeist jedoch dem Bergbau widmen, finden sich auch einige Beispiele, die diese Verfahren zur Modellierung des flachen städtischen Untergrunds nutzen (Marinoni 2000, Pfeleiderer & Hofmann 2004).

3.2 Bewertung

Vorteil einer Anwendung des Krigings zur Erstellung von Untergrundmodellen ist die Berücksichtigung aller zur Verfügung stehenden Informationen (Datenwerte, Mittelwerte, Varianz) sowie der räumlichen Struktur, die hier durch Erstellung des Variogramms und dem darauf basierenden gewichteten Einfluss der Messpunkte Eingang in die Berechnung findet. Beim Kriging handelt es sich zudem um einen optimalen Schätzer im Sinne von Lindner & Kardel (2000) und Bortz (2004), da das Verfahren keine systematische Über- oder Unterschätzung an den zu interpolierenden Punkten vornimmt und diejenige Lösung anbietet, die den geringsten Schätzfehler aufweist, der hier außerdem beim Kriging gleichzeitig berechnet wird. Auch handelt es sich bei den Kriging-Verfahren um exakte Interpolationen, da sie bei Schätzung von bereits bekannten Punkten dessen Wert wiederum reproduzieren. Zudem kann nachgewiesen werden, dass bei einer Erhöhung von Datenanzahl und Datendichte die Interpolation gegen die Realität konvergiert.

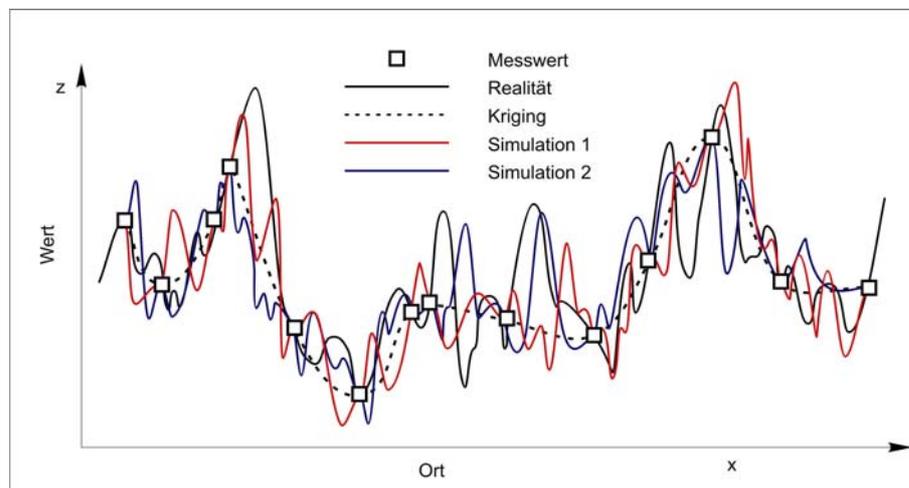


Abb. 2: Auswirkung der Verwendung der kleinsten Schätzvarianz als Ursache für den smoothing effect

Die bereits genannte Erzeugung desjenigen Modells mit der geringsten Schätzvarianz wirkt sich jedoch sehr nachteilig aus, da sie automatisch zu einer starken Glättung des Parameterverlaufes führt. Abb. 2 zeigt dieses als *smoothing effect* bekannte Phänomen. Im übrigen kann gezeigt werden (Armstrong 1998), dass es sich bei der durch das Kriging erzeugten Interpolation um den glattesten Kurvenverlauf aller derjenigen Zufallsfunktionen handelt, die durch die Messwerte verlaufen. In der Darstellung könnte es sich beispielsweise um den Verlauf der Mächtigkeit einer Schicht oder um deren Unterkante entlang eines geologischen Profils handeln. Die wahre, aber unbekannt Realisation des Parameters in der Natur hingegen weist eine viel höhere Variabilität auf. Diese ist zunächst ebenfalls unbekannt, kann jedoch mittels der geostatistischen Simulationsverfahren ermittelt werden.

3.3 Zur Unsicherheit geologischer Untergrundmodelle

Zur Erkundung des Baugrunds werden Messungen, Beobachtungen und Untersuchungen mit verschiedensten direkten und indirekten Methoden durchgeführt, die mit unterschiedlicher Genauigkeit Informationen über den Untergrund liefern. Im Wesentlichen sind hier je nach Aufschlussverfahren *hard data* zu unterscheiden von *soft information*, die noch einer Interpretation bedürfen bzw. aus denen sich erst nach Anwendung von Rechenvorschriften weiterverarbeitbare Werte ableiten lassen. Für die Behandlung qualitativer, halbquantitativer oder kategorialer Daten sind dafür unterschiedliche Verfahren notwendig. Letztlich entsteht eine insgesamt sehr heterogene Datenbasis. Eine gemeinsame Verwertung aller vorliegenden Daten in einem Modell ist daher zwangsläufig mit Unzulänglichkeiten verbunden.

Einen noch signifikanteren Einfluss auf das Ergebnis der Modellierung hat die Variabilität der geologischen Materialien und Strukturen. Die Ursachen der Variabilität bzw. Heterogenität des geologischen Untergrundes liegen in den verschiedenen lateral, vertikal und temporal unterschiedlich stark, teilweise interagierend über lange Zeiträume und in verschiedenen Maßstäben wirkenden geologischen Prozessen. Neben diesen komplexen multivariablen Prozessen ist der für bautechnische Zwecke relevante obere Teil der Erdkruste aufgrund der Verwitterung und wegen der weichen, locker gelagerten quartären Sedimente und auch aufgrund des anthropogenen Einflusses ungleich schwieriger zu behandeln als etwa tiefere Schichten.

4 GEOSTATISTISCHE SIMULATIONSVERFAHREN

4.1 Überblick

Jedes Modell stellt nur eine Interpretation seiner Eingangsdaten dar und wird zusätzlich durch das Basiswissen des Benutzers über geologische Rahmenbedingungen und Prozesse beeinflusst. Doch auch aus diesen mithin unsicheren Modellen lassen sich sinnvolle Entscheidungen ableiten, sofern die Unsicherheit quantifiziert werden kann (Kunstmann & Kinzelbach 1998). Für praktische Anwendungen hängt es mehr noch von dieser Unsicherheit, die mit der Interpolation von Werten einhergeht, als vom Wert selbst ab, welche Entscheidung getroffen wird und ob überhaupt eine Entscheidung getroffen werden kann oder ob noch weitere Erkundungsmaßnahmen erforderlich sind.

Für diesen Zweck lassen sich die geostatistischen Simulationsverfahren einsetzen. Dabei handelt es sich um eine Vielzahl verschiedenster Methoden mit teils nur schwer zugänglichen theoretischen Grundlagen. Grundsätzlich sind konditionierte und nicht-konditionierte Simulationen zu unterscheiden. Für beide Gruppen indes gilt, dass sie die ersten beiden Momente der Häufigkeitsverteilung der Stichprobe (Varianz und Mittelwert) und Aussagen zur Autokorrelation, die aus dem Variogramm abzulesen sind, reproduzieren. Die Verfahren bieten damit zum Kriging alternative Realisationen der Zufallsfunktion mit den gleichen statistischen Eigenschaften (repräsentiert durch das Histogramm) und gleicher räumlicher Struktur (repräsentiert durch das Semivariogramm) an. Soll eine konditionierte Simulation durchgeführt werden, so müssen die Messwerte bekannt sein und zusätzlich in die Rechnung eingehen. Der Nachteil der auf ein Minimum reduzierten Variabilität des Krigings wird dabei umgangen.

Simuliert werden können sowohl Eigenschaften, die qualitativ erfasst werden, wie etwa Lithologie und Mineralogie, als auch Variablen, die quantitativ behandelt werden, wie etwa bodenphysikalische Parameter (Dichte, Wassergehalt etc.) und geotechnische Parameter (Spitzendruck etc.).

Es existieren nur sehr wenige Programme, die überhaupt die Durchführung geostatistischer Simulationen ermöglichen. Die dem Benutzer abverlangten theoretischen Grundlagen für eine problemadäquate Auswahl und eine korrekte Anwendung der Methoden sind ausgesprochen vielfältig und umfangreich. Damit ist das Problem der Integration der modellimmanenten Unsicherheit in Geo-Information-Systemen im Sinne von Rosenbaum & Turner (2003) als eine der zukünftigen Kernaufgaben noch weit von einer Lösung entfernt.

Im folgenden sollen zwei bekannte und bereits in vielen Bereichen erfolgreich angewandte Methoden der geostatistischen Simulation näher beschrieben werden. Eine Prüfung auf Anwendbarkeit auch auf baugelogeische Fragestellungen fehlt indes noch. Für die Beispiele werden Schätzgitter verwendet, die beispielsweise der Vorhersage von Mächtigkeiten einer Schicht dienen sollen. Auf diesen Schätzgittern sei nur eine sehr geringe Anzahl von Knotenpunkten mit der jeweiligen Mächtigkeit durch Bohrungen bekannt, so dass eine Interpolation erforderlich wird.

Für weitere Verfahren und ihre detaillierten mathematischen Grundlagen sei auf Goovaerts (1997), Lantuéjoul (2002), Armstrong & Dowd (1994) und Armstrong *et al.* (2003) hingewiesen.

4.2 Sequentielle Simulationen

Gemeinsames Merkmal der Sequentiellen Simulationsverfahren ist, dass sie entlang eines zufällig festgelegten Weges das gesamte Schätzgitter abarbeiten. Bei ihnen handelt es sich in der Regel um konditionierte Verfahren, d. h., sie führen zu einer Reproduktion der bereits bekannten Messpunkte. Wichtigste Verfahren sind die Sequentielle Gauß'sche Simulation (SGS), die eine Gauß'sche Normalverteilung der Daten voraussetzt, und die Sequentielle Indikatormethoden (SIS) (Journel & Alabert 1989, Gomez-Hernandez & Srivastava 1990), die keinerlei Voraussetzungen bezüglich der Datenverteilung hat, weshalb sie als nichtparametrisch bezeichnet wird. Mit letzterem Verfahren lassen sich auch schiefe oder multimodale Verteilungen effektiv simulieren und untersuchen. Die SIS wird daher sehr häufig eingesetzt, da die theoretische Verteilung der Daten ja stets unbekannt ist, sondern lediglich ein geringer Teil, der durch das Histogramm der Stichprobe repräsentiert wird.

Bei der SIS (Abb. 3) wird zunächst der vorhandene Datensatz durch eine Reihe von Indikatoren in eine Anzahl von Klassen zerlegt. Anschließend werden für die einzelnen Klassengrenzen Indikatorvariogramme aufgestellt. Sodann wird ein Zufallspfad festgelegt, der sicherstellt, dass alle Gitterpunkte genau einmal besucht werden. Ein anschließendes Kriging an jedem der Punkte entlang des Zufallspfades unter Verwendung aller aufgestellten Variogramme führt dann zu geschätzten lokalen Verteilungsfunktionen. Aus diesen wird ein zufälliger Wert gezogen und dem Gitterpunkt zugewiesen. Bei Fortschreiten entlang des Zufallspfades werden die bereits simulierten Werte wie echte Datenpunkte behandelt, dem Konditionierungsdatsatz hinzugefügt und ebenfalls zur Schätzung herangezogen.

Nachdem auf diese Weise das gesamte Gitter abgearbeitet worden ist, kann das Ergebnis visualisiert werden. Jedes Ergebnis stellt eine Realisation dar; weitere Realisationen ergeben sich durch Wahl eines anderen Zufallspfades. Auf diese Weise kann eine hohe Zahl von Realisationen, die auch eine statistische Auswertung ermöglicht (bspw. 100 oder 1000 Realisationen), erstellt werden. Anschließend kann für jeden einzelnen Knotenpunkt des Schätzgitters eine lokale Werteverteilung aus allen durchgeführten Realisationen ermittelt werden. Hieraus lässt sich die Varianz als Maß für die mögliche Streubreite bestimmen.

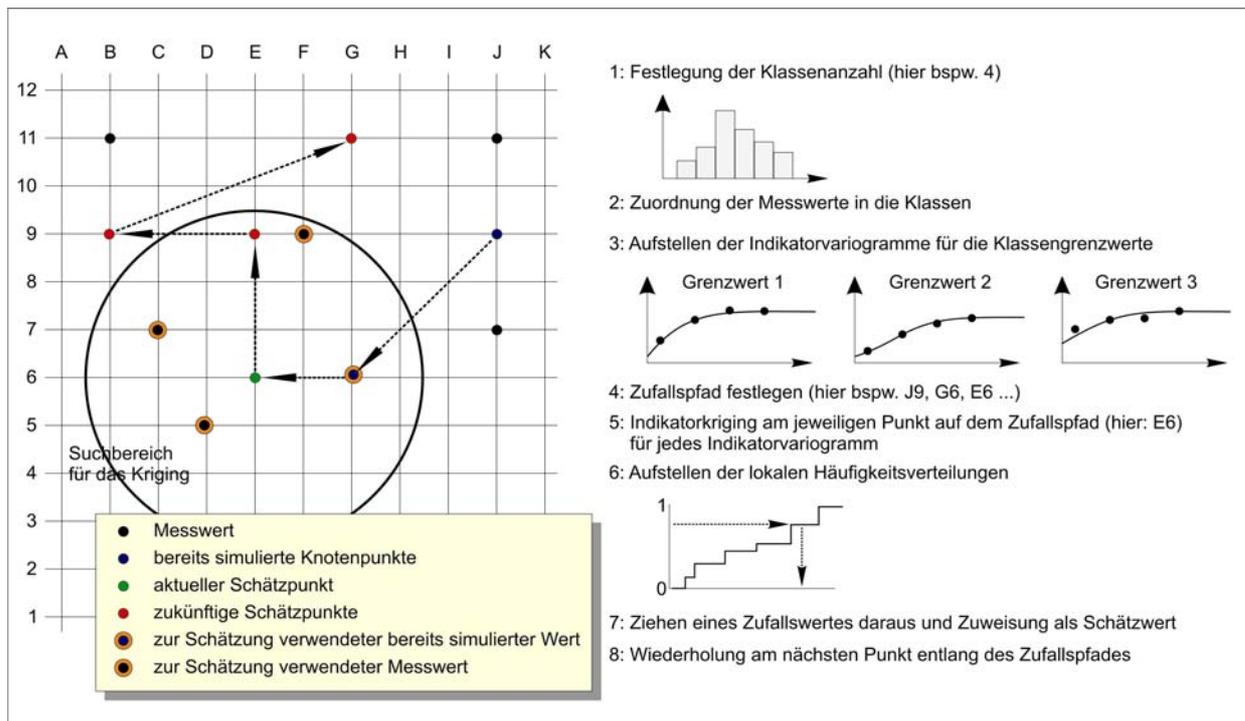


Abb. 3: Prinzip der Sequentiellen Simulation am Beispiel der Sequentiellen Indikatormethode (SIS)

4.3 Simulated Annealing Methoden

Die Simulated Annealing Methoden gehen im wesentlichen auf Journal (1992) zurück und stellen eine zweite große Gruppe weit verbreiteter geostatistischer Simulationsverfahren dar. Bei ihnen handelt es sich eher um Optimierungsalgorithmen, deren Ablauf in Abb. 4 schematisiert dargestellt ist. Auch hier steht am Anfang die Ermittlung der empirischen Häufigkeitsverteilung der vorhandenen Messwerte, an die dann eine theoretische Verteilung angepasst werden kann. Im einfachen Falle handelt es sich hierbei wiederum um Mächtigkeiten einer Schicht, so dass sich die Aufgabe auf ein zweidimensionales Problem reduziert. Aus der theoretischen Verteilung werden nun entsprechend der Anzahl der freien, durch die Messpunkte noch nicht belegten Knotenpunkte des Schätzgitters Werte ausgewählt und zufällig auf diese verteilt. Somit wird auch bei diesem Verfahren sichergestellt, dass jede einzelne Realisation eine vollständige Reproduktion des Histogramms bewirkt.

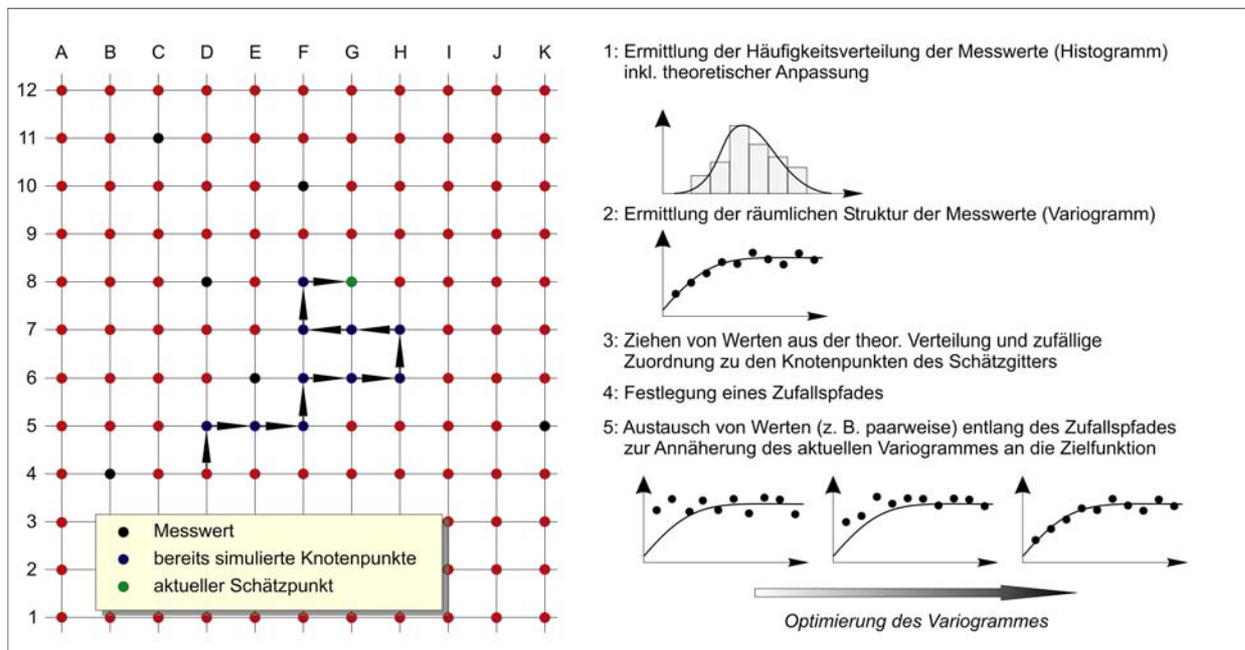


Abb. 4: Schematische Darstellung der Verfahrensweise bei Simulated Annealing Algorithmen

Die Erstellung des empirischen Variogramms unter Verwendung dieser zufälligen Anordnung offenbart natürlich zunächst keine räumliche Struktur (Abb. 4, Punkt 5, linkes Variogramm), sondern lediglich eine zufällige Schwankung um den Schwellenwert (vgl. Abb. 1). Daraufhin sind sämtliche Datenpunkte erneut anzuordnen, so dass sich das empirische Variogramm aller Knotenpunkte der Zielfunktion, die hier durch das theoretische Variogramm der Messwerte gegeben wird, annähert. Dabei werden am einfachsten entlang eines Zufallspfades Datenpaare ausgetauscht und erneut das Variogramm berechnet. Sofern dieser Austausch eine

Annäherung an die Zielfunktion bewirkt hat, wird weiterverfahren. Durch diesen Algorithmus nähert sich schließlich das empirische Variogramm der Zielfunktion an. Verschiedene Erweiterungen des Verfahrens und Varianten sind bei Goovaerts (1997) nachzulesen. Dieser Optimierungsprozess kann gestoppt werden, wenn der Unterschied zwischen Zielfunktion und berechnetem Variogramm hinreichend klein ist. Die einzelnen Austauschprozesse werden als *swap* bezeichnet; ihre notwendige Anzahl ergibt sich aus der Größe des betrachteten Gebietes, der Auflösung, die ihrerseits durch die Anzahl der Gitterknoten gegeben ist, der verwendeten Variante des Verfahrens sowie dem speziellen Abbruchkriterium.

Nach Erzeugung einer derart optimierten Anordnung ist auch hier das Variogramm vollständig reproduziert worden. Mithin stellt diese simulierte Realisation ebenfalls ein mögliches Ergebnis der Zufallsfunktion dar. Weitere Realisation ergeben sich bei diesem Verfahren durch Ziehung anderer Zufallswerte aus der theoretischen Verteilung der Messwerte. Auch hier wird deutlich, dass jede Realisation einzigartig ist, da die Werte zufällig gezogen und zufällig platziert werden, jedoch letztlich die statistischen Eigenschaften einer jeden Realisation mit denen der Stichprobe übereinstimmen. Damit bietet jede Realisation eine Alternative zur Kriging-Oberfläche (vgl. Abb. 2). In Analogie zu der in Abschnitt 4.2 beschriebenen Vorgehensweise lassen sich hier mehrere Realisationen durchführen, die dann statistisch zu untersuchen sind.

5 ZUSAMMENFASSUNG UND SCHLUSSFOLGERUNGEN

5.1 Anwendbarkeit und Nutzung der geostatistischen Simulationen

Der geologische Untergrund stellt aufgrund seiner Genese ein sehr komplexes System dar. Jeder Versuch seiner Modellierung ist mit einer Vielzahl von Unsicherheiten behaftet, deren Ursachen ausgesprochen vielfältig sind. Maßgeblicher Faktor jedoch ist die geogene Heterogenität, deren Kenntnis nie vollständig sein kann, sondern stets durch den Erkundungsaufwand bestimmt wird. Die Krigingverfahren stellen bei einer durch den Bearbeiter zu veranlassenden Aufführung der verwendeten Kriterien bei Variographie und Kriging (und deren jeweiliger Begründung!) zwar intersubjektiv nachvollziehbare Methoden dar, zeigen jedoch verfahrensbedingt stets einen übermäßig stark geglätteten Verlauf des betrachteten Parameters.

Die geogene Variabilität ist damit maßgeblicher Faktor für die Gesamtunsicherheit eines Modells. Subjektive Einflüsse bei der Wahl der Modellierungsmethoden und der Durchführung derselben treten dabei in den Hintergrund. Diese Unbestimmtheit als Auswirkung der Unkenntnis der Realität ist durch die geostatistische Simulation zu erfassen und zu quantifizieren. Hierbei handelt es sich um eine sehr umfangreiche und vielschichtige Methodensammlung, die bisher für die Baugrunderkundung noch nicht eingesetzt wird. Dessen ungeachtet erscheinen bestimmte Anwendungsszenarien besonders vielversprechend.

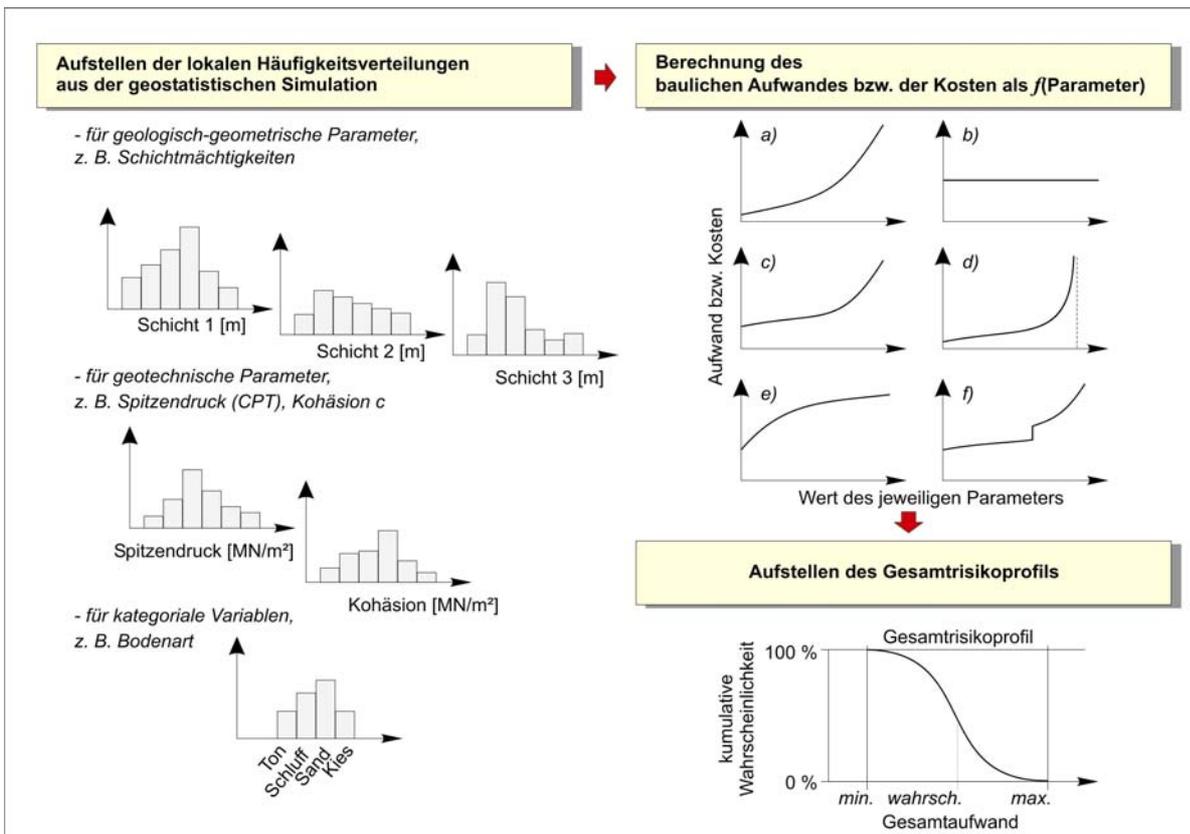


Abb. 5: Schema der Integration der geostatistischen Simulation in ein Entscheidungssystem auf Basis eines Gesamttriskoprofils

Die geostatistischen Simulationsverfahren sind für verschiedenste Fragestellungen anwendbar, bspw. welche Bodenarten mit welcher Wahrscheinlichkeit an einem Punkt vorkommen können. Auch kann untersucht werden, welche quantitativen Eigenschaften der Boden besitzt. Häufigste Fragestellung dürfte jedoch die nach den Schichtmächtigkeiten sein. So ist es mit Hilfe der geostatistischen Simulation möglich, die Wahrscheinlichkeiten zu berechnen, mit der ein bestimmter Wert eines geologischen oder geotechnischen Parameters überschritten wird. Dies ist zwar auch mit dem Indikatorkriging (Deutsch & Journel 1992) möglich, wobei der gekrigte Wert unmittelbar die Wahrscheinlichkeit anzeigt. Anwendung findet dies zum Beispiel bei Marinoni (2000) bei der Beschreibung

von Schichtmächtigkeiten. Jedoch zeigen bereits Menz & Wälder (2000), dass unter Verwendung der Simulation anstelle des Kriging dessen Nachteile deutlich überwunden werden können.

Basierend auf den Ergebnissen der Simulation kann auch die Planung eines kompletten Messnetzes vorgenommen oder die Lage zukünftiger Mess- oder Probenahmeorte bestimmt werden. Die optimale Anordnung einzelner Messstellen kann nach verschiedenen Kriterien optimiert werden. Dabei kann auch iterativ verfahren werden, indem das Ergebnis einer jeden Probe dem Datensatz hinzugefügt wird, um dann erneut eine Simulation durchzuführen. Alternativ können auch die Lokationen für eine ganzen Untersuchungskampagne festgelegt werden.

Da im Verlauf der geostatistischen Simulation jede einzelne Realisation des betrachteten Parameters eine gleichwahrscheinliche Alternative darstellt, können bei entsprechend hoher Anzahl Realisationen ($N = 100$ oder 1.000), die lokalen Häufigkeitsverteilungen zur Durchführung von Risikosimulationen genutzt werden. Ein verallgemeinertes Schema, wie es beispielsweise bei einer Bauwerksgründung Verwendung finden könnte, stellt Abb. 5 dar. Hierfür werden zunächst die relevanten Parameter durch separate geostatistische Simulationen untersucht. Im Beispiel sind dies die Mächtigkeiten der mit dem Bauwerk in Wechselwirkung stehenden Schichten 1 bis 3 sowie die für die Wahl des Gründungsverfahrens relevanten geotechnischen Parameter, hier bspw. Spitzendruck und Kohäsion. Auch das Auftreten der Bodenart als kategoriale Variable kann mittels der geostatistischen Simulation untersucht werden. Durch Anwendung der einschlägigen technischen Regeln zur Gewährleistung von Standsicherheit und Gebrauchstauglichkeit des Gebäudes lassen sich für jeden untersuchten Parameter Funktionen aufstellen, die die Abhängigkeit des notwendigen baulichen Aufwandes vom jeweiligen Parameterwert zeigen. Diese Funktionen sind deterministischer Natur und durch die Berechnungsverfahren in den o. g. technischen Vorschriften bedingt. Als Ergebnis kann ein Gesamtrisikoprofil aufgestellt werden, das die geogen bedingte, lokal mögliche Streubreite eines jeden Parameters und die darauf basierenden spezifischen ökonomischen Abhängigkeiten koppelt und in einer Kurve zusammenfasst. Somit ergeben sich ein minimaler, ein maximaler und ein wahrscheinlicher Fall für den Gesamtaufwand bei der hier betrachteten Bauwerksgründung.

Darauf basierend ist abzuwägen, ob mit einem für die wahrscheinlichste Kombination der Parameterwerte geeigneten Gründungsverfahren unter Inkaufnahme eines verbleibenden, aber eben genau quantifizierten Restrisikos begonnen werden soll und das Verfahren unter Umständen im Verlaufe der Arbeiten bei Auftreten anderer als der prognostizierten Baugrundcharakteristika eventuell umzustellen ist. Alternativ kann entsprechend nacherkundet werden, sofern das Risiko weiterhin als zu hoch angesehen wird.

Jede Kopplung der durch die Simulation erhaltenen stochastischen Verteilungen mit sich anschließenden deterministischen Modellen führt zu einer verbesserten Planung. Entsprechende Beispiel aus der Hydrogeologie finden sich bei Ptak (1993), Kunstmann & Kinzelbach (1998) und Schafmeister (1998).

Als denkbare typische Beispiele aus der Baugeologie sind etwa die Abschätzung von Aushubvolumina, von Gründungstiefen von Dichtwänden und die Ermittlung des Grundwasserzustromes zu Baugruben zu nennen. Praktische Anwendungen fehlen hier bislang.

5.2 Bewertung

Wie alle geostatistischen Methoden benötigen auch die Simulationen eine hohe Datenzahl und eine hohe Datendichte, die kaum jemals innerhalb eines einzelnen bauprojektspezifischen Untersuchungsgebietes vorhanden sein dürfte. Vielmehr eignen sie sich daher für größere innerstädtische Bereiche, die durch mehrmalige Untersuchungskampagnen als relativ gut erkundet gelten können.

Die Anwendung der geostatistischen Simulation erfordern eine hohen Wissensstand des Bearbeiters bei der Modellierung hinsichtlich der theoretischen Grundlagen und ihrer prinzipiellen Anwendbarkeit auf das jeweilige Projekt. Die Problemadäquatheit der Methoden stellt dabei ein wesentliches Kriterium dar. Ein unerfahrener Bearbeiter vermag zwar unter Umständen durchaus, eine geostatistische Simulation durchzuführen, jedoch vermag er nicht, die Wahl der Methode und ihrer speziellen Variante zu begründen. Auch ist das Ergebnis einer Plausibilitätskontrolle zu unterziehen, wofür die Kenntnis der geologischen Rahmenbedingungen unabdingbar ist.

Nachteilig wirkt sich indes die geringe Verfügbarkeit entsprechend geeigneter Software aus. Implementiert sind derartige Funktionen nur in sehr wenigen speziellen Programmen, für die zumeist ein sehr hoher Kaufpreis zu zahlen ist. Darüber hinaus sind diese aufgrund der für die einzelnen Verfahren verfügbaren Varianten und Methoden nur umständlich bedienbar und erfordern auch hierfür ein zusätzliches umfangreiches Basiswissen.

5.3 Ausblick

Zwar lassen sich auch mit den genannten Verfahren fehlende Informationen über den geologischen Untergrund nicht kompensieren, jedoch bieten sie interessante und vielversprechende Möglichkeiten, die unvermeidliche Unsicherheit bei der Modellierung zu quantifizieren. Zukünftig wird dies neben der reinen Visualisierung stark an Bedeutung gewinnen. Die Verantwortung bei der Erstellung eines auf der geostatistischen Simulation fußenden geologischen Untergrundmodells bleibt jedoch beim Bearbeiter und ist wegen der vielfältigen Interaktionsmöglichkeiten sogar noch um einiges größer als bei den Kriging-Verfahren.

Daher ist eine Anwendung der Verfahren durch Experten anzustreben, um sicherzustellen, dass problemadäquate Methoden ausgewählt und in korrekter Weise angewendet werden. Der auch durch die hohe Verfügbarkeit entsprechender Software mitverursachte Trend zur Nutzung der Kriging-Methoden durch neue Benutzerschichten ist zwar nicht mehr umzukehren, eine parallele Entwicklung bei der Simulation sollte jedoch vermieden werden und scheint mittelfristig durch die fehlende Software gebannt.

Anhand Daten aus dem Berliner Raum, über die bereits bei Marinoni (2000) und Gau & Tiedemann (2004) berichtet wurde, sollen zukünftig einige Simulationsverfahren erprobt und hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit auf ingenieurgeologische Fragestellungen bewertet werden. Darüber hinaus soll der Nutzen der durch die Simulation realisierten Verteilungen als Input-Parameter für Risiko-Untersuchungen zur Wahl von Gründungsmethoden und zur Erzeugung optimaler Messnetze untersucht werden.

6 LITERATURVERZEICHNIS

- Armstrong M.: Basic Linear Geostatistics, Springer Berlin, 1998.
- Armstrong M. & Dowd, P. A. (Hrsg.): Geostatistical Simulations, Kluwer Dordrecht, 1994.
- Armstrong M., Galli A. G., Le Loc'h G., Geffroy F. & Eschard R.: Plurigaussian Simulations in Geosciences, Springer Berlin, 2003.
- Bandemer H.: Unkenntnis und Wahrscheinlichkeit, Beiträge zur Mathematischen Geologie und Geoinformatik, 5, Sven von Loga Köln, S. 1-5, 1993.
- Bortz J.: Statistik für Human- und Sozialwissenschaftler, 6., vollst. überarb. u. aktualisierte Aufl., 2004.
- Chilès J. P. & Delfiner P.: Geostatistics: Modeling Spatial Uncertainty, Wiley, 1999.
- Culshaw M.: Bridging the gap between geoscience providers and the user community. In: Rosenbaum M. S. & Turner A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction - Characterization of the Shallow Subsurface: Implications for Urban Infrastructure and Environmental Assessment, Lecture Notes in Earth Sciences 99, Springer Berlin, S. 7-26, 2003.
- Davis B. M.: Uses and Abuses of Cross-Validation in Geostatistics, Mathematical Geology, 19 (3), S. 241-248, 1987.
- Deutsch C. V.: Annealing Techniques Applied to Reservoir Modeling and the Integration of Geological and Engineering (Well Test) Data, PhD thesis Stanford University, Stanford, 1992
- Deutsch C. V. & Journel A. G.: GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide, 2., überarb. Aufl., Oxford University Press, 1987.
- Dubrule M. G.: Cross Validation of Kriging in a Unique Neighborhood, Mathematical Geology, 15 (6), S. 687-699, 1997.
- Evans R.: Current themes, issues and challenges concerning the prediction of subsurface conditions. In: Rosenbaum, M. S. & Turner, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction - Characterization of the Shallow Subsurface: Implications for Urban Infrastructure and Environmental Assessment, Lecture Notes in Earth Sciences 99, Springer Berlin, S. 359-378, 2003.
- Gau, C. & Tiedemann, J.: Möglichkeiten und Nutzen von objektivierten Untergrundmodellen und deren Integration in raumbezogene Informationssysteme, CORP 2004 Wien, S. 737-741, 2003.
- Gomez-Hernandez J. J.: ISIM3D: An ANSI-C three dimensional multiple indicator conditional simulation program, Computers & Geosciences, 16 (4), S. 395-440, 1990.
- Goovaerts, P.: Geostatistics for Natural Resources Evaluation, Oxford University Press, Oxford, 1997.
- Jäkel M.: Anwendung des Gradientenkrigings bei der Erkundung des 2. miozänen Flözhorizontes in der Niederlausitz, Mathematische Geologie, 5, CPress Dresden, S. 183-203, 2000.
- Journel A. & Alabert F. G.: Non-Gaussian data expansion in Earth Sciences, Terra Nova, 1, S. 123-124, 1989.
- Kunstmann H. & Kinzelbach W.: Quantifizierung von Unsicherheiten in Grundwassermodellen, Mathematische Geologie, 2, CPress Dresden, S. 3-15, 1998.
- Lantuéjoul C.: Geostatistical Simulation, Springer Berlin, 2002.
- Lindner S. & Kardel K.: How accurate are geochemical maps?, Mathematische Geologie, 5, CPress Dresden, S. 169-181, 2000.
- Marinoni O.: Geostatistisch gestützte Erstellung baugeologischer Modelle am Beispiel des Zentralen Bereiches von Berlin, Dissertation TU Berlin, Mensch & Buch Verlag, 2000.
- Matheron G.: Principles of Geostatistics, Economic Geology, 58, S. 1246-1266, 1963.
- Menz J. & Wälder K.: Zur optimalen Anordnung von Stützwerten und Gradienten, Mathematische Geologie, 5, CPress Dresden, S. 131-144, 2000.
- Myers J. C.: Geostatistical Error Management: Quantifying Uncertainty for Environmental Sampling and Mapping, Van Nostrand Reinhold New York, 1997.
- Nasser K. H., Bolivar S., Canepa J. & Dorries A.: New paradigms for geoscience information management. In: Rosenbaum, M. S. & Turner, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction - Characterization of the Shallow Subsurface: Implications for Urban Infrastructure and Environmental Assessment. Lecture Notes in Earth Sciences 99, Springer Berlin, S. 41-58, 2003.
- Pfleiderer S. & Hofmann T.: 3D-visualisation of Vienna's subsurface, CORP 2004 Wien, S. 367-372, 2004.
- Ptak T.: Tracerversuche und numerisch-stochastische Transportmodellierung unter Verwendung der sequentiellen Indikatormodellierung, Beiträge zur Mathematischen Geologie und Geoinformatik, 5, Sven von Loga Köln, S. 58-68, 1993.
- Rosenbaum M. S. & Turner A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction - Characterization of the Shallow Subsurface: Implications for Urban Infrastructure and Environmental Assessment. Lecture Notes in Earth Sciences 99, Springer Berlin, 2003.
- Schafmeister M.-T.: Der Einsatz geostatistischer Simulationen in der Grundwassermodellierung, Mathematische Geologie, 2, CPress Dresden, S. 67-78, 1998.
- Stone M.: Cross-validatory choice and assessment of statistical predictions, Journal of the Royal Statistical Society B, 36 (2) S. 111-147 (inkl. Diskussion S. 133-147), 1974.
- Wackernagel H.: Multivariate Geostatistics, 3., kompl. überarb. Aufl., Springer Berlin, 2003.