

Abflusskonzentration in mesoskaligen Einzugsgebieten unter Berücksichtigung des Sickerraumes

Von der Fakultät Bau- und Umweltingenieurwissenschaften der Universität
Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Vlad Rojanschi

aus Bukarest, Rumänien

Hauptberichter: Prof. Dr. rer. nat. Dr.-Ing. habil. András Bárdossy
Mitberichter: Prof. Dr. h.c. Dr.-Ing. E.h. Helmut Kobus, Ph.D.
Prof. Dr.-Ing. habil. Gerd H. Schmitz

Tag der mündlichen Prüfung: 7. März 2006

Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart

2006

Heft 146

Abflusskonzentration in
mesoskaligen Einzugsgebieten
unter Berücksichtigung
des Sickerraumes

von Dr.-Ing. Vlad Rojanschi, M.Sc.

**D93 Abflusskonzentration in mesoskaligen Einzugsgebieten
unter Berücksichtigung des Sickerraumes**

Rojanski, Vlad:

Abflusskonzentration in mesoskaligen Einzugsgebieten
unter Berücksichtigung des Sickerraumes / von Vlad Rojanski. Institut für Wasserbau,
Universität Stuttgart. - Stuttgart: Inst. für Wasserbau, 2006

(Mitteilungen / Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart ; H. 146)

Zugl.: Stuttgart, Univ., Diss., 2006

ISBN 3-933761-49-2

Gegen Vervielfältigung und Übersetzung bestehen keine Einwände, es wird lediglich
um Quellenangabe gebeten.

Herausgegeben 2006 vom Eigenverlag des Instituts für Wasserbau
Druck: Sprint-Druck, Stuttgart

Vorwort

Im Rahmen der „global change“-Forschung müssen sich die Studien des Wasserkreislaufes mit den Auswirkungen von langfristigen Veränderungen in den klimatischen und sozioökonomischen Bedingungen auseinandersetzen. Zusätzlich müssen sie die Forderungen nach integrativen nachhaltigen Ansätzen und nach regionalen bzw. überregionalen Sichtweisen berücksichtigen. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit der Entwicklung von hydrologischen Modellen für große Flusseinzugsgebiete. Die Modelle sollen als zuverlässige Werkzeuge dienen, um Entscheidungen zu unterstützen, welche die nachhaltige Entwicklung des Wasserkreislaufes sichern sollen.

Vor dem Hintergrund derzeit noch offener wissenschaftlicher Fragestellungen im Hinblick auf die hydrologische Modellierung der Abflusskonzentration hat sich Herr Rojanschi in der vorliegenden Arbeit mit zahlreichen Methoden und Strategien auseinandergesetzt. Hierbei wurde eine neue Modellstruktur entwickelt und angewandt, die den Sickerraum, den Raum zwischen dem Boden- und dem tiefen Grundwasser-raum, explizit berücksichtigt. Damit lassen sich die hydrologischen Abflusskonzentrationsprozesse akkurater und realitätsnäher abbilden.

Eine komplexe Modellierungsstrategie wurde in dieser Arbeit angewandt, um die strukturelle Unsicherheit des Modells ausführlich zu untersuchen. Mehrere Modellversionen mit unterschiedlichen Graden der Konzeptionalisierung wurden bezüglich der Modellgüte und der Parameterbestimmbarkeit verglichen. Die Integration eines räumlich-verteilter Grundwasserströmungsmodells in die entwickelte Modellstruktur hat zu umfangreicheren und realistischeren Ergebnissen geführt. Um auch die Unsicherheit in der Parameterbestimmung signifikant zu reduzieren, wurde die Modellierungsstrategie mit einem Regionalisierungsansatz ergänzt, so dass Gebietseigenschaften in den Kalibrierungsprozess direkt eingesetzt werden konnten. Die Ergebnisse dieser Strategie waren sehr vielversprechend.

Das Potential von Ganglinienanalyseverfahren für die Unterstützung von Modellierungsvorhaben wurde durch eine sehr umfangreiche Studie untersucht. Durch die erstmalige Entwicklung einer Software, welche die relevanten existierenden Verfahren implementiert, konnten die Ganglinienanalyseverfahren direkt verglichen werden, was zu zahlreichen neuen Erkenntnissen über ihre Eigenschaften geführt hat. Der Vergleich ihrer Ergebnisse mit den Modellergebnissen zeigt aber auch, dass die Verfahren in einem Modellierungskontext mit Vorsicht behandelt werden müssen.

Im Ganzen stellen die in der vorliegenden Arbeit entwickelten Modelle und Modellierungsstrategien eine umfangreiche Basis für die numerische Abbildung der Abflusskonzentrationsprozesse in mesoskaligen Einzugsgebieten unter Berücksichtigung des Sickerraumes dar. Zusammen mit den daraus abgeleiteten neuen Erkenntnissen sind sie wichtige Schritte in die Richtung einer besseren quantitativen Hydrologie.

Stuttgart, im März 2006

András Bárdossy

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart. Die Arbeit wurde im Rahmen des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Forschungsprojektes GLOWA-Danube durchgeführt.

Meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. rer. nat. Dr.-Ing. habil. András Bárdossy danke ich herzlich für die Übernahme des Hauptreferats. Durch seine Diskussionen und Anstöße ermöglichte er das Gelingen dieser Arbeit. Seine wissenschaftliche Neugier für neue Ideen bleibt für mich eine Inspirationsquelle.

Ich möchte mich bei Herrn Prof. Dr. h.c. Dr.-Ing. E.h. Helmut Kobus, Ph.D. und Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Gerd H. Schmitz von der Technischen Universität Dresden für die Übernahme der Koreferate und für ihre Kommentare bedanken. Herrn Prof. Kobus möchte ich auch für die Unterstützung und das Vertrauen, die er mir während meiner Studien- und Doktorandenzeit gegeben hat, danken.

Ich danke allen meinen Kollegen der GLOWA-Gruppe für die Zusammenarbeit und für die freundliche Arbeitsatmosphäre. Meinen Projektleitern, Jürgen Braun, Ph.D. und Dr. rer. nat. Roland Barthel, danke ich für die kontinuierliche Hilfe, dafür, dass sie mir ermöglicht haben, im Projekt zu promovieren, und für die Zeit, die sie in das Lesen meiner Arbeit investiert haben, was zu sehr wertvollen Verbesserungsvorschlägen geführt hat. Jens Wolf, Johanna Jagelke, Aleksandar Trifkovic, Jens Götzinger, Jürgen Brommundt, Patrick Bracken und Anne Weiß haben Teile meiner Dissertation gelesen und sie durch ihre Kommentare wesentlich verbessert. Sie sind auch dafür verantwortlich, dass die Sprache, in der die Arbeit geschrieben ist, von der deutschen Sprache nicht zu weit entfernt ist. Danke auch allen anderen IWS- und WAREM-Kollegen, insbesondere Jens Mödinger, Darla Nickel, Beate Kohler, Simone Mödinger, Claudia Hojak, Yvonne Reichert und Sabine Manthey.

Ich möchte meinen Kollegen Jens Wolf noch einmal explizit erwähnen. Sehr viele Ideen dieser Arbeit sind direkt oder indirekt das Ergebnis unserer Zusammenarbeit. Das MODFLOW-Grundwassermodell für das Ammergebiet, das ich benutzen durfte, ist sein Werk. Er hat meine Arbeit so oft gelesen und wir haben darüber so oft diskutiert, dass er sie mindestens genau so gut kennt wie ich. Er hat immer ein ermutigendes Wort für mich gehabt, wenn ich eins gebraucht habe.

Vielen Dank auch an Prof. Dr. rer. nat. Ralf Ludwig von der Christian-Albrecht-Universität zu Kiel, dass ich seine PROMET-Ergebnisse sowie andere Datensätze, ohne die meine Arbeit nicht ohne weiteres möglich gewesen wäre, benutzen konnte.

Ich bedanke mich auch bei Jürgen Schuol und Ana Garzón, die mir durch ihre Master- oder Seminararbeiten geholfen haben, die hydrologischen Prozesse und Methoden besser zu verstehen.

Letztendlich möchte ich allen meinen Freunden danken. Mein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern und meiner Schwester für ihren vorbehaltlosen Rückhalt und ihr Verständnis. Diese Arbeit ist ihnen gewidmet.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	v
Danksagung	vii
Abbildungsverzeichnis	xiii
Tabellenverzeichnis	xvii
Verzeichnis der Abkürzungen	xix
Verzeichnis der häufig gebrauchten Formelzeichen	xxi
Abstract	xxvii
Zusammenfassung	xxxix
1 Einführung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Problemstellung	3
1.2.1 Definition der Begriffe	3
1.2.2 Konzeptionelle und physikalische-basierte Ansätze in der hydrologischen Modellierung	5
1.2.3 Hydrologische Modellierung des Sickerraumes	7
1.3 Zielsetzung	8
1.4 Vorgehensweise und Aufbau der Arbeit	9
2 Hydrologische Modellierung in mesoskaligen Einzugsgebieten	11
2.1 Grundlagen hydrologischer Modelle	11
2.1.1 Modellierung hydrologischer Systeme	11
2.1.2 Aufbau konzeptioneller hydrologischer Modelle der Abflusskonzentration	12
2.1.3 Einsatz von Optimierungsalgorithmen	16
2.2 Physikalisch-basierte hydrologische Modelle	21
2.2.1 Theoretische Grundlage der Abflusskonzentration	22
2.2.2 Integration einzelner Prozesse in einer integrativen Modellstruktur am Beispiel des Forschungsprojektes GLOWA-Danube	23
2.3 Hydrologische Modellierung des Sickerraumes	25
2.3.1 Der Sickerraum aus der Sicht von Grundwassermodellen	27

2.3.2	Der Sickerraum aus der Sicht konzeptioneller Niederschlags- Abfluss-Modelle	27
2.4	Unsicherheiten in der hydrologischen Modellierung	28
2.4.1	Die GLUE-Methode	29
2.4.2	Die Mehrziel-Optimierungsanalyse	30
2.4.3	Wechselbeziehungen zwischen Modellparametern	32
2.5	Das Einzugsgebiet der oberen Donau	33
2.5.1	Das Einzugsgebiet der Ammer	36
2.5.2	Das Einzugsgebiet der Naab	37
3	Ganglinienanalyse zur Bestimmung der Abflusskomponenten	39
3.1	Übersicht der Prinzipien der Ganglinienanalyse	40
3.2	Beschreibung und Klassifizierung der Ganglinienanalyse	42
3.2.1	Graphische Methoden	43
3.2.2	Statistische Methoden	44
3.2.3	Separation mittels der Rezessionsanalyse	45
3.2.4	Digitale-Filter-Methoden	50
3.2.5	Analytische Methoden	51
3.3	Berechnung der Abflussganglinien für Teileinzugsgebiete	53
3.4	Anwendung signifikanter Ganglinienseparationsverfahren	56
3.4.1	Systematische Auswertung der Unterschiede zwischen den Er- gebnissen verschiedener Separationsverfahren	58
3.4.2	Mathematische Beziehungen zwischen Ergebnissen verschiede- nen Separationsverfahren	63
3.4.3	Analyse der Abhängigkeit der Ergebnisse von Gangliniensepa- rationsverfahren von der räumlichen Skala	64
3.4.4	Interpretation der Ergebnisse	67
3.5	Regionalisierung der Ergebnisse der Ganglinienanalyse	69
3.6	Andere Methoden zur Ganglinienanalyse	76
3.7	Ganglinienanalyse - Zusammenfassung und Ausblick	79
4	Modellierung der Abflusskonzentration. Fallstudie Ammer	83
4.1	Entwicklung des Modellkonzeptes	83
4.1.1	Vorstellung des physikalischen Konzeptes	83
4.1.2	Vorstellung der entwickelten Modellstruktur	85
4.2	Entwicklung einer Modellierungsstrategie	87
4.2.1	Einbindung des Bodenwasserhaushaltsmodells	88
4.2.2	Das MODFLOW-Grundwassermodell für das Einzugsgebiet der Ammer	91
4.2.3	Definition des zulässigen Parameterraumes	91
4.2.4	Auswahl der Zielfunktionen für die Bewertung der Modellgüte	92
4.2.5	Anwendung der Mehrziel-Optimierung	94
4.2.6	Anwendung der GLUE-Analyse	94
4.2.7	Anwendung der Analyse der Dimensionalität des Modells . . .	95
4.3	Vorstellung und Diskussion der Ergebnisse	97
4.3.1	Analyse der Güte der Modellergebnisse	97
4.3.2	Analyse der Modellparameter und ihrer Bestimmbarkeit	108

4.3.3	Anwendung der Dimensionalitätsanalyse für die Bewertung der Modellstruktur	119
4.4	Vergleich mit dem Niederschlag-Abfluss-Modell HBV	127
4.5	Zusammenfassung der Modellierungsergebnisse im Gebiet der Ammer	130
5	Verknüpfung von Kalibrierungs- und Regionalisierungsverfahren	135
5.1	Regionalisierung in der Hydrologie	135
5.2	Modellkonzept und Modellierungsstrategie	138
5.3	Vorstellung und Diskussion der Ergebnisse	141
5.3.1	Analyse der Güte der Modellergebnisse	141
5.3.2	Analyse der Regionalisierungskoeffizienten, der Modellparame- ter und ihrer Bestimmbarkeit	146
5.4	Physikalische Interpretation der Ergebnisse	149
5.5	Zusammenfassung	154
6	Zusammenfassung und Ausblick	159
6.1	Ganglinienanalyseverfahren zur Bestimmung von Abflusskomponenten	159
6.2	Modellierung der Abflusskonzentration	161
6.3	Verknüpfung von Kalibrierungs- und Regionalisierungsverfahren	163
6.4	Hydrologische Sickerraummodellierung	165
6.5	Abschließende Bemerkungen und Ausblick auf zukünftige Arbeiten . .	166
	Literaturverzeichnis	167

Abbildungsverzeichnis

0.1	Basic scheme of the studied processes of discharge concentration . . .	xxviii
0.2	The Upper Danube Catchment	xxix
0.3	Hydrograph separation for the gauge Weilheim, river Ammer - yearly means	xxxii
0.4	Summary of model results in the Ammer catchment	xxxiv
0.5	Summary of model results after the regionalisation approach in the Ammer and Naab catchments	xxxv
1.1	Schema der untersuchten Abflusskonzentrationsprozesse	2
1.2	Das Einzugsgebiet der Oberen Donau	3
2.1	Klassifikation hydrologischer Modelle	13
2.2	Der Downhill-Simplex-Algorithmus in einem dreidimensionalen Raum	19
2.3	Flussdiagramm des Optimierungsalgorithmus Simulated-Annealing - Downhill Simplex	20
2.4	Die Struktur des gekoppelten DANUBIA-Modells	24
2.5	Pareto-Lösung für ein Problem mit zwei Parametern und zwei Zielfunktionen	31
2.6	Darstellung der Hauptkomponentenanalyse	32
2.7	Geologisch-hydrogeologische Karte des Einzugsgebietes der Oberen Donau	35
2.8	Schematisches geologisch-hydrogeologisches Profil durch das Einzugsgebiet der Oberen Donau	35
2.9	Die Einzugsgebiete der Ammer und der Naab	37
3.1	Definition eines Abflussereignisses	42
3.2	Schematische Darstellung der Ereignis-basierten graphischen Methoden	43
3.3	Schematische Darstellung der HYSEP Methoden	44
3.4	Schematische Darstellung der Kille-Methode	45
3.5	Abflussganglinie für einen Pegel in einer Klimaregion mit mehrmonatiger Trockenheit	46
3.6	Ganglinienseparation nach Wittenberg	48
3.7	Generierung der Struktur der Teileinzugsgebiete basierend auf dem DGM und der Lage der Pegel.	54
3.8	Flussdiagramm des entwickelten Verfahrens zur Berechnung des hydrologischen Signals aller Teileinzugsgebiete.	55
3.9	Separationslinien für ein ausgewähltes Ereignis für das Teileinzugsgebiet Mühlried an der Paar.	57

3.10	Verhalten des BFI-Wertes bei zeitlicher Skalierung für den Pegel Weilheim an der Ammer	59
3.11	Ganglinienseparationslinien für den Pegel Weilheim an der Ammer - jährliche Mittelwerte	59
3.12	Ganglinienseparationslinien für den Pegel Weilheim an der Ammer - mehrjährigen Monatsmittelwerte	59
3.13	BFI-Rangstatistik für alle Separationsverfahren angewandt auf die 209 Ganglinien im Einzugsgebiet der Oberen Donau	62
3.14	Spannweite der berechneten BFI-Werte für jedes Separationsverfahren über die 209 Ganglinien.	62
3.15	Korrelationen zwischen den berechneten BFI-Wert und die Fläche des Teileinzugsgebietes	66
3.16	BFI-Additivitätsanalyse für das Einzugsgebiet Weilheim an der Ammer	67
3.17	BFI-Additivitätsanalyse für sechs ausgewählte Einzugsgebiete	68
3.18	Güte R^2 der Ergebnisse der Regionalisierung	73
3.19	Ergebnisse der BFI-Regionalisierung	74
3.20	Anteil der Paramaterklassen an der Endparameterauswahl	75
3.21	Bestimmung der Master Recession Curve	77
3.22	Anpassung des Einzellinearspeichermodells an die Master Recession Curve	77
3.23	Korrelogramm zwischen den berechneten PROMET-Ergebnissen und den Abflussganglinien	78
3.24	Verteilung der durch Ganglinienanalyse bestimmten Anteile des Grundwasser- und Zwischenabflusses im Einzugsgebiet der Oberen Donau . .	81
4.1	Schema der hydrologischen Abflusskonzentration-Prozesse in einem alpine Gebiet	84
4.2	Modellstruktur für den Komplex Bodenraum-Sickerraum-Grundwasser-Oberflächengewässer	86
4.3	Das Einzugsgebiet der Ammer	88
4.4	Vergleich zwischen den PROMET-Ergebnissen und den gemessenen Abflussdaten im Einzugsgebiet der Ammer	90
4.5	Auswahl der Zielfunktionen für eine Mehrziel-Analyse	93
4.6	Pareto-Lösung im Kriterienraum für Fall 1 (lineare Speicherkaskade für das Grundwassermodul)	98
4.7	Modellergebnisse nach der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 1 . .	99
4.8	Werte der Modellgüte bei der GLUE-Analyse für Fall 1	100
4.9	Modellergebnisse nach der GLUE-Analyse für Fall 1	101
4.10	Modellergebnisse nach der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 2 . .	102
4.11	Berechnete und gemessene Dauerlinie für das Teileinzugsgebiet 2 (Pegel Weilheim) für Fall 2	103
4.12	Modellergebnisse nach der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 2 . .	104
4.13	Werte der Modellgüte bei der GLUE-Analyse für Fall 2	105
4.14	Quantifizierung der Modellunsicherheit für Fall 1	107
4.15	Quantifizierung der Modellunsicherheit für Fall 2	107
4.16	Pareto-Lösung im Parameterraum für Fall 1	109

4.17	Beziehung in der Pareto-Lösung zwischen den beiden Parametern einer linearen Speicherkaskade	109
4.18	Zusammengefasste Pareto-Lösung im Parameterraum für Fall 1	110
4.19	Bestimmbarkeit der Parameter innerhalb der Pareto-Lösung für Fall 1	110
4.20	Sensitivität der Parameter nach der GLUE-Analyse für Fall 1	112
4.21	Parameterverteilungen nach der GLUE-Analyse für Fall 1	112
4.22	Zusammengefasste Pareto-Lösung im Parameterraum für Fall 2 (Finite-Differenzen MODFLOW Modell für das Grundwassermodul)	114
4.23	Sensitivität der Parameter nach der GLUE-Analyse für Fall 2	115
4.24	Parameterverteilungen nach der GLUE-Analyse in Fall 2	115
4.25	Sensitivitätsanalyse der einzelnen Modellparameter in Fall 2	115
4.26	Vergleich zwischen Fall 1 und Fall 2 bezüglich der Bestimmbarkeit der Sickerraumparameter anhand der Mehrziel-Optimierungsanalyse	117
4.27	Vergleich zwischen Fall 1 und Fall 2 bezüglich der Bestimmbarkeit der Sickerraumparameter anhand der GLUE-Analyse	118
4.28	Korrelationsmatrix im Pareto-Parameterraum für Fall 1, Tezg 1	119
4.29	Eigenvektoren und Eigenwerte im Parameterraum für Fall 1, Tezg 1	120
4.30	Darstellung der mit Eigenvektoren transformierten Pareto-Sätze für Fall 1, Tezg 1	122
4.31	Sensitivität der GLUE-Eigenvektoren für Fall 1, Tezg 1	122
4.32	Darstellung der GLUE-Eigenvektoren für Fall 1, Tezg 1	122
4.33	Bestimmung der Modelldimensionalität für Fall 1, Tezg 1	123
4.34	Eigenvektoren und Eigenwerte im Parameterraum für Fall 2, Tezg 1	124
4.35	Zusammenfassung aller Schätzungen der Modelldimensionalität für Fall 1 und Fall 2	125
4.36	Ergebnisse der HBV-Kalibrierung	128
4.37	Sensitivität der Parameter nach der GLUE-Analyse für das HBV-Modell	129
4.38	Eigenvektoren und Eigenwerte im Parameterraum für das HBV-Modell, Tezg. 1	129
4.39	Schätzung der Modell-Dimensionalität: Vergleich Fall 1 - Fall 2 - HBV	129
4.40	Vergleich zwischen Modellierungs- und Ganglinienanalyse-Ergebnissen	133
5.1	Das Einzugsgebiet der Naab	138
5.2	Pareto-Lösung im Kriterienraum für Fall a	142
5.3	Vergleich zwischen der einzelnen Teileinzugsgebiets-Kalibrierung und dem Regionalisierungsansatz: Exemplarische Abflusszeitreihen	145
5.4	Pareto-Lösung im Koeffizientenraum für Fall a	146
5.5	Pareto-Lösung im Koeffizientenraum für Fall b	146
5.6	Sensitivität der Regionalisierungskoeffizienten gegenüber Gütewerten in mehreren Teileinzugsgebieten	147
5.7	Parameterverteilungen nach der GLUE-Analyse für die ersten zwölf Koeffizienten der Regionalisierung.	148
5.8	Zusammenfassung der Parameterverteilungen nach dem Regionalisierungsansatz	150
5.9	Vergleich MODFLOW-Speicherkaskade für das Gebiet der Ammer	153
5.10	Grundwasser- und Sickerwasseranteile nach dem Regionalisierungsansatz	155

Tabellenverzeichnis

2.1	Geologisch-hydrogeologische Basisklassen im Einzugsgebiet der Oberen Donau	36
3.1	Korrelationen K zwischen den Separationslinien gemittelt über alle 209 Ganglinien des Einzugsgebietes der Oberen Donau	60
3.2	Korrelationen K zwischen den Separationslinien gemittelt über die sieben Ganglinien der Ammergebietes	61
3.3	Ergebnisse der Kalibrierung der Digital-Filter-Methode an den anderen Separationsverfahren	63
3.4	Ergebnisse der regressionsgestützten Analyse über die Permanenz der Beziehungen zwischen verschiedenen Separationslinien	63
3.5	Zusammenfassung der Häufigkeiten der Regressionsparameter in der Regionalisierung der BFI-Werte	76
3.6	Charakteristische Zeiten für die hydrologischen Prozesse im Einzugsgebiet der Ammer	79
4.1	Zusammenfassung der Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 1	98
4.2	Zusammenfassung der Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 2 (Finite-Differenzen MODFLOW-Modell für das Grundwassermodul)	102
4.3	Zusammenfassung der Ergebnisse des Kolmogoroff-Smirnov-Tests nach der GLUE-Analyse für Fall 1	113
4.4	Bestimmbarkeit der Parameter innerhalb der Pareto-Lösung für Fall 2	114
4.5	Zusammenfassung der Ergebnisse des Kolmogoroff-Smirnov-Tests nach der GLUE-Analyse für Fall 2	116
4.6	Zusammenfassung aller Schätzungen der Modelldimensionalität für Fall 1	123
4.7	Zusammenfassung aller Schätzungen der Modelldimensionalität für Fall 2	125
4.8	Zusammenfassung der Ergebnisse des HBV-Modells	128
5.1	Spannweite der Werte der Gebietseigenschaften für die Kalibrierungsauswahl und für alle untersuchten Teileinzugsgebiete	141
5.2	Zusammenfassung aller Gütewerte bei der Mehrziel-Optimierung für Fall a und Fall b	143
5.3	Vergleich zwischen der einzelnen Teileinzugsgebiets-Kalibrierung und dem Regionalisierungsansatz: Zusammenfassung der Gütewerte	144

Tabellenverzeichnis

5.4	Zusammenfassung der Ergebnisse des Kolmogoroff-Smirnov-Tests nach der GLUE-Analyse	147
5.5	Relativer Einfluss der Gebietseigenschaft auf die Modellparameter . .	149

Verzeichnis der Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
BFI	Basisabflussindex
BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
CPU	Central Processing Unit
DGM	Digitales Geländemodell
DIFGA	Differenzenganglinienanalyse
DIN	Deutsche Industrienorm
DWD	Deutscher Wetterdienst
ELS	Einzellinearspeicher
FORTRAN	Formula Translator (Programmiersprache)
GIS	Geographisches Informationssystem
GLOWA	Globaler Wandel
GWN	Grundwasserneubildung
HBV	Name eines Niederschlags-Abfluss-Modells
HYSEP	Streamflow Hydrograph Separation and Analysis (Programm)
mNN	Meter über Normalnull
MODFLOW	Modular three-dimensional finite-difference groundwater flow model
MRC	Master Recession Curve
PROMET	Prozessorientiertes multiskaliges Evapotranspirationsmodell
RMS	Root Mean Squared Difference
RTS	Response Timescale
SVAT	Soil-Vegetation-Atmosphere-Transfer
Tezg	Teileinzugsgebiet
TOPAZ	Topographic Parameterization (Programm)

Verzeichnis der häufig gebrauchten Formelzeichen

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
α	Rate der Temperatursenkung bei Simulated Annealing	[–]
α	Rezessionskonstante	[T]
α_{KS}	Signifikanzniveau bei dem Kolmogoroff-Smirnov-Test	[–]
β	Parameter des Digital-Filter-Separationsverfahrens	[–]
χ	Parameter des Furey-Gupta-Separationsverfahrens	[–]
δ	Konstante in der Lanczos-Schätzung des Integrals des unvollendeten Gammafunktion	
ϵ	Fehler einer Schätzung	
γ	Konstante im Ablaufplan bei Simulated Annealing	[–]
$\gamma(n, x)$	Integral der unvollendeten Gammafunktion	
$\Gamma(n)$	Gammafunktion	
λ_i	i -te Eigenwert	
λ	Konstante in der Box-Cox-Transformation	
ω	Zufällige Zahl in (0,1)	
$\omega, \omega(\Theta, z)$	Quellen- und Senkenterm in einer Kontinuitätsgleichung	[L ³ /T]
ω_i	Gewichte einzelner Zielfunktionen in der Mehrziel-Optimierung	[–]
ψ	Hydraulisches Potential	[L]
τ	Zeitvariable	[T]
Θ	Effektiver Wassergehalt	[–]
Θ	Jackknife-Statistik	
a	Parameter des nichtlinearen Speichers	[T]
a	Konstante für den Aufbau der Gewichte bei der Mehrziel-Optimierung	
a_{ij}, a_i	Koeffizienten einer linearen Regression	
A	Durchgeflossene Fläche	[L ²]
A_n	Mittlere Fläche von n Teileinzugsgebieten	[L ²]
A	Fläche eines Einzugsgebietes	[L ²]
b	Parameter des nichtlinearen Speichers	[–]
b_{ij}	Beiwerte der Beziehungen zwischen den Variablen eines Datensatzes und seinen Eigenvektoren	

Verzeichnis der Formelzeichen

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
B	Mittlere Breite eines Ensembles von Lösungen normiert mit dem gemessenen Wert	[-]
BFI	Basisabflussindex	[-]
\overline{BFI}	Basisabflussindex gemittelt über mehrere Separationsverfahren	[-]
BFI_n	Basisabflussindex für eine Raumeinheit aggregiert über n Teileinzugsgebiete	[-]
$BFI_{max},$ BFI_{min}	Größter und kleinster Basisabflussindex für mehrere Separationsverfahren	[-]
$BK1$	Geologische Klasse: Paläozoikum des Bayerischen und Oberpfälzer Waldes	
$BK2$	Geologische Klasse: Alpine magmatische und metamorphe Gesteine	
$BK3$	Geologische Klasse: Kalkalpen	
$BK4$	Geologische Klasse: Außeralpiner Jura (Lias und Dogger) und Trias	
$BK5$	Geologische Klasse: Malm, Karstaquifer	
$BK6$	Geologische Klasse: Außeralpine Kreide	
$BK7$	Geologische Klasse: Tertiär	
$BK8$	Geologische Klasse: Quartäre Moränensedimente	
$BK9$	Geologische Klasse: Impaktgesteine des Nördlinger Rieses	
$BK10$	Geologische Klasse: Quartäre alluviale Aquifer	
c_i	Konstante in der Lanczos-Schätzung des Integrals des unvollendeten Gammafunktion	
c_i	Parameter des Digital-Filter-Separationsverfahrens	[-]
C_p	Mallows-Statistik	
d	Konstante für die Definition der Akzeptanzgrenze bei der GLUE-Analyse	
d_{sk}	Dimensionalität einer linearen Speicherkaskade	[-]
d_N	Zeitverzögerung zwischen Infiltration und effektiven Grundwasserneubildung	[T]
dt	Länge des Zeitschrittes	[T]
D	Dimensionalität eines Modells	[-]
D	Diffusionskoeffizient	[L ²]
D_{KS}	Maximaler absoluter Unterschied zwischen zwei kumulierten Wahrscheinlichkeitsverteilungen	
\mathcal{D}_1	Fraktale Box-Counting-Dimension eines Datensatzes	[-]
\mathcal{D}_2	Fraktale Korrelation-Dimension eines Datensatzes	[-]
e	Euler'sche Zahl (Basis des natürlichen Logarithmus)	
eV	erklärte Varianz (bei der Hauptkomponentenanalyse)	[%]
E	Thermodynamische freie Energie eines Systems	[ML ² /T ²]
E_1	Modelleinheit für den Oberflächenabfluss	
E_2	Modelleinheit für den Zwischenabfluss	

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
E_3	Modelleinheit für die vertikale Sickerung im Sickerraum	
E_4	Modelleinheit für die Grundwasserströmung	
E_5	Modelleinheit für das Routen der Ganglinie in Gerinnen	
$f(\vec{x})$	Zielfunktion eines Modells evaluiert im einen Punkt im Parameterraum	
$g(dt, t)$	Übertragungsfunktion (Transferfunktion) eines linearen Systems	
$g(t, m)$	Dreieckseinheitsganglinie im HBV-Modell	
$GW N(i)$	Grundwasserneubildung	$[L^3/T]$
G_i	Übertragungsfunktion in der Regionalisierung	
h, H	Piezometrische Höhe	$[L]$
H_{mes}	Gemessene piezometrische Höhe	$[L]$
H_{sim}	Berechnete piezometrische Höhe	$[L]$
$h(t)$	Übergangsfunktion eines linearen Systems	
I	Anteil der Messwerte, die von einem berechneten Ensemble eingeschlossen werden	$[\%]$
I_e	Reibungsgefälle	$[L]$
I_s	Gerinnegefälle	$[L]$
k, k_i, K	Speicherkonstante eines Einzellinearspeichers	$[T]$
k_b	Boltzmanns Konstante	$[ML^2/T^2 \cdot K]$
$k_f(\Theta), k_f$	Hydraulische Durchlässigkeit	$[L/T]$
K	Personsche-Korrelation und -Korrelationsmatrix	
K_{Gr}	Personsche-Korrelation zwischen berechneten und gemessenen Grundwasserständen	
L	Fließlänge	$[L]$
L	Parameter des HBV-Modells	$[L]$
m	Mächtigkeit eines Aquifers	$[L]$
m	Parameter des HBV-Modells	$[T]$
MHQ	mittlere Hochwasserabfluss	$[L^3/T]$
MNQ	mittlere Niedrigwasserabfluss	$[L^3/T]$
MQ	mittlere Abfluss	$[L^3/T]$
n, n_i	Anzahl der Mitglieder (Speicher, Parameter, Messdaten, Permutationen) in einem Datensatz, Modell usw.	
n_i, k_i	Parameter der linearen Speicherkaskade für die Modelleinheit E_i	$[-]$ und $[d]$
n_p	Anzahl der Datensätze in der Regression	
n_{par}	Anzahl der Parameter in der Regression	
N	Zeitabstand nach dem Scheitelpunkt, ab wann der Basisabfluss startet	$[T]$
$N(i)$	Niederschlag	$[L^3/T]$
NS, NS_i	Nash-Sucliff-Effizienz	

Verzeichnis der Formelzeichen

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
NS_{dr}	Nash-Sucliff-Effizienz für den ansteigenden Teil der Abflusskurve	
NS_{ndr}	Nash-Sucliff-Effizienz für den absteigenden Teil der Abflusskurve	
NS_{tr}	Nash-Sucliff-Effizienz nach der Anwendung einer Box-Cox-Transformation	
O_i	Zielfunktion in der Mehrziel-Optimierung	
p_i	Parameter eines Modells	
$p(t)$	Eingangssignal in einem System	
$P_{Gebirge}$	Perkolation (aus der Bodenzone) über die Gebirgsregion	$[L^3/T]$
P_{Tal}	Perkolation (aus der Bodenzone) über den Talaquifer	$[L^3/T]$
$q(t)$	Eingangssignal in einem System	
$Q, Q_i, Q(t_i)$	Abfluss	$[L^3/T]$
\bar{Q}	Durchfluss gemittelt über die Zeitreihe	$[L^3/T]$
Q_{mes}	Gemessener Abfluss	$[L^3/T]$
Q_{sim}	Berechneter Abfluss	$[L^3/T]$
Q_B	Basisabfluss	$[L^3/T]$
Q_D	Direktabfluss	$[L^3/T]$
$P(E)$	Boltzmann-Wahrscheinlichkeitsverteilung der freien Energie E	
\mathbb{P}^n	Zulässigen Parameterraum eines Modells mit n Parametern	
\mathbb{R}^n	Euklid'sche Raum mit n Dimensionen	
R^2	Bestimmtheitsmass	
R_n^2	Bestimmtheitsmass für eine Regression mit n Parametern	
$r_{XY}(k)$	Korrelogram (lineare Kreuzkorrelation zwischen den Zeitreihen X_t und Y_{t+k})	
rs	Reststreuung	
RTS	Antwortzeitskala des Einzugsgebietes	$[T]$
s	Separationsparameter zwischen Zwischenabfluss und vertikaler Sickerung	$[-]$
S	Speicherkoefizient (speichernutzbare Porosität) eines Gesteins	$[-]$
$S(t)$	Speicherinhalt eines Einzellinearspeichers	$[L^3]$
SAE	1 - Summe der absoluten Fehler normiert mit der Summe der gemessenen Werten	$[-]$
t, t'	Zeitvariable	$[T]$
t_0	Anfangszeit einer Berechnung	$[T]$
T_0	Anfangstemperatur bei Simulated Annealing	$[^\circ C]$
T	Temperatur bei Simulated Annealing	$[^\circ C]$
T_{korr}	Obere Grenze der Korrelationszeit bei dem Korrelogram	$[T]$

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
t_{sk}	Obere Grenze des Integrationsintervalls für eine lineare Speicherkaskade	[T]
u	Wellengeschwindigkeit	[L/T]
UB	Normierten Unterschied zwischen den 25 % und 75 % Quantilen einer Verteilung	[%]
\vec{v}_i	i -te Eigenvektor (entspricht dem Eigenwert λ_i)	
x	Ortskoordinate	[L]
x	Variable im Integral der unvollendeten Gammafunktion	
\vec{x}, \vec{x}_i	Punkt im Parameterraum	
x_{ij}, x_i	Unabhängige Variable in einer Regression	
y	Ortskoordinate	[L]
y_j	Gemessene Abhängige Variable in einer Regression	
\hat{y}_j	Berechnete Abhängige Variable in einer Regression	
z	Ortskoordinate	[L]

Abstract

Introduction

In response to global climate change, research in the field of regional water cycle dynamics needs to assess the impact of the potential long-term evolution of the climatic conditions, but also of changes in land, water use and in other socio-economical aspects. This places new demands on water balance models. Efficient hydrologic models, which after intensive calibration can accurately reproduce the total measured river discharge at a given catchment gauge, do not fulfil these demands. Many additional state and process variables characterising the water cycle are now also required to understand and predict the changes in water bodies in a particular catchment. The spatially distributed groundwater level and soil water content or the effective groundwater recharge and discharge are examples of such variables that numerical models must be able to compute. Another issue is that the typical calibration procedure based on historically measured data may not be suited to fit parameters, which, due to global changes, have to perform in very different conditions than those contained in the available data. In brief, the context of global change requires more physically-based modelling of the water balance in regional catchments.

Discharge concentration in numerical water balance models is usually represented by three modules: the first uses the Richards equation to solve the vertical movement of water in the thin unsaturated soil (root) zone, the second uses the Boussinesq equation to consider the flow in the saturated groundwater zone, and the third uses a simplification of the Saint-Venant equations to route the discharge through the surface river network. This “classical” scheme ignores however that in catchments with a strong surface morphology the soil zone and the regional groundwater zone may be separated by a space, which can be several hundreds meters thick and where vertical percolation and horizontal flow caused by small scale formations of lower permeability can have a significant influence on the water balance (see Figure 0.1). The separation inside the percolation zone between the vertical component which ends as groundwater recharge and the horizontal component, exfiltrating as interflow to the surface, can no longer be neglected if the objective is to obtain an accurate representation of the hydrological processes.

The difficulty in the explicit integration of the percolation zone in water balance models working at the regional level (mesoscale) is twofold. Firstly, the hydrologically significant water fluxes in the percolation zone are not determined by the average hydraulic properties of the porous media or of the rock, but by those of the highly conductive preferential flow paths or fractures. Whilst the average properties can be determined by point measurements (and then interpolated, upscaled etc.) mostly no deterministic information is available on the three-dimensional structure of the

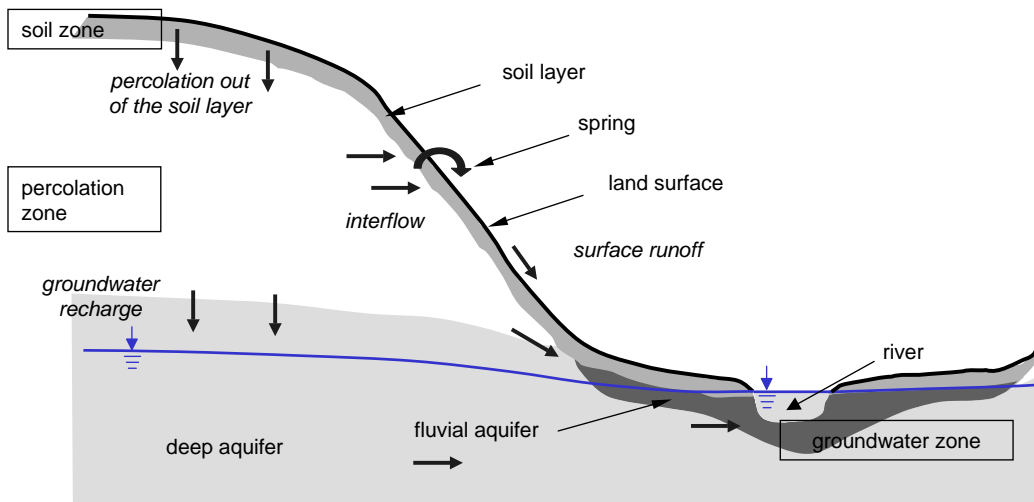


Figure 0.1: Basic scheme of the studied processes of discharge concentration.

preferential flow paths. Secondly, neither the input to the percolation zone (i.e. the percolation flux out of the soil zone) nor its output (i.e. the groundwater recharge and the interflow) can be quantified on the mesoscale using currently available measurement techniques. This is mainly due to the spatially-distributed character of these fluxes. Thus the task of integrating the percolation zone into water balance models is an attempt to model a system, for which its properties and its input and output signals are unknown.

The main aim of this dissertation is to investigate the hydrological modelling of the discharge concentration for mesoscale catchments with the incorporation of the percolation zone in a coupled water balance model. The quantification of the effective hydrologic properties and fluxes related to the percolation zone and the evaluation of the performance of the improved model as a whole are essential to achieving this aim. The work focuses on the Upper Danube Catchment (up to gauge Passau, 77.000 km²) and on two selected test subcatchments (Ammer and Naab, see Figure 0.2) and was carried out in the framework of the GLOWA-Danube project (see <http://www.glowa-danube.de> for more information).

Methodology

The choice of the methods to be used in modelling the percolation zones is directly related to the available information (measured data). For this study it mainly consisted of measured time-series of river discharge and groundwater level and measured meteorological parameters, all of which are point information. The spatially distributed topography is of course available, together with qualitative descriptions of land use, soil type and main hydrogeological units. Point estimations of the hydraulic properties of different underground formations were also used.

The work consists of three main steps, described in the paragraphs below.

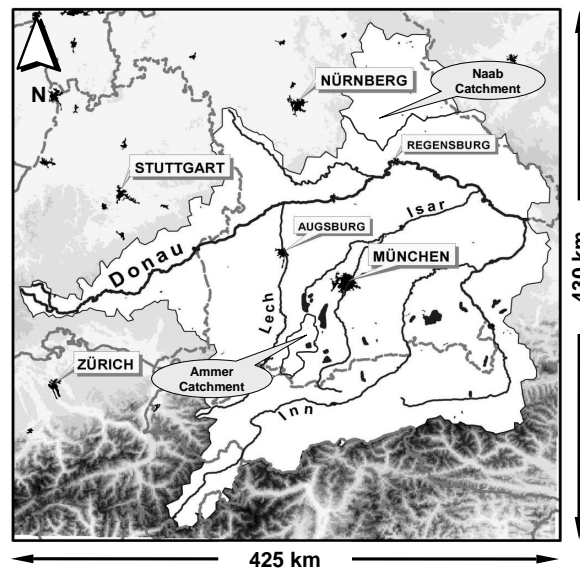


Figure 0.2: The Upper Danube Catchment.

1. Hydrograph analysis methods for river discharge time-series are very often applied when the quantification of the effective groundwater recharge and discharge, or of the interflow, is needed. The legitimacy of their application has however been contested by many critics, questioning their functioning principles and the validity of their results. The fact that this scientific dispute continues thirty years since its debut, reflects both the relevance and the necessity of the results of hydrograph analysis as well as the problems associated with it.

The present study aims to contribute to this debate by carrying out a detailed comparison and evaluation of twelve different algorithms, judged to be significant and representative of the entire spectrum of hydrograph separation methods. A computer program was developed, implementing the chosen methods and enabling a direct comparison of their results. Additionally, a new concept, which extended the area of applicability of the methods from the head catchments to all subcatchments of the studied area, was developed based on a river routing model and implemented as a part of the program. These tools were then used to analyse 209 hydrographs covering the entire Upper Danube catchment. The regionalisation of the results with the aim of increasing the justification basis for the hydrograph analysis completed this part of the study.

Based on this study the implemented separations methods were used not only to quantify the groundwater discharge and the interflow, but also to estimate the uncertainty and the justifiability of hydrograph analysis methods and their possible use in the modelling of the percolation zones.

2. A combination of physically-based and conceptual modules was used to build a new model structure, including the PROMET soil water balance model, the MODFLOW groundwater flow model and linear storage cascades unit for the horizontal and vertical flow in the percolation zone and in the river network. The implementation considered the flexibility of the model to ensure that changes and extensions are easily possible in a comprehensive modular approach.

The developed model was then applied and tested on the Ammer catchment, located in the transition zone between the alpine regions and the prealpine plains. A complex inverse modelling procedure was used to assess the uncertainty of the model results and in the determination of model parameters. For this purpose three main methods were used: a multi-objective optimisation approach, the GLUE method (evaluating the general and the individual sensitivity) and the principal component analysis (studying the interdependence relationships between the model parameters). The final results included the quantification of the water fluxes related to the percolation zone and of its effective parameters in the Ammer catchment.

Two different model versions were used to analyse the advantages and disadvantages of a physically-based approach relative to the uncertainty of the model results and of the model parameters. The first (Case 1) used a storage unit for the groundwater zone, whilst the second (Case 2) used the MODFLOW model. The additional application of the classic HBV rain-runoff model with a new degree of conceptuality insured a larger generality of the results.

3. The main weak point of inverse modelling is the fact that its results are restricted to the spatial unit they were determined on and are not directly transferable to other catchments, for which either the data or the computing resources may not be available. To tackle this issue a regionalisation approach was carried out, which connects the parameter values to the physical catchment properties. Along with permitting the quantification of the parameters for uncalibrated catchments, the regionalisation makes use of the qualitative understanding of the modelling results to state their plausibility.

Using post-calibration regression techniques for the regionalisation has the disadvantage of retaining or even increasing the structural uncertainty which is associated with inverse modelling. Directly integrating the regionalisation in the inverse modelling is an improved technique, which consists of calibrating not the values of the parameters, but the values of the coefficients, which connect the parameters to the physical properties. The important aspect is that these coefficients stay the same for all analysed catchments, thus conditioning the model to a larger variability of hydrologic patterns than it is the case for the individual calibration of every subcatchment.

This methodology was applied on the Ammer and on the Naab (at the boundary between Frankenalb and Oberpfälzer Wald) catchment. The estimations for the percolation zone fluxes were compared to those made in step 1 and step 2 to draw final conclusions on the quality of the three methods and their applicability.

Use of Hydrograph Analysis Methods to Determine Discharge Components

The extended literature research identified twelve hydrograph separation methods characterising the entire spectrum of existing algorithms. They were classified in five groups, which were built after their functioning principles: graphical methods (Fixed-Interval, Sliding-Interval, Local-Minima, Smoothed-Minima), statistical methods (Wundt, Kille, LfW), methods based on recession analysis (Rora, Wittenberg, DIFGA), filter methods (Digital-Filter) and analytical methods (Fury-Gupta). All methods separate the hydrograph into at least two components: a direct discharge,

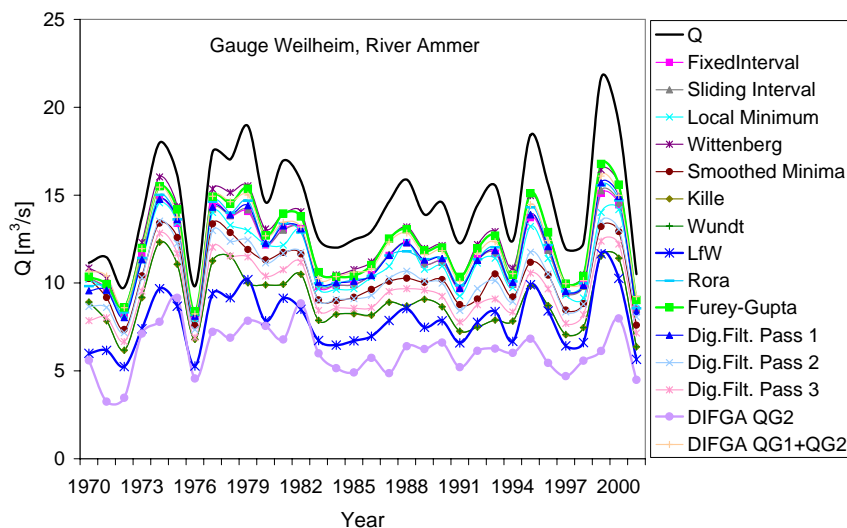


Figure 0.3: Hydrograph separation for the gauge Weilheim, river Ammer - yearly means

mostly identified as surface runoff, and a baseflow, identified as groundwater discharge or as the sum of groundwater discharge and interflow. One method, DIFGA, separates three components, making the distinction between groundwater discharge and interflow.

The main outcomes of the parallel application of the twelve methods on 209 hydrographs with daily discharge values of the Upper Danube catchment are as follows:

- The different separation algorithms lead, when aggregated on coarser time scales, to lines that are so similar in their dynamics, that they can be characterised as quasi-parallel (see Figure 0.3). The average linear correlation between the results of all methods averaged over all hydrographs was 0.92 on the monthly scale and 0.94 on the yearly scale. As they are almost identical in their dynamics, the baseflow index BFI (the ratio between the average baseflow and the average total discharge) is a sufficient indicator for the characterisation of each method. Some algorithms systematically compute high BFI values (Fixed-Interval, Rora, Wittenberg, DIFGA-QG1+QG2) while others systematically compute low BFI values (LfW, Kille, DIFGA-QG2). Thus it is enough to apply only two separation methods to cover the entire interval of results: one for the upper BFI limit and one for the lower limit. The two DIFGA components are appropriate, but other pairs, which are easier to compute, (e.g. Digital-Filter and LfW) can also be used.
- The results of the separation methods are strongly correlated with the size of the subcatchment, if this is too large. The critical range lies between 1000 and 1300 km², which concurs with values given in the literature. This result, probably explained by the heterogeneity of the rain field, sets a clear upper limit for the applicability of hydrograph analysis methods.
- All separation methods have a strong non-additive behaviour. Their additivity

could be tested for the first time in this study due to the method developed here for computing hydrographs for subcatchments. The baseflow of one catchment is computed as the sum of the baseflows of its subcatchments. Depending on the number of available gauges one can build several combinations of such subcatchments, which form the original catchment when aggregated. Without exception, the results show large differences for different aggregations: the higher the average size of subcatchments for which the baseflow was calculated, the higher the aggregated baseflow.

The most plausible explanation for this is given by the impact of the hydraulic attenuation of the hydrograph during its course in the river network, attenuation that overwrites the signature of the catchment and falsifies the amount of separated baseflow. The first consequence is that BFI values computed on different space scales are not directly comparable. Furthermore the general relevance of the separation methods is undermined, as it is not clear how to take into consideration the influence of the space scale.

For this study the most significant outcome is the definition of the BFI range characterising all tested separation methods. There are two physical interpretations, which can be given to this. Firstly, one could see the range as a plausibility interval or as an estimation of the uncertainty, with which one can compute the baseflow. Although relatively sound, this interpretation is not very helpful in determining individual discharge components, as it provides no indication of the relationship between the baseflow and the groundwater discharge and interflow.

More interesting however is the second interpretation. One could associate the BFI range with the amount of interflow and the lower limit of the range with the groundwater discharge. Along with some literature sources, this statement could be at least partially supported in this study by the regionalisation of the baseflow values and by the use of three hydrograph analysis methods other than separation algorithms. The final outcome is the estimated percentages of groundwater and interflow out of the total river discharge for each subcatchment in the Upper Danube catchment. The higher interflow fractions in the Alps, especially in the non-karstic southern Alps, and in the north-east of the catchment, around the Bayerischer and Oberpfälzer Wald, could be calculated, as well as the groundwater/interflow separation in the Molasse region. However the fact that these estimations cannot be fully validated suggests caution be used when working with them.

Hydrological Modelling of Discharge Concentration. Case Study Ammer Catchment

One difficulty encountered when building the model structure of discharge concentration, which explicitly integrated the percolation zone, is the presence of deep aquifers (see Figure 0.1) in which the groundwater flow does not respect the division in subcatchments based on the surface morphology. The consequence is that subcatchments are no longer independent hydrologic systems with a known output (the measured river discharge at the gauge) and a known input (the effective precipitation on its surface). The present study has therefore been restricted to cases where the deep

aquifer can be ignored and the alluvial aquifer alone represents the groundwater zone. This is the case mainly in mountainous regions and in catchments where the deep aquifer is several orders of magnitude less permeable than the alluvial aquifer and his significance for the yearly hydrological cycle can be neglected. The 700 km² large Ammer catchment fulfils these conditions, which, along with the very good data availability, justify its selection as a case study.

The results of the soil water balance model PROMET were computed and made available to the author by Dr. Ralf Ludwig, Ludwig Maximilian Universität Munich. The geometry and the parameterisation of the finite-difference groundwater flow model in the Ammer catchment were carried out by Dipl.-Geol. Jens Wolf, Institute for Hydraulic Engineering Universität Stuttgart, and was also made available to the author. The parameters of the two sectoral models were kept fixed during the simulations and not calibrated together with the modules representing the percolation zone.

The complementary use of the multi-objective optimisation and of the GLUE procedure proved to be an appropriate methodology to evaluate comprehensively the model structure developed here and its behaviour. They both give independent estimations of the upper achievable limit of model performance, of the structural uncertainty in the model results and in the parameter determination. The subsequent application of the principal component analysis identifies the main interdependency relationships between parameters and quantifies the overparametrisation.

For the majority of the subcatchments good and very good results could be obtained after the inverse modelling procedure for both model versions, Case 1 and Case 2. The simulations reproduced well all parts of hydrographs; version Case 2 computed also the groundwater level and achieved a good fit to the measured values.

In the alpine part of the catchment the performance was affected by the partially erroneous PROMET results. The integration of the MODFLOW model in Case 2 also led to a slight worsening of the results. PROMET and MODFLOW are numerical implementations of the fundamental equations for the flow in the unsaturated and the saturated zone and their parameters are edited values of physical measurements. The two models also underwent a sectoral stand-alone calibration procedure, in which the set requirements were met. In spite of this their coupling to an integrative water balance model caused systematic discrepancies in the reproduction of the measured data. The conclusion is therefore:

- Calibrated parameters are valid effective values only in the context of their calibration. The validated computation of one variable cannot be automatically used as an argument to evaluate the performance of other non-validated computed variables. It is therefore imperative to calibrate an integrated modelling complex in an integrative way. The limitation to initial parameter values derived from field data and improved via sectoral calibration leads to less than optimal results of the integrated modelling complex. How strongly physically-based one model component is appears to be insignificant to this question.

Regarding the sources of the uncertainty in the parameter determination and the question of whether physically-interpretable parameter values can be calculated via inverse modelling, the following statements could be confirmed:

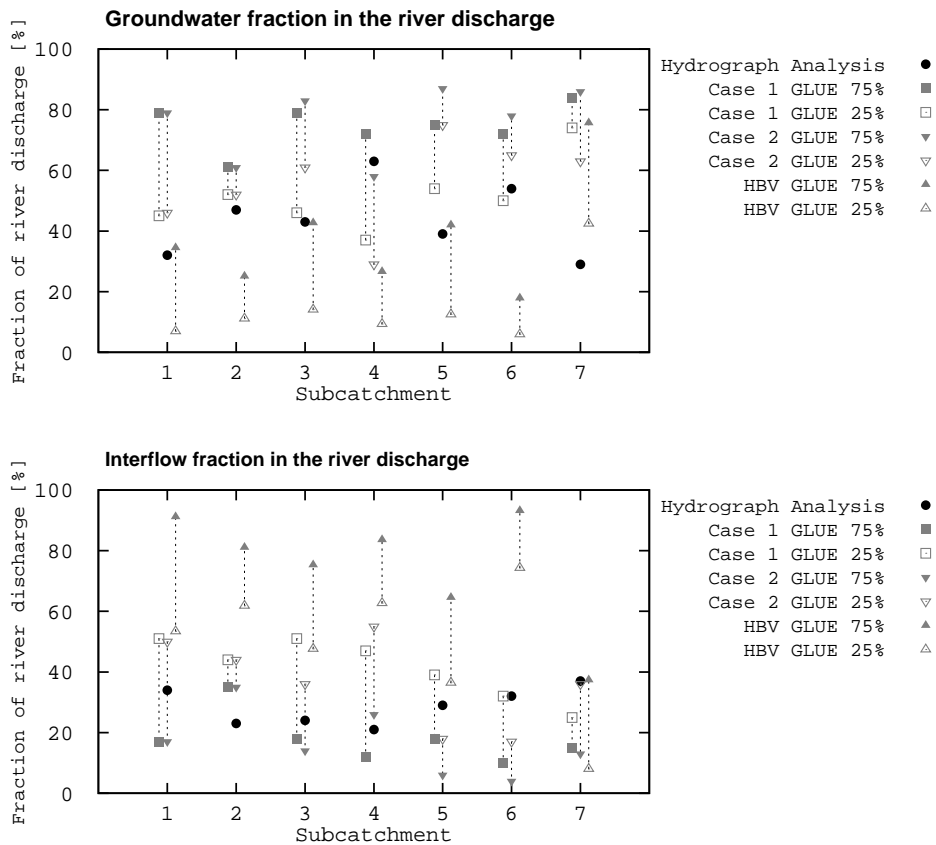


Figure 0.4: Summary of model results in the Ammer catchment. Three model versions were used (Case 1, Case 2 and HBV). The graphic presents the uncertainty range of the values, estimated by the [25% – 75%] quantile intervals of the GLUE behavioural solutions.

- The determination of individual parameter values via inverse modelling is affected by a large degree of uncertainty. The standard calibration to measured river discharge time-series does not condition the model enough to enable the calculation of physically interpretable values. The relative improvement achieved by using additional information in the calibration (measured groundwater levels) illustrated that conditioning the model to more variables proves to be a solution to the uncertainty problem. In this context physically-based models have a larger potential as they can consider more process and state variables.
- The sources of the parameter uncertainty lies in the structural interactions between parameters and between modules. The analysis and the identification of these interactions does not lead to a better understanding of the physical processes, but it does lead to a better understanding of the model behaviour. The interaction patterns are dependent on the model structure so that they vary strongly between different models.
- Due to the structural uncertainty and to the insufficient availability of direct measurements the inverse modelling cannot determine in an unambiguous way

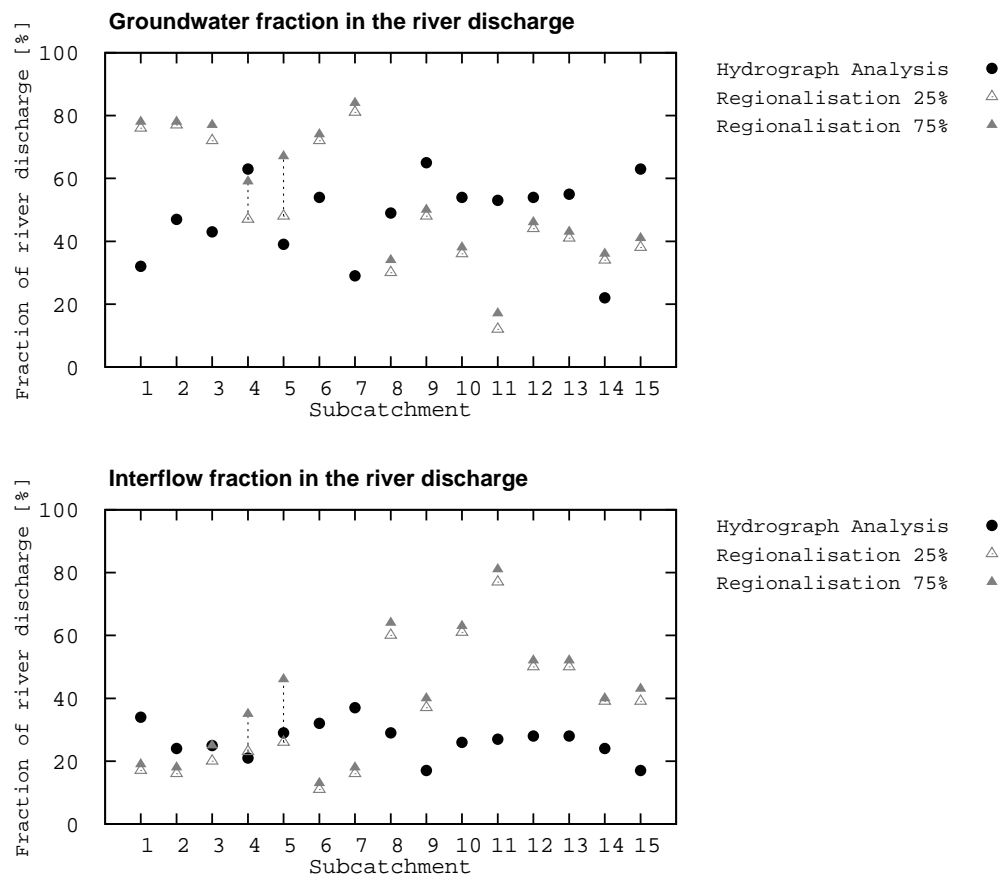


Figure 0.5: Summary of model results after the regionalisation approach in the Ammer and Naab catchments. The Case 1 model version was used. The graphic presents the uncertainty range of the values, estimated by the [25% – 75%] quantile intervals of the GLUE behavioural solutions.

internal results such as the separation between groundwater and interflow. Different models compute different results, the validity of which cannot be assessed without additional information (see Figure 0.4).

Coupling of the Calibration and of the Regionalisation of Model Parameters

After the partially unsatisfactory results (due to high structural uncertainties) yielded by the direct inverse modelling a new approach was applied. The successful integration of the regionalisation in the calibration process for the Ammer and the Naab catchment led to the following conclusions:

- For most of the studied subcatchments the good model performance, obtained during the direct inverse modelling, was conserved when using the regionalisation approach. It should be noted here that the invested CPU-time was significantly shorter for the latter case. The exceptions to the generally good

result were caused by a too coarse hydrogeological classification of the region, highlighting the sensitivity of the method relative to data misinterpretations.

- Applying the regionalising transfer functions after calibration on new subcatchments led to mainly good model performance. The comparison between two selections of catchments, on which the functions were calibrated, showed very stable results. This proves the potential of the approach for large mesoscale catchments: the model has to be calibrated only for a small (but representative from the point of view of the physical properties) number of subcatchments and can then be applied directly on the rest of the area. Beside the economy in CPU time it is important to note the possibility of applying it on ungauged basins.
- The most important advantage of the method is the simultaneous conditioning of the model to the performance in several catchments. This leads to a better parameter determinability and solves the uncertainty issue. Thus the regionalisation approach not only saves computer resources, but also delivers more reliable and trustworthy results. It also allows, via the interpretation of the transfer function, a test of the model's physical plausibility. Well determined parameters mean a low uncertainty for the internal model results, too (see Figure 0.5). Considering all this range of improvements, the relatively slight decrease in performance, the only disadvantage identified, is not seen as too high price to pay.

The interpretation of the results in the Ammer and Naab catchments led to the following findings:

- Data from literature sources could be confirmed by showing that the groundwater zone is the hydrologic significant zone for unconsolidated sediments and karstic formations, while the percolation zone dominates in fractured rocks.
- The interflow associated with the percolation zone was proved to be a very fast component, with reaction time in the range of a few days.
- The groundwater zone was characterised by values of the storage coefficients in the interval 140 – 250 days. Their interpretation as mean reaction times was however hindered by a fundamental problem of the storage cascade model used. A systematic overestimation of its parameter values seems to have a negative influence when applied to slow discharge components.
- The comparison between modelling and hydrograph analysis results showed no agreement. The amount of measured information used in the models is clearly larger, indicating that their results are most probably more reliable. The justification for the direct use of hydrograph analysis to support modelling studies could therefore not be established.

Hydrological Modelling of the Percolation Zone

Based on the presented findings of this study, the following main conclusions on the possibility to explicitly model the percolation zone in the framework of an integrative hydrologic modelling complex have been drawn:

- No conclusive evidence could be found, to support the use of hydrograph analysis methods to determine the groundwater discharge and interflow time series. One should concentrate less on the absolute values of the groundwater discharge and interflow, calculated by the separation algorithms, and more on the dynamic information the methods provide. The dynamic information (e.g. the damped and retarded character of the groundwater hydrograph relative to the river hydrograph) is physically better founded and may prove more reliable.
- The percolation zone could be successfully integrated into a hydrological model. Providing a more accurate representation of the real structure of the discharge concentration, the integrated model has a higher flexibility than the classical soil-groundwater-river network scheme. The use of a process based groundwater flow module can add the spatially distributed groundwater level and groundwater flow field to the list of computed variables and thus increase the significance of the results. The additional model conditioning to measured groundwater levels and to measured hydraulic properties of the aquifers led to a better determinability of the parameters during the calibration. The improvement is however not large enough to reduce the structural uncertainty to an acceptable level.
- The explicit modelling of the percolation zone could be successfully completed by solving the uncertainty issue through coupling of the calibration with a regionalisation procedure. The simultaneous conditioning to the performance in several catchments led to a very good parameter determinability. With this, both the developed model and the chosen modelling strategy can now be used in mesoscale studies with justifiable expectations for good model performance and well determined parameter values. The use of the model results to draw conclusions on the physical processes in the percolation zone was also legitimated.

The aim of determining the hydrologically relevant physical properties of the percolation zone in such a way that the computed values are also valid outside the immediate modelling context has only been partially achieved. The lack of direct data related to the percolation zone required the use of a generic mathematical function (the integral of the incomplete gamma function, the mathematical form of the linear storage cascade) for the modelling of the flow processes. With this function the given modelling tasks could be solved, its conceptuality constricted however the interpretation of its parameters as effective physical properties. To achieve this goal the development of a new theoretical model is needed, which should integrate, in a more physically based manner, the vertical flow in the unsaturated zone with the horizontal flow in the perched (small scale) aquifers under consideration of the preferential flow paths. The model should not only reproduce correctly the involved processes but also remain efficient, as its parameters have to be determined using hydrological inverse modelling methods. Developing such a model is a considerable research task, which would have gone beyond the scope of the present study.

Closing Remarks

The reproduction of river discharge time series by hydrologic models is usually an achievable task. A wide range of available models together with optimisation algorithms and measured data over a long enough period of time solve this problem regularly and efficiently. The utilisation of the model under new climatic and socio-economic conditions, the objective of obtaining more from the model than the river discharge, and the desire for a greater physical interpretability of the parameters are still research questions waiting for a definitive answer. As long as no deterministic measurement of the three-dimensional structure and properties of the underground is possible, the true physically-based modelling of catchment hydrology will remain a fantasy. However, this does not mean that the aim is futile.

The presented study confirmed many other literature results by proving that the integration of additional measured information beside the river discharge and point precipitation is correct approach to deal with this challenge. The integration can be direct, by increasing the complexity of the model and its capacity to compute more process and state variables. An example of this approach was the coupling of the groundwater flow model. An indirect approach using the additional information in the modelling strategy, such as combining the inverse modelling procedure with a regionalisation one, can be also chosen.

Although both approaches have their weaknesses, they make essential contributions to the solution of the problem. More should be done in this area with the aim not only to increase the parameter determinability, but also to test more systematically the model structure and to be able to adapt it to the specific characteristics of one catchment. Additionally, the more intensive measurement of water quality indicators along its cycle (e.g. temperature, concentration of different chemical substances) and their more thorough coupling with the description of the processes could extend the potential of the proposed methods, a potential for a better and more valuable quantitative hydrology.

Zusammenfassung

Die physikalisch-basierte Modellierung der Abflusskonzentrationsprozesse in einem Einzugsgebiet wird üblicherweise auf die Modellierung von drei strikt von einander abgetrennten Teilen, dem Boden- (Wurzel-) Raum, dem Grundwasserraum und den Oberflächengewässern, reduziert. Dieses Schema vernachlässigt allerdings, dass sich zwischen dem Boden- und dem Grundwasserraum ein weiterer Bereich befindet, der hier als Sickerraum bezeichnet wird und der aus demjenigen Teil der ungesättigten Zone besteht, der nicht dem Bodenraum zugerechnet wird. Für größere Einzugsgebiete treten im Sickerraum, der bis zu mehreren hundert Metern mächtig sein kann, auch kleinere schwebende gesättigte Bereiche auf, was dazu führt, dass die Strömungsrichtung im Sickerraum nicht nur vertikal, sondern auch horizontal ist. Die Vernachlässigung der dort stattfindenden Prozesse schränkt die Aussagekraft des Gesamtmodells deutlich ein. Deshalb wurde die Modellierung der Abflusskonzentration unter Berücksichtigung der hydrologischen Rolle des Sickerraumes als Hauptthema dieser Arbeit ausgewählt. Untersuchungseinheiten sind das Einzugsgebiet der Oberen Donau (bis zum Pegel Passau-Achleiten, 77.000 km²), das ein Forschungsschwerpunkt des BMBF-Projektverbundes GLOWA ist, und zwei ausgewählte Teileinzugsgebiete (Ammer und Naab).

Der erste Schritt ist eine umfassende Untersuchung über die Anwendbarkeit von Ganglinienanalyseverfahren für die Abtrennung des Grundwasser- und Sickerraumabflusses von der gemessenen Gesamtabflussganglinie. Ein numerisches Programm, das erstmals zwölf relevante Ganglinienanalyseverfahren in einem einheitlichen Rahmen implementiert, wurde hier entwickelt und auf Ganglinien aus dem gesamten Gebiet der Oberen Donau angewandt. Die Analyse der Ergebnisse, ihrer Abhängigkeit von der Raum und Zeitskala, sowie ihrer Verbindung zu den Gebietseigenschaften führte zu neuen Erkenntnissen über die Verfahren. Eine Schätzung des Grundwasser- und Sickerraumabflusses konnte damit für jedes Teileinzugsgebiet berechnet werden. Die Analyse zeigt aber auch, dass die Verfahren mit Inkonsistenzen und Willkürlichkeiten behaftet sind, was nicht zu einer Anwendung ihrer Ergebnisse für quantitative Aussagen ermutigt.

Im zweiten Schritt wurde ein neues Modellkonzept, das die explizite Betrachtung des Sickerraumes ermöglicht und damit die Modellierungslücke zwischen dem Bodenwasserhaushalts- und dem Grundwassermodell schließt, entwickelt, implementiert und auf das Gebiet der Ammer angewandt. Nicht nur die Modellgüte, sondern auch die Unsicherheit der Modellergebnisse und bei der Bestimmung der Modellparameter, die generalisierte und einzelne Sensitivität des Modells im Parameterraum, sowie die Wechselbeziehungen zwischen den Modellparametern wurden ausführlich untersucht. Mehrere Modellversionen mit unterschiedlichen Graden an Konzeptualisierung wurden dabei verglichen. Trotz der allgemein guten Anpassung der Modellergebnisse an die Modelldaten, konnten anhand der inversen Modellierung auf

Zusammenfassung

Grund der strukturellen Unsicherheit des Modells und der Eingangsdaten keine gut bestimmten Parameterwerte für den Sickerraum berechnet werden. Das führte dazu, dass interne Modellergebnisse wie der Grundwasserabfluss und der Sickerraumabfluss auch von einer großen Unsicherheit behaftet waren. Die allgemeine Erkenntnis ist, dass nur die Modellergebnisse, die anhand von Messdaten direkt geprüft werden können, als validiert und aussagekräftig gelten sollten.

Um das Problem der strukturellen Unsicherheit zu lösen, wurde in einem dritten Schritt die Methode der inversen Modellierung erweitert und verbessert. Ein Regionalisierungsverfahren, das die Modellparameter mit den Gebietseigenschaften mit Hilfe von linearen Beziehungen verbindet, wurde in den Kalibrierungsprozess direkt integriert. Der Ansatz wurde auf die Einzugsgebiete der Ammer und der Naab angewandt und lieferte gute Modellergebnisse und führte gleichzeitig zu einer viel geringeren strukturellen Unsicherheit des Modells. Durch die Interpretation der linearen Beziehungen konnten auch Schlüsse über die physikalische Plausibilität des Modells gezogen werden.

1 Einführung

1.1 Motivation

So wichtig und entscheidend der Wasserkreislauf für uns alle ist, so kompliziert ist es, ihn exakt zu beschreiben. Von der Entstehung der Wolken in der Atmosphäre bis zum langsamen Fließen im tiefen Untergrund spielen sich die physikalischen Prozesse auf Räumen ab, deren Größe von wenigen Millimetern bis hin zu vielen Kilometern variiert, und das in Zeiträumen von Sekunden bis hin zu vielen Jahren. Viele der Prozesse bleiben für uns unsichtbar, da sie sich unter der Erdoberfläche abspielen. Deswegen bleibt das Verständnis des Wasserkreislaufes oft eingeschränkt.

Es ist jedoch unbedingt notwendig, dieses Verständnis zu erweitern, um die vielen Unsicherheiten, denen wir angesichts der langfristigen klimatischen Änderungen¹ aber auch der Änderungen in der Land- und Wassernutzung noch gegenüberstehen, besser zu quantifizieren.

Effiziente und zuverlässige Werkzeuge sind notwendig, um unsere Entscheidungen zu unterstützen, um vorausschauende Planung und Lenkung zu ermöglichen und somit eine nachhaltige Entwicklung des Wasserkreislaufes sicher zu stellen. Hydrologische Wasserhaushaltsmodelle von großen Flusseinzugsgebieten sind solche notwendigen Werkzeuge, mit denen die Auswirkungen klimatischer und anderer anthropogener Einflüsse untersucht und definiert werden können. Innerhalb dieser Modelle ist eine integrative Betrachtung der hydrologischen Prozesse in einem Einzugsgebiet von höchster Wichtigkeit für ihre Aussagekraft. Dabei stellt sich die Frage, wie komplex solche Modelle sein müssen, um den gestellten Anforderungen gerecht zu werden. Zwischen idealen vollständig prozess-basierten Ansätzen und Black-Box Modellen gibt es viele Zwischenstufen, die alle gewisse Vor- und Nachteile bezüglich der Vollständigkeit, Genauigkeit und Unsicherheit ihrer Ergebnisse und ihrer Parameter (SNOWLING und KRAMER 2001) aufweisen.

Eine wichtige Herausforderung des „global change“-Kontextes ist, dass der Wasserkreislauf unter vorher nicht beobachteten Bedingungen modelliert werden muss. Dies begründet das Streben nach einer möglichst prozess-basierten Lösung, die auf unveränderbaren physikalischen Gesetzen beruht und die damit zu zuverlässigeren Vorhersagen führen sollte (FREEZE und HARLAN 1969). Die Berechtigung eines solchen Ansatzes ist aber wegen der großen Menge an benötigten Daten, der großen Anzahl an Parametern und des Skalenunterschiedes zwischen der mathematischen Formulierung eines Gesetzes und seiner Anwendung umstritten (BEVEN 1989, GRAYSON et al. 1992). Deswegen werden Lösungen benötigt, die einen bestmöglichen Kompromiss zwischen Modellanforderungen und Modellproblemen finden.

Die theoretischen und technischen Fortschritte der letzten Jahrzehnte haben dazu

¹das Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) geht in ihrem Bericht von 2001 von einer Klimaerwärmung zwischen 1.4 und 5.8°C bis zum Jahre 2100 aus (IPCC 2001).

1 Einführung

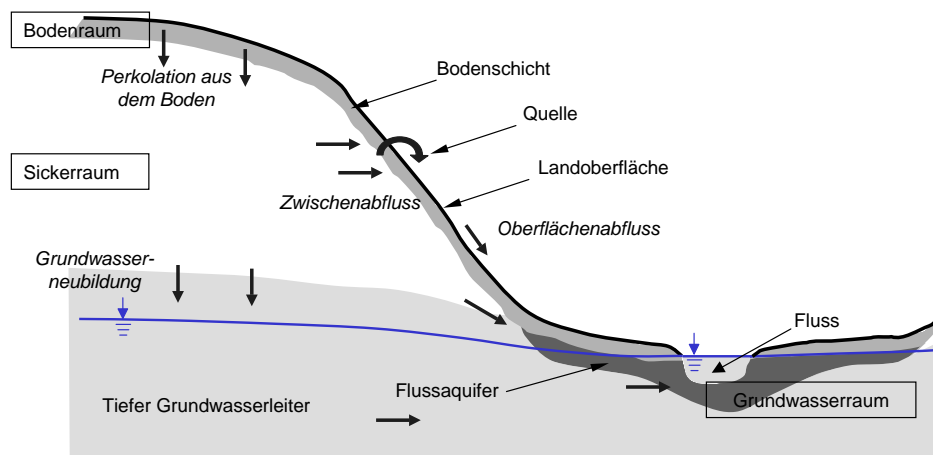


Abbildung 1.1: Prinzipschema der untersuchten Abflusskonzentrationsprozesse in einem Einzugsgebiet

geführt, dass die prozess-basierte Modellierung der hydrologischen Prozesse innerhalb einzelner Teile des Wasserkreislaufsystems erfolgreich und effizient möglich ist. Sektorale Modelle, die auf Richards-, Boussinesq- oder Vereinfachungen der Saint-Venant-Gleichungen basieren, haben ihre Anwendbarkeit oft bewiesen (LUDWIG 2000, LANG 1995, PLATE et al. 1997). Die Voraussetzung dafür ist jedoch die korrekte Definition der Randbedingungen, die dem Modell erlauben, die Wasserflüsse durch den analysierten physikalischen Raum als ein geschlossenes mathematisches Problem zu lösen. Um sich auf dieses Kernproblem zu konzentrieren, machen solche sektoralen Modelle jedoch vereinfachende Annahmen über die Randbedingungen, die die Austauschvariablen zu den anderen Teilen des hydrologischen Systems verkörpern. So werden zum Beispiel für ein Grundwasserströmungsmodell üblicherweise einfache Wasserbilanzmethoden oder Infiltrationsmodelle, die die Komplexität der Fließprozesse in der ungesättigten Zone umgehen, für die Berechnung der Grundwasserneubildung verwendet (SCANLON et al. 2002).

Ein integratives prozess-basiertes Modell koppelt die sektoralen Modelle in einem einzigen, hydrologischen Modellkomplex. Hierbei werden die Daten für die Randbedingungen nicht mehr in der Preprocessing-Phase generiert, sondern während des Modelllaufes als Variablen zwischen den sektoralen Modellen, die jetzt Module des integrativen Modells sind, ausgetauscht. Durch die Kopplung der Module werden jedoch neue Fragestellungen und Probleme bezüglich der Hydrologie eines Einzugsgebietes aufgeworfen, die bisher vernachlässigt wurden.

Eine dieser Fragestellungen ist die Betrachtung des Sickerraumes als Grenzgebiet, das weder zum Boden- noch zum Grundwasserraum gehört (Abb. 1.1). Die hydrologische Modellierung der Abflusskonzentration in einem Wasserhaushaltsmodellkomplex unter expliziter Berücksichtigung des Sickerraumes und die Quantifizierung der im Sickerraum stattfindenden mesoskaligen hydrologischen Prozesse bilden das Hauptthema dieser Arbeit. Die Untersuchungen basieren dabei auf dem Einzugsgebiet der Oberen Donau sowie auf mehreren ausgesuchten Teileinzugsgebieten.

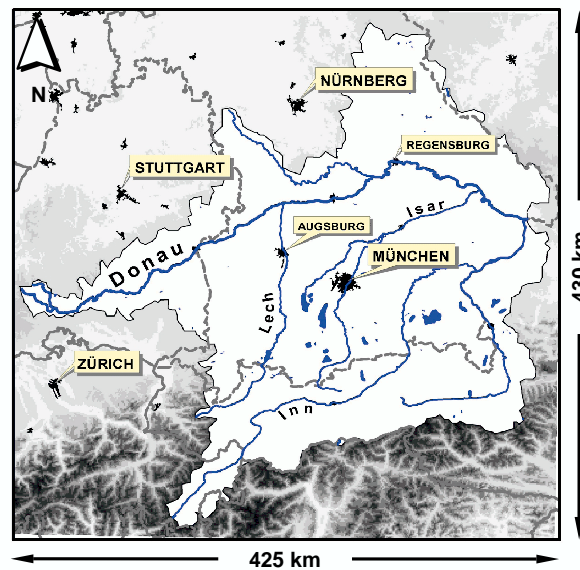


Abbildung 1.2: Das Einzugsgebiet der Oberen Donau.

Die vorliegende Untersuchung wurde im Rahmen des Projektverbunds GLOWA-Danube durchgeführt. GLOWA-Danube ist Teil des vom deutschen Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Forschungsschwerpunkts GLOWA (GLObaler WANdel des hydrologischen Kreislaufes). GLOWA befasst sich mit den Auswirkungen des Wandels der sozioökonomischen Randbedingungen und des globalen Klimas auf den Wasserkreislauf von Flusseinzugsgebieten und die daraus resultierende notwendige Entwicklung integrierter Strategien für eine nachhaltige Bewirtschaftung von Wasser und Gewässern im regionalen Maßstab (RIELAND 2004). Im Teilprojekt GLOWA-Danube entwickeln 13 Forschungsgruppen² prozessorientierte Teilmodelle für die rund 77.000 km² des Einzugsgebietes der Oberen Donau (Abbildung 1.2). Nach ihrer Verknüpfung sollen die Teilmodelle einen integrativen Modellkomplex für den gesamten Wasserkreislauf, sowohl aus hydrologischer als auch aus sozioökonomischer Sicht, bilden.

1.2 Problemstellung: Der Sickerraum als integratives Element eines hydrologischen Modellkomplexes

1.2.1 Definition der Begriffe

Abbildung 1.1 zeigt ein Prinzipschema der Abflusskonzentrationsprozesse für ein Einzugsgebiet sowie die üblicherweise angewandte Abgrenzung der Kompetenzräume einzelner sektoraler Modelle und stellt einige Hauptbegriffe, die in dieser Arbeit verwendet wurden, dar. Die räumliche Skala der Betrachtung, von der Gesamtgröße des Einzugsgebietes (77.000 km²) und von der Größe der Teileinzugsgebiete

²In der ersten Phase (2001-2004) waren am Projektverbund GLOWA-Danube 13 Forschungsgruppen an sechs Universitäten und Forschungseinrichtungen aus Bayern, Baden-Württemberg, Hessen und Tirol beteiligt, siehe <http://www.glowa.org>.

1 Einführung

(zwischen 50 und 5.000 km²) vorgegeben, gehört nach BECKER (1995) in den mittleren und oberen Bereich der Mesoskala, für die in dieser Arbeit auch das Adjektiv regional verwendet wurde. Nach dieser Klassifizierung geht die Mikroskala bis 1km², der untere Bereich der Mesoskala bis 25 km² und ab 100.000 km² spricht man von der Makroskala.

Der *Bodenraum* besteht aus der ersten Bodenschicht, der durchwurzelten Zone, unterhalb der Landoberfläche. Der Wasserhaushalt der Bodenzone kann von einem Bodenmodell anhand der Richards-Gleichung für die vertikale Strömung im ungesättigten Bereich modelliert und damit der Wasseraustausch durch die Landoberfläche (Infiltration oder Exfiltration) und durch die untere Grenze der Bodenzone (Perkolation aus dem Boden oder kapillarer Aufstieg) berechnet werden.

Der *Grundwasserraum* besteht aus sämtlichen Grundwasserleitern, die zum Betrachtungszeitpunkt mit Grundwasser gefüllt sind (DIN 4049). Der Grundwasserraum wird durch Grundwasserneubildung aus der ungesättigten Zone gespeist und durch den Grundwasserabfluss in die Oberflächengewässer entwässert (lokal kann auch Oberflächenwasser in den Grundwasserraum infiltrieren). Mit Hilfe des Darcy-Gesetzes lässt sich die Grundwasserströmung als eine Funktion des Gradienten der piezometrischen Grundwasserhöhen bestimmen. Nach der Diskretisierung des zu untersuchenden Grundwasserraumes in homogene Einheiten können das Grundwasserströmungsfeld und der Grundwasserspiegel jedes Grundwasserleiters unter Verwendung des Darcy-Gesetzes und der Kontinuitätsgleichung berechnet werden. Dazu wird ein numerisches Grundwassermodell verwendet.

Wie in Abbildung 1.1 zu sehen, befindet sich zwischen Boden- und Grundwasserraum der hier als *Sickerraum* bezeichnete Bereich. Der Sickerraum besteht aus demjenigen Teil der ungesättigten Zone, der nicht der Bodenzone zugerechnet wird (die hier verwendete Definition unterscheidet sich von der DIN 4049, die dem Sickerraum den gesamten Gesteinskörper, der zum Betrachtungszeitpunkt kein Grundwasser enthält, zurechnet).

Für ein untersuchtes Gebiet werden in numerischen Modellen nur die Grundwasserleiter explizit berücksichtigt, die, gemessen an der Größe des Gebietes, als relevant beurteilt werden. Kleinere Aquifere werden vernachlässigt und dem Grundwasserraum nicht zugerechnet, was dazu führt, dass im betrachteten Sickerraum auch schwebende gesättigte Bereiche auftreten können. Dies hat zur Folge, dass die Strömungsrichtung im Sickerraum nicht nur vertikal, sondern auch horizontal sehr bedeutsam sein kann. Der Sickerraum wird also an seiner oberen Grenze (mit der Bodenzone) durch Perkolation aus dem Boden (ab hier einfach Perkolation genannt) gespeist und an seiner unteren Grenze durch Grundwasserneubildung in den Grundwasserraum entwässert. Dazu kommt die Entwässerung durch die direkt an der Landoberfläche austretende horizontale Strömungskomponente (meistens Quellen), die hier unter dem Begriff Zwischenabfluss (der Sickerraum wird auch manchmal Zwischenzone genannt, MÜLLER 1999) zusammengefasst wird.

Aus dieser Definition ergibt sich, dass die Bedeutung des Sickerraumes für den Wasserkreislauf von der Problemstellung und ihrer Skala und von den hydrogeologischen Eigenschaften des Gebietes abhängt. Wenn sich die Studie auf einen kleinen Flussaquifer fokussiert, dessen Grundwasserspiegel bedingt durch die hydraulische Verbindung zum Fluss sehr nah an der Erdoberfläche liegt, hat der Sickerraum keine nennenswerte Bedeutung. Oft ist in diesem Fall die obere Grenze des Grund-

wasserraumes, der Grundwasserspiegel, sehr nah an der unteren Grenze, oder sogar innerhalb, der Bodenzone.

Für die Analyse mesoskaliger Einzugsgebiete mit einem ausgeprägten Relief, wie im Einzugsgebiet der Oberen Donau, kann der Sickerraum bis zu mehreren hundert Metern mächtig sein. Somit können weder die zeitliche Verschiebung und Transformation der vertikalen Komponente (von der Perkolation bis zur Grundwasserneubildung) noch die horizontale Komponente vernachlässigt werden. Weil der Zwischenabfluss eine schnellere Dynamik als der Basisabfluss hat, würde für ein hydrologisches Modell die Vernachlässigung des Sickerraumes durch die direkte Einspeisung der Perkolation als Grundwasserneubildung in den Grundwasserraum zu einer deutlich unterschätzten Dynamik der modellierten Gesamtabflüsse im Vorfluter führen. Zusätzlich zu diesem Aspekt würde aus der Vernachlässigung des Sickerraumes die Verwendung einer zu hohen Grundwasserneubildung für das Grundwassermodell resultieren, was zu einer starken Verfälschung der Parametrisierung und der Ergebnisse führen würde.

Ein Spezialfall des Sickerraumes tritt in den Gebirgsregionen auf, die im Einzugsgebiet der Oberen Donau ungefähr ein Drittel der Gesamtfläche ausmachen. Wegen der Festgesteinsformationen, die dort charakteristisch sind, herrscht eine von Klüften und Störungen dominierte Strömung unterhalb der Bodenzone. Es wird hier angenommen, dass der poröse tiefe Grundwasserleiter in Abbildung 1.1 nicht vorhanden ist und durch das undurchlässige Grundgebirge ersetzt wird. Dies führt dazu, dass die Grundwasserneubildung zur lateralen Infiltration in die sich im Tal befindlichen Flussaquifere reduziert wird. Zudem tritt auf Grund des starken Gefälles des Geländes ein großer Teil der Perkolation als Quellwasser wieder schnell an der Oberfläche aus und bildet somit einen Zwischenabfluss. Durch den orographischen Effekt der Gebirgsketten auf das Niederschlagsfeld fällt ein überdurchschnittlicher Anteil des Gesamtniederschlags des Einzugsgebietes im alpinen Bereich (GEERTS et al. 2002). Die Trennung der Perkolation in Grundwasserneubildung und Zwischenabfluss im Modell ist wegen der größeren Niederschlagsmengen besonders wichtig, so dass sowohl die Flussaquifere als auch die Flüsse die richtige Wassermenge ans Vorland abgeben.

1.2.2 Konzeptionelle und physikalische-basierte Ansätze in der hydrologischen Modellierung

Prinzipiell gibt es in der Hydrologie zwei Entwicklungsrichtungen für die Modellierung physikalischer Prozesse in einem Einzugsgebiet: man unterscheidet zwischen konzeptionellen und prozess-basierten (oder physikalisch-basierten) Modellen. Zusammengefasst gelten folgende Eigenschaften der beiden Ansätze (KRYSAKOVA et al. 1999, KOKKONEN und JAKEMAN 2001):

- In *konzeptionellen Modellen* ist das physikalische Prozessverständnis in einer vereinfachten, schematischen Form in das Modell integriert. Die Modellparameter können nicht direkt durch Feldmessungen bestimmt werden und die Modelle sind nur teilweise räumlich differenziert.
- In *prozess-basierten Modellen* werden die hydrologischen Prozesse durch Integration physikalischer Gesetze dargestellt. Die Modellparameter haben eine messbare Bedeutung und die Modelle sind räumlich differenziert. Sie haben

1 Einführung

zum Ziel, nicht nur bestimmte beobachtete Aspekte des hydrologischen Systems nachzurechnen, sondern das Verhalten des Systems in möglichst vielen seiner Teile zu verstehen.

Klassische konzeptionelle Einzugsgebietsmodelle (SINGH 1995) behandeln die Abflusskonzentration in einer sehr vereinfachten Form, durch räumlich aggregierte Wassertransporteinheiten, denen kein physikalischer Raum zugeordnet wird. Die Modelle haben als einziges Ergebnis den Gesamtabfluss des Einzugsgebietes (für eine Übersicht der wenigen Ausnahmen von dieser Regel siehe WAGENER et al. 2003), deshalb wird die Frage der Richtigkeit und der Bedeutung von Flüssen zwischen den einzelnen Modellteilen gar nicht gestellt. Die Modellparameter werden mittels inverser Modellierung bestimmt, mit dem Ziel, die bestmögliche Anpassung der berechneten Abflussganglinien an die gemessenen Werte zu erlangen. Ob die so ermittelten Parameterwerte auf Grund der hydrogeologischen Beschreibung des Gebietes plausibel interpretierbar sind, ist in der Regel ebenfalls nicht von Interesse (BEVEN 2000).

Der prozess-basierte Ansatz löst prinzipiell viele von diesen Problemen durch das Einsetzen von direkt physikalisch-interpretierbaren Parametern und durch die Darstellung der räumlichen Variabilität in den Parameterwerten (ABBOTT et al. 1986). Nicht nur der aggregierte Gebietsabfluss, sondern auch die auf der Ebene der räumlichen Grundeinheit berechneten Flüsse oder piezometrischen Höhen sind physikalisch-fundiert und können für das Verständnis des Wasserhaushaltes und für die Entwicklung von Verwaltungsstrategien benutzt werden. Im „global change“-Kontext besteht die Aufgabe des Modells darin, Situationen und Ereignisse zu simulieren, die in den für die Kalibrierung verwendeten Messdaten nicht enthalten sind. Je näher das Modell die physikalische Realität abbildet, desto wahrscheinlicher ist es, dass das Modell unter neuen Bedingungen realitätsnah reagieren wird.

Der Preis für den umfassenden Charakter der prozess-basierten Modelle ist aber hoch (BEVEN 1989, GRAYSON et al. 1992). Ihre Komplexität fordert sehr viele Eingangsdaten, die normalerweise nicht auf der Anwendungsskala verfügbar sind. Die nötigen In- und Extrapolationen sind mit einer großen Unsicherheit behaftet. Die physikalischen Gesetze selbst werden im Modell auf einer räumlichen Skala eingesetzt, für die ihre Gültigkeit zweifelhaft ist. Die große Anzahl an Parametern führt zu einer systematischen Überparametrisierung. Die Folge sind starke Wechselbeziehungen zwischen den Parameterwerten. Die internen Ergebnisse des Modells (Perkolation, Grundwasserneubildung, Grundwasserabfluss u.s.w.), vielleicht ihr größter Vorteil, haben zwar eine physikalische Bedeutung, sie sind aber praktisch nicht prüfbar.

Die Frage der Bestimmung der notwendigen und ausreichenden Komplexität in der Modellbeschreibung der hydrologischen Prozesse lässt sich nicht verallgemeinernd beantworten. Deshalb wird sie auch für den hier behandelten Fall ein zentrales Thema der Arbeit sein. Die Aufgabe, den Sickerraum explizit zu beschreiben und zu berücksichtigen, ist für hydrologische Modelle spezifisch, die durch die Verknüpfung mehrerer möglichst physikalisch-basierter sektoraler Modelle aufgebaut sind. Wegen des Mangels an einer kompletten deterministischen Beschreibung des Gebietes lässt sich nicht vermeiden, auch rein konzeptionelle Module anzuwenden. Es könnte sich ebenso herausstellen, dass komplexere physikalisch-basierte sektorale Modelle schlechter als einfachere Varianten die gefragte Leistung vollbringen. Mehrere Modellstrukturen und Modellierungsstrategien sind also möglich, deren Vor- und Nachteile bewertet werden müssen.

1.2.3 Hydrologische Modellierung des Sickerraumes

Die Aufgabe, den Sickerraum als Teil eines hydrologischen Modellkomplexes zu beschreiben, besteht in der Bestimmung der Parameter, die die Separation der Perkolation in Grundwasserneubildung und Zwischenabfluss beschreiben und die zeitlichen und räumlichen Transformationen der beiden Komponenten steuern. Die Schwierigkeit der Aufgabe liegt hauptsächlich darin, dass für den Sickerraum fast nie direkte Messdaten vorhanden sind. Sowohl der Systeminput, die Perkolation aus der Bodenzone, als auch der Output, die Grundwasserneubildung und der Zwischenabfluss, können mit der heutigen Messtechnik für mesoskalige Untersuchungen nicht in ausreichender Menge erfasst werden. Die internen Eigenschaften des Sickerraumes können nur qualitativ anhand geologischer Untersuchungen beschrieben, effektive (über die Fläche aggregierte) Parameterwerte können daraus jedoch in der Regel nicht abgeleitet werden. Sehr intensive Messkampagnen für die Erfassung der dreidimensionalen Struktur und deren Eigenschaften können zwar theoretisch das Problem zu einer klassischen Upscaling-Aufgabe reduzieren (HARTER und HOPMANS 2004), auf der Mesoskala wird aber diese Möglichkeit als nicht realistisch gesehen und deshalb auch nicht weiter diskutiert.

Die nächsten Absätze stellen vier in der Literatur dokumentierte Möglichkeiten vor, die Problematik des Sickerraumes auf der Mesoskala zu behandeln.

Methoden wurden für die direkte Separation der gemessenen Abflussganglinie in mehrere Komponente (e.g. SCHWARZE et al. 1991, MCCUEN 1997, WITTENBERG und SIVAPALAN 1999, FUREY und GUPTA 2001) oder für die Bestimmung der effektiven Eigenschaften des Grundwasser- und Sickerraumes (e.g. TALLAKSEN 1995, ZECHARIAS und BRUTSAERT 1998) entwickelt. Solche Verfahren sind aber wegen der zahlreichen Vereinfachungen und Annahmen und wegen ihrer praktischen Unvalidierbarkeit als „divorced from reality“ (NATHAN und MCMAHON 1990, siehe auch BEVEN 2000) sehr umstritten. Die zusätzliche Anwendung von Tracerdaten (meistens Isotopenkonzentrationen) hat dagegen zu vielversprechenden Ergebnissen geführt (SCHWARZE et al. 1991, UHLENBROOK et al. 2002, TILCH et al. 2003). Solche Daten sind aber meistens nur für sehr kleine Einzugsgebiete vorhanden, so dass ihr Einsatz in mesoskaligen Studien noch keine Alternative ist.

Konzeptionelle hydrologische Einzugsgebietsmodelle umgehen das Problem, indem sie den Sickerraum nicht explizit modellieren. Die Abflusskonzentration wird durch mehrere (zwischen einer und vier, siehe SINGH 1995) räumlich-aggregierten Transporteinheiten modelliert, die in der Regel nach dem Speicherkonzept gebildet werden. Wie bereits erwähnt, werden die Parameter dieser Einheiten während der Kalibrierung angepasst, meist ohne dass die physikalische Richtigkeit der bestimmten Werte oder der einzelnen Modellergebnisse (Direktabfluss, Zwischenabfluss, Grundwasserneubildung) in Frage gestellt wird.

In einem Bodenwasserhaushaltsmodell, als Teil eines SVAT (Soil-Vegetation-Atmosphere-Transfer) Modells, wird der Direktabfluss und die Perkolation aus dem Bodenraum berechnet (EAGLESON 1978). Für die Kalibrierung des Modells werden Punktmesswerte für die Verdunstung oder Bodenfeuchte und Flächendaten aus der Fernerkundung (z.B. für den Vergleich des Verdunstungsmusters), sowie Gesamtabflusswerte benutzt (LUDWIG 2000). Mit Lysimetern gewonnene Perkulationsmesswerte sind nur selten in ausreichender Anzahl verfügbar, so dass die Separation zwischen

Direktabfluss und Perkolation nur ein indirektes, und damit unsicheres Ergebnis des Modells ist.

Für ein Grundwasserströmungsmodell werden für die Bestimmung der effektiven Modellparameter hauptsächlich gemessene Grundwasserspiegel verwendet. Die Eigenschaften des Darcy-Gesetzes, das die Proportionalität zwischen dem Höhengradienten und dem Durchfluss festlegt, haben zur Folge, dass durch Anpassung der Modellparameter (hydraulische Durchlässigkeit und Speicherkoeffizient) für einen gegebenen Grundwasserspiegel unterschiedliche Durchflüsse abgeleitet werden können. Das Grundwassermodell setzt also die Kenntnisse der Bilanzterme, Grundwasserneubildung oder Grundwasserabfluss, voraus, um die richtigen Parameterwerte zu erhalten. Die bereits erwähnten Ganglinienseparationsverfahren für die Berechnung des Basisabflusses (ARNOLD und ALLEN 1999), vereinfachte Wasserbilanzmethoden (STONE et al. 2001) für die Schätzung der Grundwasserneubildung, oder rein vertikale Infiltrationsmodelle für die Transformation der Perkolation aus dem Bodenraum in Grundwasserneubildung (BESBES und DE MARSILY 1984, BEVERLY und CROTON 2002) werden dafür eingesetzt. Es ist jedoch wichtig anzumerken, dass man damit keine genauen, sondern eher plausible Werte erzielt (PETTYJOHN und HENNING 1979). Solange das Grundwassermodell sektoral im Hinblick auf die Entwicklung des Grundwasserspiegels angewandt wird, ist dies eine durchaus berechtigte Vorgehensweise. Wenn aber das Grundwassermodell als Teilmodul eines integrativen hydrologischen Modells gebraucht wird, sind die beiden oben genannten Bilanzkomponenten wichtig und ihre fehlerhafte Schätzung oder Berechnung führt zu schlechten Ergebnissen (eine schlechte Anpassung an den berechneten Gesamtabfluss) des Gesamtmodells.

In der vorliegenden Arbeit sollen Elemente aus allen vier Ansätzen benutzt und zu einer gemeinsamen Lösung kombiniert werden. Sowohl die direkte Separation der Abflussganglinie, die Anpassung der Parameter durch Kalibrierung, als auch die sektoralen Perspektiven des Bodenwasserhaushalts- und des Grundwassermodells kommen dafür zum Einsatz. Ihre Vorteile und Nachteile müssen diskutiert und verglichen werden, um die Güte und die Zuverlässigkeit der Gesamtlösung zu beurteilen.

1.3 Zielsetzung

Das Ziel dieser Arbeit ist es, die Modellierung der Abflusskonzentration mit Hilfe eines hydrologischen Modellkomplexes unter expliziter Berücksichtigung des Sickerraumes zu evaluieren und durchzuführen. Hierzu wurden die folgenden Aufgabenbereiche als wesentlich erkannt und bearbeitet:

1. Durchführung einer umfassenden Analyse über die Anwendbarkeit von Ganglinienanalyseverfahren für die Charakterisierung des Sickerraumes und für die Quantifizierung der mit dem Sickerraum und mit dem Grundwasserraum verbundenen Abflusskomponenten.
2. Entwicklung und Implementierung eines Modellierungskonzeptes für die Abflusskonzentration, in dem der Sickerraum als eigenständiges Element des Wasserkreislaufes und als Bindeglied zwischen Boden-, Grundwasser- und Oberflächengewässern abgebildet wird.

3. Konzipierung einer Modellierungsstrategie und deren Anwendung auf Testeinzugsgebiete, um die neue Modellstruktur ausführlich zu bewerten. Verfahren, die dem Stand der Technik entsprechen, wurden angewandt, um die Unsicherheit der Modellergebnisse und der Parameterwerte zu quantifizieren und zu erklären.
4. Ermittlung der Vor- und Nachteile der prozess-basierten Modellierung durch den Vergleich der Ergebnisse mehrerer Modellversionen. Die Möglichkeit der Bestimmung von gut bestimmten und physikalisch-interpretierbaren effektiven Parameterwerten für den Sickerraum wurde untersucht.

1.4 Vorgehensweise und Aufbau der Arbeit

Kapitel 2 fasst die theoretischen Grundlagen der Methoden und Verfahren, die in der Arbeit zum Einsatz kommen, zusammen. Der Modellierungskontext, die Bodenwasserhaushalts- und Grundwasserströmungsmodelle werden beschrieben. Eine Vorstellung des Einzugsgebietes der Oberen Donau, sowie der ausgewählten Testeinzugsgebiete beendet das Kapitel.

Kapitel 3 behandelt und beantwortet die Frage der Anwendbarkeit von Ganglinienanalyseverfahren (Aufgabe 1). Nach einer Aufzählung der Grundprinzipien der Ganglinienanalyse werden die wichtigsten Ganglinienseparationsverfahren klassifiziert, beschrieben und erstmals in einem einheitlichen numerischen Programm implementiert. Ein neues Konzept wird entwickelt und eingesetzt, um die Anwendung der Verfahren nicht nur auf Kopfeinzugsgebiete, sondern auf alle Teileinzugsgebiete des Untersuchungsraumes zu gestatten. Die als relevant ausgesuchten Methoden werden auf Teileinzugsgebiete im Gebiet der Oberen Donau angewandt, verglichen und ausgewertet. Der Einfluss der räumlichen Skala auf die Verfahren wird untersucht. Es folgt eine Analyse zur Regionalisierung der Ergebnisse der Ganglinienseparationsverfahren mit dem Ziel, ihre physikalische Interpretation zu bestätigen oder zu widerlegen. Andere Verfahren der Ganglinienanalyse, vor allem die Analyse der Ganglinienrezessionen, werden ebenfalls beschrieben und eingesetzt.

Kapitel 4 bearbeitet die konkrete Integration des Sickerraumes in den hydrologischen Modellkomplex für die Abflusskonzentration und befasst sich mit allen Facetten der Aufgaben 2, 3 und 4: Entwicklung des Modellkonzeptes und der Modellierungsstrategie, Vergleich mehrerer Modellversionen mit unterschiedlichen Graden der Konzeptualisierung und Bestimmung von physikalisch-interpretierbaren Parameterwerten. Nach der Vorstellung der Implementierung des neu entwickelten Modells und der anliegenden Aspekte wird der Wasserhaushalt des Einzugsgebietes der Ammer, das im Südwesten von Bayern am Übergang zwischen den Alpen und dem Vorland liegt, analysiert.

Das Mehrziel-Optimierungsverfahren (GUPTA et al. 2003), GLUE (Generalised Likelihood Uncertainty Estimation, BEVEN und BINLEY 1992) und die Dimensionalitätsanalyse (JOLLIFFE 1986) sind die Hauptwerkzeuge, die für die kritische Bewertung des entwickelten Modells zum Ansatz kommen. Zwei Modellversionen mit unterschiedlichen Konzeptualisierungen für die Grundwasserströmung werden bezüglich der Unsicherheit der Parameter und der Modellschätzungen miteinander verglichen.

Die Ergebnisse werden dann mit denen des klassischen Niederschlag-Abfluss-Modells HBV (BERGSTRÖM 1995) verglichen.

Kapitel 5 befasst sich weiter mit der Frage der Bestimmung von physikalisch-interpretierbaren Parameterwerten (Aufgabe 4). Dafür wird die inverse Modellierung mit einem Regionalisierungsverfahren kombiniert (HUNDECHA und BARDOSSY 2004), was zur Bestimmung von mathematischen Beziehungen zwischen den Modellparametern und dem Sickerraum führt. Die Methodik wird auf die Gebiete der Ammer und der Naab (im Nordosten von Bayern am Schnittpunkt zwischen der Frankenalb und dem Oberpfälzischen Hügelland) angewandt. Nachdem die Ergebnisse mit denen der einfachen inversen Modellierung bezüglich ihrer Güte und Unsicherheit verglichen wurden, werden sie nach ihrer physikalischen Deutung interpretiert.

Kapitel 6 fasst die gewonnenen Erkenntnisse zusammen. Das Fazit über die Anwendbarkeit der Verfahren zur Ganglinienanalyse für die Charakterisierung der hydrogeologischen Prozesse in einem Einzugsgebiet wird gezogen. Die abschließende Analyse der Modellierungsergebnisse betrifft zuerst die angewandte Methodik zur Parametrisierung, Bewertung der Modellperformanz und Regionalisierung der Modellparameter. Die während der Arbeit gewonnene Erfahrung führt zu Schlüssen bezüglich der Qualität dieser Methodik und zu Verbesserungsvorschlägen.

Der Erfolg der Modellierung der Abflusskonzentration unter Berücksichtigung des Sickerraumes wird anhand der Ergebnisse diskutiert und bewertet. Die Aussagekraft der durch Modellierung bestimmten Eigenschaften des Sickerraumes und des Grundwasserraumes wird beurteilt. Der Wert der Ergebnisse für das Verständnis der hydrologischen Prozesse und für zukünftige Studien wird abgeschätzt.

Die in dieser Arbeit verwendeten Daten stammen aus folgenden Quellen (Für eine ausführliche Beschreibung der verfügbaren Daten im Projekt GLOWA-Danube siehe <http://www.glowa-danube.de/atlas/atlas.htm>):

- 209 Abflusszeitreihen mit täglicher Auflösung, zur Verfügung gestellt vom Bayerischen Landesamt für Wasserwirtschaft, der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg und dem österreichischen Bundesministerium für Land und Forstwirtschaft
- Digitales Geländemodell DGM1000, Landnutzungskarte (27 Klassen) und Bodenkarte (12 Klassen) für das Einzugsgebiet der Oberen Donau, zur Verfügung gestellt vom Lehrstuhl für Geographie und geographische Fernerkundung, Ludwig-Maximilian Universität München
- Hydrogeologisches Konzeptmodell des Einzugsgebietes der Oberen Donau, zur Verfügung gestellt von der Arbeitsgruppe GLOWA-Danube am Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart
- Ergebnisse des Bodenwasserhaushaltsmodells PROMET (1990-2000), zur Verfügung gestellt von Dr. Ralf Ludwig, Ludwig-Maximilian Universität München
- Hydrogeologisches Konzeptmodell für das Gebiet der Ammer zusammen mit der Geometrie und der Parametrisierung eines MODFLOW-Modells für die Grundwasserströmung, zur Verfügung gestellt von Dipl.-Geol. Jens Wolf, Universität Stuttgart

2 Hydrologische Modellierung in mesoskaligen Einzugsgebieten

Die theoretischen Grundlagen hydrologischer Modelle, mit denen sich die vorliegende Arbeit beschäftigt, werden in Kapitel 2.1 beschrieben. Dazu gehören die Definitionen der wichtigsten Begriffe und die Theorie des Aufbaus eines konzeptionellen hydrologischen Modells der Abflusskonzentration als Transferfunktion zwischen dem Eingangssignal (meist dem Niederschlag) und dem Ausgangssignal (meist dem Abfluss). Das Konzept der linearen Speicherkaskade, eines der bekanntesten im Bereich konzeptioneller Modelle, wird ausführlich behandelt, da es später zum Einsatz kommt. Zur Anpassung solcher Modelle werden immer mathematische Optimierungsalgorithmen angewandt, deshalb wird auch dieser Aspekt vorgestellt.

Kapitel 2.2 befasst sich mit dem Problem prozess-basierter hydrologischer Modelle. Zuerst werden die Grundgleichungen, die für die sektorale Modellierung einzelner Prozessräume benötigt werden, eingeführt. Es folgt die Vorstellung der DANUBIA-Kopplungsstruktur, die im Projekt GLOWA-Danube für den Aufbau eines integrativen Einzugsgebietsmodells entwickelt wurde.

Das Problem der hydrologischen Modellierung des Sickertraumes (Kap. 1.2, Seite 3) wird in Kapitel 2.3 noch einmal aufgegriffen, wobei der Akzent diesmal auf die unterschiedlichen vorhandenen Lösungen gesetzt wird.

Keine Modellierungsstudie ist ohne die Analyse der Unsicherheit ihrer Ergebnisse und ihrer Parameter vollständig. Diese Aussage gilt insbesondere für die vorliegende Arbeit, die sich primär mit der Untersuchung physikalischer Interpretierbarkeit von Modellerkenntnissen beschäftigt. Kapitel 2.4 stellt die Hauptaspekte der Unsicherheitsanalyse und einige spezifische Methoden, die später zum Einsatz kommen, vor.

Kapitel 2.5 beendet diesen Abschnitt mit einer kurzen Einführung in das Einzugsgebiet der Oberen Donau sowie in die ausgewählten Testgebiete Ammer und Naab. Das Verständnis der Hydrogeologie des Gebietes ist für die Modellierung des Sickertraumes und seiner Kopplung an das Grundwassermodell unerlässlich, deshalb werden die hydrogeologischen Haupteinheiten und ihre hydrologische Relevanz beschrieben.

2.1 Grundlagen hydrologischer Modelle

2.1.1 Modellierung hydrologischer Systeme

Nach DYCK und PESCHKE (1995) ist ein hydrologischer Prozess die qualitative oder quantitative Änderung eines Wasserkörpers oder Wasserteilchens mit der Zeit, d.h. die Änderung seiner Ortskoordinaten und/oder seiner Eigenschaften. Wenn das untersuchte hydrologische System ein Einzugsgebiet ist, lassen sich die hydrologischen

Prozesse in zwei große Gruppen einteilen: Prozesse der Abflussbildung und der Abflusskonzentration.

Die Abflussbildung ist „die Gesamtheit der Prozesse, die zur Bildung des zum Abfluss gelangenden Anteiles des Niederschlages führt“ (LEXIKON DER GEOWISSENSCHAFTEN 2005). Zu diesen Prozessen gehören hauptsächlich die Evaporation, die Interzeption und Transpiration der Pflanzen sowie der Aufbau und Abbau der Schneedecke. Es handelt sich um primär vertikale Bilanzierungsprozesse.

Die Abflusskonzentration ist „die Gesamtheit der Prozesse, d.h. der lateralen Wasserflüsse auf und unter der Landoberfläche, die zur Bildung des Abflusses im Gerinnebett führen“ (LEXIKON DER GEOWISSENSCHAFTEN 2005). In Abb. 1.1 (Seite 2) sind die wichtigsten Prozesse der Abflusskonzentration zusammengefasst.

Ein Modell ist eine „schematische Nachbildung eines Systems bezüglich ausgewählter Eigenschaften und Vorgänge“ (DIN 4049). Mathematische Modelle, auf die sich diese Arbeit beschränkt, benutzen dafür mathematische Gleichungssysteme. Ein integratives hydrologisches Modell betrachtet den gesamten Wasserkreislauf des Einzugsgebietes und erzeugt aus dem Niederschlag den Abfluss am Ausgangspegel. Sektorale Modelle konzentrieren sich dagegen auf bestimmte Prozesse und Prozessräume.

Ein wichtiger Unterschied zwischen den Modellen oder Modellkomponenten, die sich mit den Prozessen der Abflussbildung befassen, und denen, die die Abflusskonzentration betrachten, ist, dass die vertikale Bilanzierung der Abflussbildung deutlich flexibler bezüglich der horizontalen räumlichen Aggregation ist, weil die verschiedenen Raumeinheiten voneinander unabhängig sind. Bei der hauptsächlich horizontalen Abflusskonzentration hingegen bilden die Prozess- und Zustandsvariablen einer Einheit die Randbedingungen für die Nachbareinheiten. Die Berücksichtigung dieser Randbedingungen in der Raumdiskretisierung ist kein triviales Problem und verlangt eine spezielle Lösung für jeden einzelnen Prozess (z.B. BLÖSCHL 1996).

Die Vielzahl der hydrologischen Modelle erschwert eine eindeutige Klassifizierung. Eine übliche Variante zeigt Abbildung 2.1. Die Klassifizierung erfolgt nach zwei Kriterien: die Art und Weise, wie nah die Nachbildung einzelner Prozesse im Modell an physikalischen Gesetze angelegt ist und die räumliche Auflösung des Modells. Die Kategorie der stochastischen Modelle, bei denen entweder die Eingangsdaten oder die Parameter Zufallsvariablen sind, ist hier nicht von Interesse. Die deterministischen Modelle mit eindeutigen Ursache-Wirkung-Beziehungen lassen sich in drei Hauptgruppen einteilen: Black-Box, konzeptionelle (Grey-Box) und prozess-basierte (White-Box) Modelle. Die Haupteigenschaften der letzten beiden Gruppen wurden bereits in Kapitel 1.2.2 beschrieben.

2.1.2 Aufbau konzeptioneller hydrologischer Modelle der Abflusskonzentration

Konzeptionelle Modelle sind die am häufigsten eingesetzten hydrologischen Modelle. Wenn man die Klassifizierung in Abb. 2.1 auf existierende Modelle anwendet, gibt es weder reine Black-Box- noch reine White-Box-Modelle, alle befinden sich immer in einer gewissen Grauzone. Auch die einfachsten Verfahren, wie die Anwendung der Einheitsganglinie, könnten als eine Vereinfachung physikalischer Grundgesetze interpretiert (SHERMAN 1932) und so zur Liste der konzeptionellen Modelle hinzugefügt werden. Bei den White-Box-Modellen ist die direkte Anwendung der Gleichungen

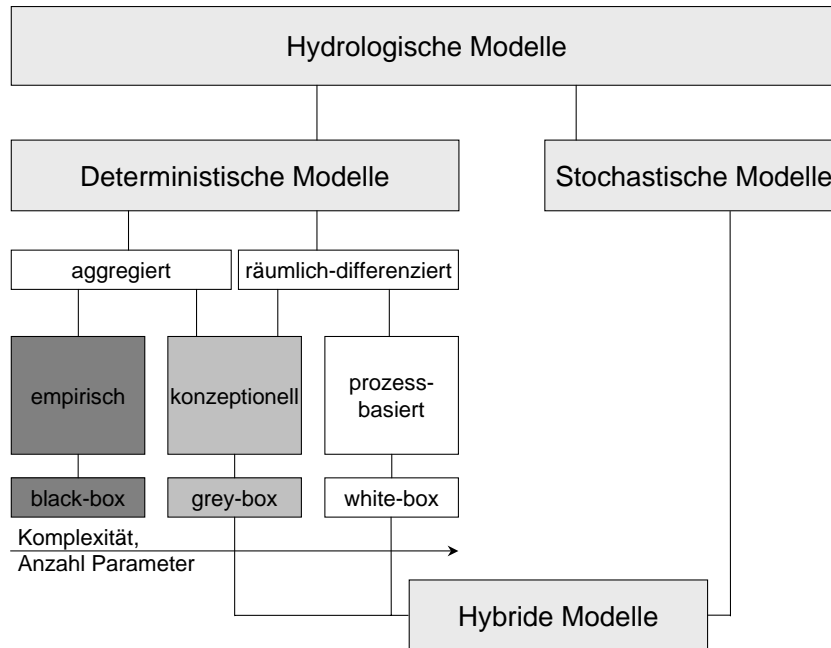


Abbildung 2.1: Klassifikation hydrologischer Modelle nach REFSGAARD (1996) und WOLF (2006)

der physikalischen Grundgesetze auf groben Raumeinheiten auch eine Konzeptionalisierung des Modells. Die Haupteigenschaft eines konzeptionellen Modells ist aber, dass es versucht, effizient und zielgerichtet „die in den natürlichen Systemen ablaufenden Prozesse mit einfachen mathematischen Modellen bzw. Modellkonzeptionen in abstrahierter Form nachzubilden“ (DOOGE 1973).

Ein konzeptionelles Modell der Abflusskonzentration muss das Eingangssignal $p(t)$ (den effektive Niederschlag im Einzugsgebiet) in das Ausgangssignal $q(t)$ (den Gesamtabfluss am Pegel) übertragen. Die Übertragung wird vom Einzugsgebiet durchgeführt, das als ein dynamisches ($q(t)$ ist von $p(\tau)$ abhängig, mit $\tau \leq t$) und lineares (die Verstärkungs- und Superpositionsprinzipien gelten) System betrachtet wird. Mathematisch lässt sich dieses System mit einem Faltungsintegral beschreiben:

$$q(t) = \int_0^t p(\tau) \cdot g(0, t - \tau) d\tau. \quad (2.1)$$

Die Übertragungsfunktion, auch Transferfunktion genannt, wird durch die dt-Gewichtsfunktion $g(dt, t)$ oder durch die Übergangsfunktion $h(t)$ ausgedrückt. Die dt-Gewichtsfunktion (auch Impulsantwort) $g(dt, t)$ ist die Antwort des Systems auf einen Impuls mit Inhalt 1 und Dauer dt . Wenn dt gegen Null geht, wird der Impuls zum Momenteinheitsimpuls (Diracsche-Deltafunktion) und die Gewichtsfunktion wird zu $g(0, t)$. Wenn $g(0, t)$ bekannt ist, kann die Systemantwort $q(t)$ auf eine beliebige Eingangsfunktion $p(\tau)$ aus dem Faltungsintegral berechnet werden. Die Übergangsfunktion $h(t)$ ist die Antwort des Systems auf einen Impuls in der Form der Einheits-

sprungfunktion. Die zwei Funktionen, $g(0, t)$ und $h(t)$, sind verbunden durch:

$$h(t) = \int_0^t g(0, t') dt'. \quad (2.2)$$

Für eine numerische Implementierung wird die Methode der Finite-Differenzen verwendet:

$$g(dt, t) = \frac{h(t) - h(t - dt)}{dt}. \quad (2.3)$$

Die Transferfunktion muss die beiden Haupteffekte der komplexen Fließvorgänge in einem Einzugsgebiet berücksichtigen: die Translation (Verschiebung) und die Retention (Speicherung). Die Translation ist die zeitliche Verschiebung des Signals nach vorne: der Gesamtabfluss am Pegel tritt nicht zeitgleich mit der Bildung des effektiven Niederschlags auf, sondern mit einer gewissen zeitlichen Verzögerung. Ein Einzugsgebiet verschiebt aber nicht nur die Wasserganglinie, es verändert sie auch: hauptsächlich durch die Speichereigenschaften des Untergrundes wird die Ganglinie gedämpft.

Die erste Transferfunktion war die Einheitsganglinie von SHERMAN (1932). In den letzten Jahrzehnten wurden viele weitere mathematische Formen entwickelt (z.B. DYCK und PESCHKE 1995). Dabei werden nicht alle Prozesse der Abflusskonzentration durch eine einzige Funktion nachgebildet: in der Regel grenzt das Modell unterschiedliche hydrologische Räume voneinander ab und teilt jedem Raum eine Funktion zu. Die häufigste Abtrennung ist die zwischen der Oberfläche und dem Untergrund. Dadurch lassen sich Koeffizienten, die in den Transferfunktionen eingesetzt werden, mit den physikalischen Eigenschaften des Gebietes in Verbindung setzen.

Die häufigste angewandte mathematische Form der Transferfunktion ist der Einzellinearspeicher (ELS). Ein ELS wird über die Proportionalität zwischen dem Speicherinhalt $S(t)$ und dem Ausfluss aus dem Speicher $q(t)$ definiert:

$$S(t) = k \cdot q(t). \quad (2.4)$$

k (mit der Einheit Zeit) ist die Speicherkonstante. Beim ELS kann die Beziehung zwischen dem Zufluss $p(t)$ und dem Ausfluss $q(t)$ über die Speicheränderungen geschrieben werden:

$$p(t) = q(t) + \frac{dS}{dt} = q(t) + k \frac{dq}{dt}. \quad (2.5)$$

Die Lösung für $q(t)$ aus Gl. 2.5 ist:

$$q(t) = q(t_0) \cdot e^{-(t-t_0)/k} + \int_{t_0}^t p(\tau) \cdot \frac{1}{k} \cdot e^{-(t-\tau)/k} d\tau. \quad (2.6)$$

Um die Gewichtsfunktion des ELS zu bestimmen, setzt man zur Zeit $t = t_0$ in einem leeren Speicher $p(t_0) = 1$ und $p(t) = 0$ für $t > t_0$, was einem Momenteinheitsimpuls entspricht. Es folgt $S(t_0) = 1$ und aus der Definition des ELS $q(t_0) = 1/k$. Für $t_0 = 0$ liefert Gl. 2.6 die gesuchte Gewichtsfunktion:

$$g(0, t) = \frac{1}{k} e^{-t/k}. \quad (2.7)$$

Eine Alternative zum ELS, die in dieser Arbeit verwendet wurde, ist die lineare Speicherkaskade (NASH 1958), die zu einer stabileren Schätzung der Parameter führt und wegen ihrer Flexibilität in der Lage ist, eine große Spannweite von Ganglinien nachzubilden (BEVEN 2000). Sie ist eine Erweiterung des Einzellinearspeichermodells: Wenn man n identische ELS in einer Reihenschaltung verwendet, wird Gl. 2.7 durch die n -fache Anwendung von Gl. 2.6 (DYCK und PESCHKE 1995) zu:

$$g(0, t) = \frac{1}{k \cdot (n-1)!} \cdot \left(\frac{t}{k}\right)^{(n-1)} \cdot e^{-t/k}. \quad (2.8)$$

Nimmt man an, dass n auch eine gebrochene Zahl sein kann, ist es möglich die Fakultät $(n-1)!$ durch die Gammafunktion $\Gamma(n)$ zu ersetzen:

$$g(0, t) = \frac{1}{k \cdot \Gamma(n)} \cdot \left(\frac{t}{k}\right)^{(n-1)} \cdot e^{-t/k}. \quad (2.9)$$

Die Gleichung 2.9 definiert eine lineare Speicherkaskade. Wenn man die damit verbundene Übergangsfunktion formuliert und die Substitution $x = t/k$ durchführt, ergibt sich:

$$h(t) = \int_{t_0}^t \frac{1}{k \cdot \Gamma(n)} \cdot \left(\frac{t'}{k}\right)^{n-1} \cdot e^{-t'/k} dt' = \int_0^x \frac{(x')^{n-1} \cdot e^{-x'}}{\Gamma(n)} dx'. \quad (2.10)$$

Gl. 2.10 ist auch als das Integral der unvollständigen Gammafunktion bekannt. Ihre geschlossene Integration ist nicht möglich (DYCK und PESCHKE 1995), Gl. 2.10 wird für praktische Anwendungen mit Hilfe von Tafelwerken und EDV-Routinen gelöst. In dieser Arbeit wurde die auf Reihenentwicklung basierte numerische Implementierung, die von PRESS et al. (1992, S. 211) vorgestellt wurde, benutzt. Wenn man die Gammafunktion aus dem Integral zieht und die Integralfunktion als $\gamma(n, x)$ bezeichnet, lassen sich dafür zwei Entwicklungen schreiben:

$$\gamma(n, x) = e^{-x} x^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n)}{\Gamma(n+1+m)} x^m \quad (2.11)$$

$$\gamma(n, x) = 1 - e^{-x} x^n \left(\frac{1}{x+1-n} \cdot \frac{1 \cdot (1-n)}{x+3-n} \cdot \frac{2 \cdot (2-n)}{x+5-n} \dots \right) \quad (x > 0). \quad (2.12)$$

Gl. 2.11 ist die Reihenentwicklung, Gl. 2.12 ist die kontinuierliche Brücheentwicklung in ihrer spezifischen Schreibweise. Die erste Form konvergiert schneller für $x < n+1$, die zweite Form für $x > n+1$. Beide Formen brauchen die Berechnung von nicht mehr als \sqrt{n} Termen in der Entwicklung. Für die Gammafunktion $\Gamma(n)$ in Gl. 2.10, 2.11 und 2.12 wurde die sehr effiziente Lanczos-Schätzung (LANCZOS 1964) benutzt:

$$\Gamma(n+1) = (n + \delta + 0.5)^{-(n+\delta+0.5)} \cdot \sqrt{2\pi} \cdot \left[c_0 + \frac{c_1}{n+1} + \frac{c_2}{n+2} + \dots + \frac{c_N}{n+N} + \epsilon \right] \quad (n > 0) \quad (2.13)$$

Für $\delta = 5$, $N = 6$ und bestimmte $c_i, i = 1, N$ ist der Fehler $|\epsilon|$ in Gl. 2.13 kleiner als $2 \cdot 10^{-10}$. Mit Gl. 2.11, 2.12 und 2.13 kann also die Übergangsfunktion $h(t)$ der

linearen Speicherkaskade berechnet werden. Mit der Methode der Finiten-Differenzen (Gl. 2.3) wird die Gewichtsfunktion $g(dt, t)$ berechnet, die dann ins Faltungsintegral Gl. 2.1 eingesetzt wird. Damit wird die Berechnung der linearen Speicherkaskade für Abflusskonzentrationsprozesse abgeschlossen.

Für sehr lange Zeitreihen kann die direkte numerische Implementierung des Faltungsintegrals zu Problemen mit der Rechenkapazität führen, weil für jeden neuen Zeitschritt t_i ein neuer Wert $h(t_i)$ berechnet werden muss, um den Einfluss von $p(0)$ auf $q(t_i)$ zu bestimmen. Es ist aber nicht sinnvoll, den Einfluss eines Niederschlagsereignisses jahrelang nach seinem Auftreten weiter zu berücksichtigen. Durch ein Trial-and-Error-Verfahren konnte in dieser Arbeit das Integrationsintervall in Gl. 2.1 auf $[0; t_{sk}]$ in Abhängigkeit von den Parametern k und n der linearen Speicherkaskade, mit $t_{sk} = 5k + 1.5(k \cdot n)$, reduziert werden, .

Bei einem ELS wird der Schwerpunkt des Eingangssignals $p(t)$ um genau k -Zeiteinheiten zum Ausgangssignal $q(t)$ nach vorne verschoben. Für eine Speicherkaskade ist die Translation des Schwerpunktes entsprechend $k \cdot n$ -Zeiteinheiten groß. Der benutzte t_{sk} -Wert ist also eine konservative Schätzung. Theoretisch dauert der Einfluss eines Impulses im Eingangssignal $k \cdot n$ plus einem Term für die Streuung der Werte $q(t)$ um den Schwerpunkt. Der Dämpfungseffekt (die Retention) lässt sich nicht so deutlich wie die Translation zusammenfassen, da eine starke Kompensation zwischen den beiden Parametern stattfindet: ein großes k und ein kleines n können den gleichen Effekt wie ein kleines k und ein großes n haben. Die lineare Speicherkaskade hat also zwei Parameter, ihre wahre Dimensionalität d_{sk} ist aber $1 < d_{sk} < 2$.

In dieser Arbeit (Kapitel 3, 4 und 5) wurden die Konzepte des Speichers und der Speicherkaskade intensiv benutzt. Dabei wurde als ein wesentlicher Nachteil konzeptioneller Speichermodelle beachtet, dass der Istzustand des Speichers keiner physikalischen Realität entspricht. Das macht sich bei der Betrachtung der Anfangsbedingungen besonders bemerkbar: Man muss $p(t)$ und $q(t)$ für eine längere vergangene Periode kennen, um den aktuellen $q(t)$ zu berechnen. Kennt man sie nicht und setzt man sie gleich Null, wird eine Einlaufzeit benötigt, bis diese unrealistischen Null-Werte aus dem Speichergedächtnis verschwinden. Um dies zu vermeiden, wurde am Anfang jeder Simulation das erste Jahr immer zweimal berechnet, so dass ein Jahr als Einlaufperiode dient, was zu realistischen Startbedingungen führt.

2.1.3 Einsatz von Optimierungsalgorithmen für die Parametrisierung hydrologischer Modelle

Wenn konzeptionelle Transferfunktionen für die Modellierung hydrologischer Prozesse eingesetzt werden, lassen sich die Modellparameter (die Koeffizienten der Transferfunktionen) nicht direkt aus den Eigenschaften des Gebietes ableiten. Mit den Messdaten für den Niederschlag als Inputdaten werden Modellsimulationen durchgeführt und die berechneten Gesamtabflüsse mit den gemessenen verglichen. Das Modell wird dann kalibriert: die Parameterwerte werden solange geändert, bis eine bestmögliche Anpassung der berechneten an die gemessenen Gesamtabflüsse erzielt wird. Voraussetzung für die Kalibrierung ist die Verfügbarkeit der Messdaten für Niederschlag und Abfluss für eine längere Zeitperiode: Zehn Jahre werden üblicherweise für eine stabile und repräsentative Bestimmung der Parameter empfohlen (SMITH et al. 2003). In dieser Zeitperiode sollten sich sowohl trockene, normale als auch nas-

se Jahre befinden, so dass das hydrologische System in verschiedenen Situationen getestet wird.

Das Suchen nach Parameterwerten, die zu einer bestmöglichen Anpassung an die Messdaten führen, kann manuell oder automatisch erfolgen. Während der manuellen Kalibrierung werden zahlreiche Parametersätze probiert, bis ein zufriedenstellendes Ergebnis erreicht wird. Die Güte der Anpassung wird visuell und anhand statistischer Indikatoren geprüft. Für das manuelle Verfahren spielen die Erfahrung und das Vorwissen über die Prozesse in den untersuchten Einzugsgebieten eine große Rolle und können das Ergebnis positiv oder negativ beeinflussen. Es ist allerdings sehr arbeitsaufwändig und deshalb für die Analyse von vielen Teileinzugsgebieten nicht mehr praktikabel. Ihre Kritiker (z.B. GUPTA 2003) bemängeln auch seine Subjektivität: Unterschiedliche Bearbeiter kommen zu unterschiedlichen Ergebnissen.

Der rasche Anstieg der Rechenleistung hat dazu geführt, dass sich automatische Kalibrierungsverfahren durchgesetzt haben. Sie benutzen Optimierungsalgorithmen, um die Parameterwerte zu finden, die die Anpassung zwischen berechneten und gemessenen Daten so weit wie möglich verbessern (optimieren). In die Algorithmen werden dazu Maße zur Beschreibung der Güte der Anpassung eingesetzt. Damit lassen sich viele Einzugsgebiete mit großen Mengen an Messdaten effizient bearbeiten. Allerdings spielen die Auswahl der statistischen Maße (Zielfunktionen), die Anfangswerte für die Parameter, der zulässige Parameterraum, in dem die Parameter Werte annehmen dürfen, und vor allem, der Optimierungsalgorithmus selbst eine große Rolle für den Erfolg der automatischen Kalibrierung.

In vielen Bereichen, in denen Optimierungsalgorithmen eingesetzt werden, kommen Gradientenverfahren aus der Familie der Gauß-Newton-Methoden zum Einsatz. Die in der Regel nicht stetigen Beziehungen zwischen den Parametern eines hydrologischen Modells und den Zielfunktionen machen einen solchen Ansatz mathematisch sehr instabil. Deshalb werden fast nur direkte Algorithmen verwendet, die allein die Auswertung der zu optimierenden Zielfunktion in jedem Punkt des zulässigen Parameterraumes benötigen. Die ersten eingesetzten Methoden waren sogenannte lokale (*local search*) Methoden (für eine Übersicht siehe DUAN 2003): sie starten mit einem Anfangssatz von Werten und suchen dann in seiner Nachbarschaft nach Richtungen der Änderung, die zu einer Verbesserung der Zielfunktion führen. Das Verfahren wird iterativ wiederholt, bis jede Änderung zu einer Verschlechterung der Ergebnisse führt: Ein Optimum wurde erreicht und ist die Lösung des Problems. Eine detaillierte Beschreibung eines solchen Algorithmus, das Downhill-Simplex-Verfahren, folgt.

Sehr früh wurden die lokalen Optimierungsalgorithmen wegen ihrer Unzuverlässigkeit kritisiert (z.B. JOHNSTON und PILGRIM 1976). Kleine Änderungen in den Einstellungen der Methoden führten zu sehr unterschiedlichen Ergebnissen, so dass die Qualität des gefundenen Optimums nicht objektiv beurteilt werden konnte. DUAN (1992) untersuchte die Gründe dieses Verhaltens und kam zu den folgenden Schlüssen:

- im Parameterraum befinden sich mehrere Regionen, die für die Suchalgorithmen interessant sind (*regions of attraction*), da sie durch gute Werte der Zielfunktion charakterisiert werden;
- Jede dieser Regionen enthält zahlreiche lokale Optima;
- Die Antwort der Zielfunktion im Parameterraum (*the response surface*) ist sehr

komplex, ungleichmäßig und potentiell nicht stetig;

- Änderung der Parameterwerte haben unterschiedliche Wirkungen in unterschiedlichen Teilen des Parameterraumes: man spricht von einer variierenden Sensitivität der Parameter. Insbesondere in der Nähe der Optima weisen die Parameter starke nichtlineare Interaktionen und Kompensierungen auf.

Eine Lösung für diese Probleme war die Entwicklung von globalen Optimierungsalgorithmen. Sie suchen nicht nur in der Nachbarschaft des Anfangspunktes sondern im gesamten Parameterraum nach Werten und vermeiden so, in lokalen Optima gefangen zu bleiben. Das Hauptproblem solcher Methoden ist die enorme Rechenleistung, die für eine komplette Suche eines mehr-dimensionalen Raumes notwendig ist. Zahlreiche Verfahren wurden entwickelt, um die beiden Ziele, eine zuverlässige Schätzung des globalen Optimums auf der einen Seite und eine akzeptable nötige Rechenleistung auf der anderen Seite, zu erreichen. Drei Methoden haben sich dabei in der hydrologischen Modellierung durchgesetzt (BEVEN 2000, DUAN 2003): Simulated-Annealing, Genetic-Algorithm und Schuffled-Complex-Evolution. Obwohl keines der drei Verfahren theoretisch beweisen kann, dass es zum „wahren“ globalen Optimum konvergiert, wurden ihre Stärke und Zuverlässigkeit in zahlreichen Studien bewiesen (für eine Übersicht siehe DUAN 2003).

Nachfolgend wird der Optimierungsalgorithmus beschrieben, der in dieser Arbeit eingesetzt wird. Er wurde aus einer größeren Gruppe von Methoden ausgewählt, weil er sich in einer Testphase als performant und zuverlässig erwiesen hat. Das Verfahren, vorgestellt und implementiert von PRESS et al. (1991), ist eine Kombination zwischen der globalen Simulated-Annealing-Methode und der lokalen Downhill-Simplex-Methode. Beide Verfahren gehören zur Kategorie der direkten Algorithmen, die nur die Auswertung der zu optimierenden Zielfunktion $f(\vec{x})$ in allen zulässigen Punkten \vec{x} im Parameterraum brauchen. Simulated-Annealing hat sich in zahlreichen Anwendungen als eine der zuverlässigsten gängigen Methode in der Hydrologie bewährt, wurde aber auch für seine Langsamkeit kritisiert und deshalb mit lokalen Algorithmen gekoppelt (THYER et al. 1999). Auf den nächsten Seiten werden zuerst die beiden Verfahren separat beschrieben, am Ende wird ihre Kopplung vorgestellt.

Downhill-Simplex

Das Downhill-Simplex-Verfahren (auch Polytop-Algorithmus genannt, um die Verwechslung mit der Simplex-Methode aus der linearen Programmierung zu vermeiden) wurde von NELDER und MEAD (1965) entwickelt. Ein Simplex ist die geometrische Figur, die im \mathbb{R}^n aus $n + 1$ Punkten und allen verbindenden Geraden, Polygonseiten etc. besteht. Im \mathbb{R}^2 ist der Simplex ein Dreieck, im \mathbb{R}^3 ein Tetraeder.

Die Methode lässt sich am besten durch eine geometrische Interpretation im \mathbb{R}^3 (Abb. 2.2) erläutern. Als Anfangsbedingungen braucht man einen Anfangssimplex, d.h. $n + 1$ Punkte im zu kalibrierenden Parameterraum \mathbb{P}^n und die Werte $f(\vec{x})$ an diesen Punkten. Im ersten Schritt (**a**) wird der schlechteste Punkt \vec{x}_1 (der Punkt mit den schlechtesten $f(\vec{x})$ -Wert) des Simplexes an der Gegenseite gespiegelt - \vec{x}_{1a} . Falls der Schritt erfolgreich ist, d.h. falls $f(\vec{x}_{1a})$ besser als $f(\vec{x}_1)$ ist, wird noch einmal versucht, den Punkt in die gleiche Richtung zu verschieben (**b**) - \vec{x}_{1b} . Falls der Schritt nicht erfolgreich ist, wird der Punkt zu einer Position \vec{x}_{1c} zwischen seinem Ursprung und der Gegenseite verschoben (**c Reduktion**). Falls auch dieser Schritt

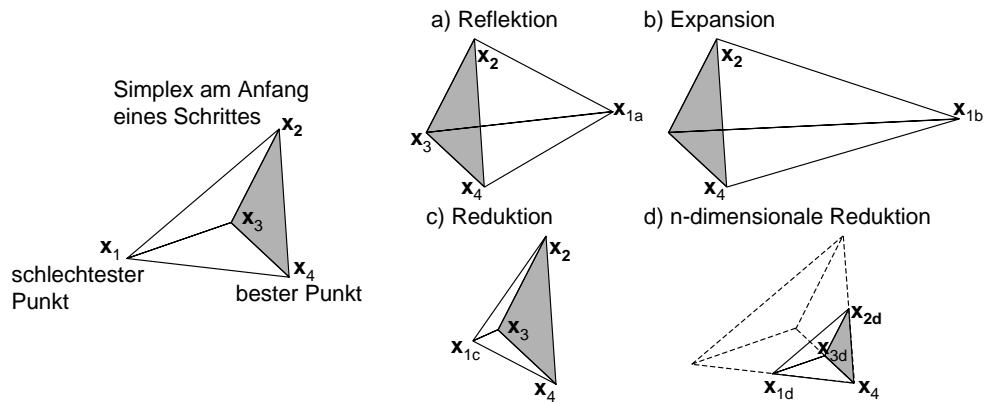


Abbildung 2.2: Der Downhill-Simplex Algorithmus in einem dreidimensionalen Raum (nach PRESS et al. 1991)

misslingt, wird der Simplex um den besten Punkt \vec{x}_4 geschrumpft (d). Das Verfahren wird wiederholt, bis der relative Unterschied $|f(\vec{x}_4) - f(\vec{x}_1)|/|f(\vec{x}_4) + f(\vec{x}_1)|$ kleiner als ein vorgegebener Toleranzwert ist.

Simulated-Annealing

Der Ursprung der Optimierungstechnik Simulated-Annealing ist eine Analogie mit der thermodynamischen Theorie, die das Härten von Metallen bei langsamen Abkühlen erklärt. Bei hohen Temperaturen bewegen sich die Moleküle frei in einer Schmelze. Wenn sie genug Zeit dafür haben, ordnen sich die Moleküle während des Abkühlens in Strukturen, die das System mit der minimalen Energie für die erreichte Temperatur bilden. Die Boltzmann-Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(E) \approx e^{(-E/k_b T)}$ gibt an, wie ein System, das in einem thermodynamischen Gleichgewicht mit der Temperatur T steht, die Energie wahrscheinlichkeits-theoretisch über alle Energiezustände E verteilt hat (DEUTSCH 2002). Sogar bei einer niedrigen Temperatur gibt es eine Wahrscheinlichkeit, dass das System in einem hohen Energiezustand ist. Wie niedrig diese Wahrscheinlichkeit ist, wird von der Boltzmann-Konstante k_b bestimmt.

Zuerst METROPOLIS (1953) und dann KIRKPATRICK (1983) haben diese Konzepte für Optimierungsprobleme angewandt. Die Zielfunktion f spielt die Rolle der freien Energie E . Die Hauptidee des Algorithmus ist, dass eine Änderung der Parameter nicht nur dann zugelassen wird, wenn sie zu einem besseren f -Wert führt, sondern manchmal auch, wenn f schlechter wird. Das geschieht mit einer Wahrscheinlichkeit $P = e^{-(f_{alt} - f_{neu})/T}$, wobei T ein Kontrollparameter ist und $f_{alt} = f(\vec{x}_{alt})$ und $f_{neu} = f(\vec{x}_{neu})$. Wenn T hoch ist, ist P für die Zulassung eines schlechteren Wertes noch relativ groß. T wird langsam verkleinert und je kleiner es ist, desto kleiner wird auch P . Das erlaubt dem Algorithmus den lokalen Optima zu entfliehen, um sich dem globalen anzunähern. Das Sinken von T muss langsam genug sein, um zu verhindern, dass das System in einem hohen Energiezustand „einfriert“, d.h. dass das Verfahren nur zu einem lokalen Optimum konvergiert. Die Art und Weise, wie die Temperatur gesenkt wird, wird vom sogenannten Annealing-Ablaufplan gesteuert.

Die Einstellungsparameter des Optimierungsverfahrens (diese sind die Anfangstemperatur T_0 , die Zahl N der f -Auswertungen für eine Temperatur T_j , der Wert für die Konstante k_b , der Ablaufplan, die Kriterien für Konvergenz und für Abbruch)

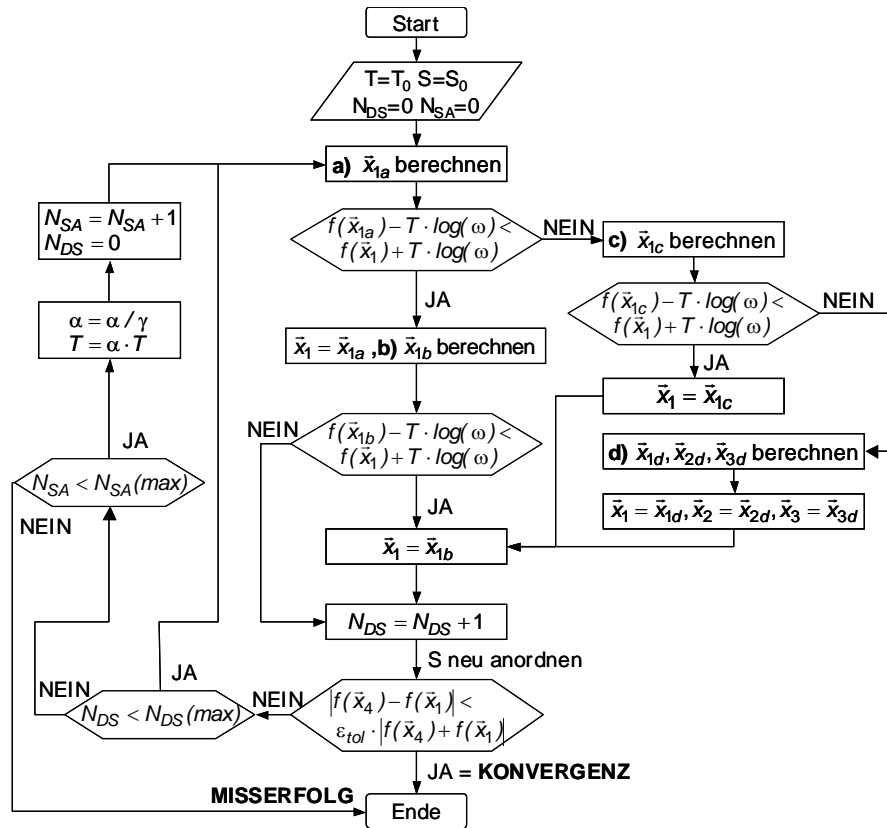


Abbildung 2.3: Flussdiagramm des Optimierungsalgorithmus Simulated-Annealing - Downhill-Simplex entwickelt von PRESS et al. (1991). Das Flussdiagramm gilt für einen dreidimensionalen Parameterraum. Die Bezeichnungen aus der Abb. 2.2 wurden verwendet (\vec{x}_1 der schlechteste Punkt und \vec{x}_4 der beste Punkt im Simplex, die Operationen **a** bis **d** für die Simplex-Veränderungen). $N_{DS}(\max)$ ist die maximale Anzahl von Downhill-Simplex-Iterationen für eine bestimmte Temperatur, $N_{SA}(\max)$ ist die maximale Anzahl von Simulated-Annealing-Iterationen. $\omega \in (0, 1)$ ist eine zufällige Zahl, die bei jeder Anwendung neu generiert wird. T_0 , α , γ , der Anfangsimplex $S_0 = (\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \vec{x}_4)$ sind Anfangsparameter.

haben einen wesentlichen Einfluss auf den Erfolg in Hinblick auf Stabilität, Schnelligkeit und Qualität der Konvergenz, lassen sich aber nicht von Problem zu Problem übertragen. Es gibt jedoch allgemeine Regeln, die respektiert werden müssen (DEUTSCH 2002, DUAN 2003); die genauen Werte müssen aber über Trial-and-Error geschätzt werden. T_0 muss groß genug sein, um am Anfang eine gute Durchsuchung des Parameterraumes zu garantieren. Der Ablaufplan sollte am Anfang die Temperatur schneller, am Ende langsamer senken, um die Qualität der Lösung zu verbessern.

Kopplung Simulated-Annealing - Downhill-Simplex

Das gekoppelte Verfahren wurde auf der Struktur des klassischen Simulated-Annealing aufgebaut. Anstatt aber für eine bestimmte Temperatur T_j N zufällige Punkte zu testen, werden ein Simplex und N -Änderungsschritte dieses Simplex, so wie sie in

Abb. 2.2 dargestellt wurden, verwendet. Bei jeder Prüfung, ob ein neuer Punkt einen alten im Simplex ersetzen soll, wird von f_{neu} ein zufälliger, logarithmisch verteilter und zu T_j proportionaler Verbesserungsterm $T_j \cdot \log(\omega)$ subtrahiert und zu f_{alt} ein ähnlicher Verschlechterungsterm addiert. Ein besserer Punkt wird auf jeden Fall akzeptiert, ein schlechterer nur manchmal. Für $T \rightarrow 0$ sind die addierten Terme gleich 0 und der Algorithmus wird zum klassischen Downhill-Simplex. Als Ablaufplan wird T über $T_j = \alpha_j T_{j-1}$, $\alpha_j = \alpha_{j-1}/\gamma$ mit $0 < \alpha_j < 1$ und $0 < \gamma < 1$ gesenkt. Das Flussdiagramm des Algorithmus für einen dreidimensionalen Parameterraum ist in Abb. 2.3 dargestellt.

Das rein mathematische Problem der Optimierung einzelner Zielfunktionen für hydrologische Modelle kann also mit Hilfe solcher Verfahren als gelöst angesehen werden. Dagegen sind die Probleme der Interaktionen und Kompensierungen im Parameterraum, der Existenz zahlreicher Punkte mit praktisch gleich guten Werten der Zielfunktionen, sowie der Auswahl der richtigen Zielfunktionen noch sehr aktuell. Sie werden unter dem Titel Unsicherheitsanalyse zusammengefasst und in Kap. 2.4 besprochen.

2.2 Physikalisch-basierte hydrologische Modelle

Im Unterschied zu den konzeptionellen Modellen liegt der Fokus bei einem physikalisch-basierten (oder prozess-basierten) Modell nicht auf der Berechnung der Endergebnisse (meistens dem Gesamtabfluss) sondern auf der akkuraten Nachbildung der signifikanten physikalischen Prozesse. Deswegen geht der Aufbau des Modells nicht wie in Kap. 2.1.2 beschrieben von der Übertragung des Eingangssignals in das Ausgangssignal aus, sondern von den physikalischen Grundgesetzen, das heißt von den Gleichungen der Massen-, Impuls- und Energieerhaltung. Mittels des Infinitesimalprinzips werden die Gesetze einzelner Prozesse als partielle Differentialgleichungen geschrieben und dann im Modell numerisch implementiert und gelöst.

Die drei wesentlichen physikalischen Prozesse der Abflusskonzentration sind:

- die Wasserströmung in der ungesättigten Zone;
- die Wasserströmung in der gesättigten Zone;
- die Wasserströmung im Gerinne.

Die nächsten Absätze (Kap. 2.2.1) beschreiben die theoretischen Grundlagen der drei Prozesse. Die Grundgleichungen, die in Modellen numerisch implementiert und gelöst werden müssen, werden zusammen mit den Hauptparametern und der Prozessskala vorgestellt. Kapitel 2.2.2 stellt dann die klassische Integration einzelner sektoraler Modelle der Abflusskonzentration in einer gemeinsamen Struktur am Beispiel des Modells, das im Rahmen des Forschungsprojektes GLOWA-Danube entwickelt wurde, vor.

2.2.1 Theoretische Grundlage der Abflusskonzentration

Die Wasserströmung in der ungesättigten Zone

Aus der erweiterten Darcy-Gleichung und aus der Kontinuitätsgleichung wird die Richards-Gleichung abgeleitet, die die theoretische Grundlage für die Berechnung der Wasserbewegung im porösen ungesättigten Untergrund bildet. In der Abwesenheit jeglicher Heterogenitäten handelt es sich um eine allein vertikale Strömung; die Gleichung wird also für den eindimensionalen Fall geschrieben:

$$\frac{\delta\Theta}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta z} \left[k_f(\Theta) \left(\frac{\delta\Psi}{\delta z} - 1 \right) \right] + w(\Theta, z) \quad (2.14)$$

Θ der effektive Wassergehalt [-]

$k_f(\Theta)$ die hydraulische Durchlässigkeit [L/T]

ψ das Matrixpotential [L]

$w(\Theta, z)$ der Quellen- bzw Senkenterm [L³/T]

Die Wasserströmung in der gesättigten Zone

Die Strömung in der gesättigten Zone wird analytisch von der Boussinesq-Gleichung beschrieben. Wie die Richards-Gleichung wird sie aus der Darcy-Gleichung und der Kontinuitätsgleichung abgeleitet. Die wesentlichen Änderungen sind, dass die piezometrische Höhe h das Matrixpotential Ψ (in der gesättigten Zone zu Druckpotential umbenannt) als Variable ersetzt ($h = z + \Psi$) und dass bei einem konstanten Wassergehalt $\Theta = 1$ die Durchlässigkeit k_f konstant wird. Die wichtigste Komponente ist jetzt von der horizontalen Strömung gegeben, so dass es sich um ein mindestens zweidimensionales Problem handelt. Für den homogenen isotropen dreidimensionalen Fall lautet die Boussinesq-Gleichung:

$$\frac{\delta}{\delta x} \left(h \frac{\delta h}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left(h \frac{\delta h}{\delta y} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(h \frac{\delta h}{\delta z} \right) = \frac{S}{k_f} \frac{\delta h}{\delta t} + w \quad (2.15)$$

S der Speicherkoeffizient [-]

Die Wasserströmung im Gerinne

Die Erhaltung der Masse und der Energie für ein fließendes Oberflächengewässer schreibt sich eindimensional in der Form der Saint-Venant-Gleichungen. Wenn keine lokale Probleme untersucht werden (z.B. das Strömungsfeld in der Nähe einer Wasserentnahmestelle oder in einer Flussbiegung), ist eine eindimensionale Betrachtung in der Regel ausreichend:

$$\frac{\delta Q}{\delta x} + \frac{\delta A}{\delta t} - w = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{1}{A} \frac{\delta Q}{\delta t} + \frac{1}{A} \frac{\delta}{\delta x} \left(\frac{Q^2}{A} \right) + g \frac{\delta y}{\delta x} + g (I_e - I_s) = 0 \quad (2.17)$$

Q der Durchfluss [L³/T]

A die durchflossene Fläche der Fließquerschnitt [L^2]

I_e das Reibungsgefälle [-]

I_s das Gerinnegefälle [-]

Wegen des hohen Daten- und Rechenaufwandes werden die Saint-Venant-Gleichungen selten vollständig in Modellen implementiert. Mehrere vereinfachende Ansätze sind vorhanden. Wenn die Trägheitsglieder in der Energiegleichung 2.17 (die ersten beiden Terme) vernachlässigt werden, ergibt sich aus Gl. 2.16 und Gl. 2.17 sich der Diffusionswellenansatz:

$$\frac{\delta Q}{\delta t} = D \frac{\delta^2 Q}{\delta x^2} - u \frac{\delta Q}{\delta x} + u \cdot w \quad (2.18)$$

u die Wellengeschwindigkeit [L/T]

D der Diffusionskoeffizient [L^2]

2.2.2 Integration einzelner Prozesse in einer integrativen Modellstruktur am Beispiel des Forschungsprojektes GLOWA-Danube

Basierend auf den in den letzten Absätzen beschriebenen Gleichungen lassen sich prozess-basierte sektorale Modelle bilden. Um den Wasserkreislauf eines Teileinzugsgebietes zu schließen, müssen die sektoralen Modelle miteinander gekoppelt werden. Die Kopplung kann innerhalb eines einzigen integrativen Modells (z.B. das Modell MIKE SHE, ABBOTT 1986) oder innerhalb eines Modellierungskomplexes aus in sich selbständigen Modellen geschehen. Die zweite Variante wurde im Forschungsprojekt GLOWA-Danube ausgewählt, in dem der Modellierungskomplex DANUBIA entwickelt wird. DANUBIA bildet im gewissen Maße den Rahmen für die vorliegende Arbeit, deshalb wird es hier kurz vorgestellt (für eine detaillierte Beschreibung siehe MAUSER und STRASSER 2004).

Wie in der Einführung bereits erwähnt, beschäftigt sich GLOWA-Danube mit der Entwicklung von Modell-Werkzeugen, mit deren Hilfe die Auswirkungen des globalen Wandels der sozioökonomischen Randbedingungen und des Klimas auf den Wasserkreislauf des Einzugsgebietes der Oberen Donau untersucht werden können. Der Modellierungskomplex DANUBIA besteht aus 15 Teilmodellen, die den gesamten Wasserkreislauf, sowohl aus hydrologischer als auch aus sozioökonomischer Sicht, beschreiben.

Abb. 2.4 zeigt die Modellstruktur im hydrologischen Teil von DANUBIA. Sie besteht aus drei Hauptmodule: einem Landoberflächenmodul mit mehreren integrierten Modellen, einem Grundwassermodell und einem Fließgewässermodell. Die drei Modelle rechnen auf einem gemeinsamen Raster und tauschen zu jedem Zeitschritt die nötigen Variablen, die die Randbedingungen jedes Modells bilden, aus.

Das **Landoberflächenmodul** basiert auf dem SVAT-Modell PROMET (MAUSER 1989) und seiner Erweiterung PROMET-V (SCHNEIDER 1999). Mit meteorologischen Daten (modellierten Ergebnissen oder interpolierten Messwerten) als Input findet hier die Modellierung der Abflussbildung und des ersten Teiles der Abflusskonzentration statt. Es enthält die folgenden vier Hauptkomponenten:

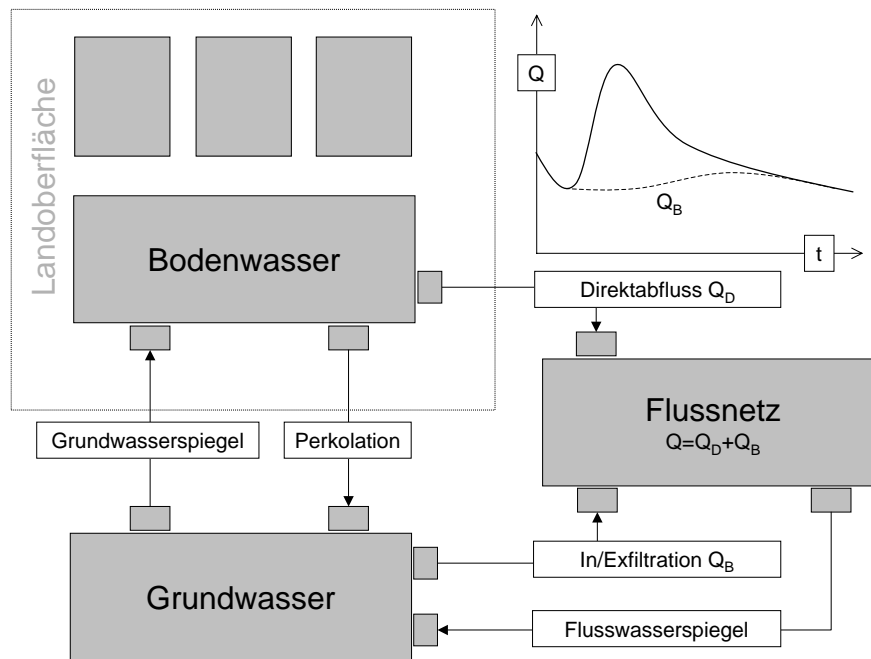


Abbildung 2.4: Die Struktur des gekoppelten DANUBIA-Modells (nach WOLF 2006)

- Das Strahlungsbilanzmodell verteilt die meteorologischen Parameter im Vegetationsbestand, sofern er auf der Landoberflächen vorhanden ist. Falls das Modell mit einem meteorologischen Modell gekoppelt ist (MM5 in GLOWA-Danube), liefert das Strahlungsbilanzmodell auch die nötige Rückkopplung.
- Das Schneemodell modelliert den Aufbau und den Abbau der Schneedecke und die Gletscherflächen in Abhängigkeit von den meteorologischen Parametern, den Ergebnissen des Strahlungsbilanzmodells und der Landnutzung.
- Das Pflanzenwachstumsmodell simuliert die Entwicklung der Biomasse in jeder Rasterzelle und ihren Einfluss auf den Wasserkreislauf durch die Berechnung der Transpiration.
- Das Bodenwasserhaushaltsmodell teilt den effektiven Niederschlag in Infiltration in den Boden und Oberflächenabfluss und berechnet den Bodenwasserhaushalt mit der Infiltration und dem kapillaren Aufstieg als Input. Die Gl. 2.14 wird mit Hilfe der Lösung von EAGLESON (1978) und eines dreischichtigen Kaskadenmodells gelöst. Überschüssiges Wasser aus den obersten zwei Bodenschichten (Q_D in Abb. 2.4) wird an die Fließgewässer abgegeben, die Perkolations aus der dritten Schicht wird an das Grundwassermodell weitergegeben.

Das **Grundwassermodell** hat als Aufgabe, den Grundwasserspiegel in jeder Rasterzelle und den Grundwasserabfluss in jeder Flusszelle zu berechnen. Die allgemeine Grundwasserströmungsgleichung 2.15 wird mit Hilfe des MODFLOW-Modells umgesetzt und gelöst. MODFLOW (MCDONALD und HARBAUGH 1988) wendet die Methoden der Finiten-Differenzen an, um das Gleichungssystem numerisch zu lösen und

ist damit für das raster-basierte DANUBIA besonders geeignet. Zusätzlich ist es international anerkannt und frei verfügbar. Das MODFLOW-Modell für das Einzugsgebiet der Oberen Donau basiert wiederum auf einem hydrogeologischen mehrschichtigen Konzeptmodell (WOLF 2006), in dem die wichtigsten regionalen Grundwasserleiter explizit berücksichtigt werden.

Das **Flussnetzmodell** hat die Aufgabe, den auf der Fläche verteilten Oberflächenabfluss bis in das Gewässernetz zu konzentrieren und anschließend das Routen des Abflusses in den Gewässern von Pegel zu Pegel durchzuführen. In Abhängigkeit von der Datenverfügbarkeit werden dafür das konzeptionelle Muskingum-Routingmodell (McCARTHY 1938) oder der Diffusionswellenansatz (Gl. 2.18) angewandt

Die Austauschvariablen zwischen den Modellen werden in Abb. 2.4 in den weißen Kästchen aufgelistet und hier nicht mehr wiederholt. Die Kopplung der drei Modellen kann, abhängig von der Aufgabenstellung und dem Detaillierungsgrad, unterschiedlich kompliziert gehandhabt werden. Die Erfahrung mit DANUBIA hat gezeigt, dass für mesoskalige Studien schwierige Grenzsituationen in der Regel nicht relevant sind. So kann z.B. die Anhebung des Grundwassers bis in der festgelegten zwei Meter dicken Bodenzone zu ernstesten numerischen Problemen führen, weil das gleiche Wasser von beiden Modellen gleichzeitig betrachtet wird. Eine pragmatische Lösung wurde dafür gefunden, die die Gesamtbilanz und die numerische Stabilität beachtet, ohne allerdings ausführliche Analysen von speziellen Fällen wie Mooregebieten zu zulassen.

2.3 Hydrologische Modellierung des Sickerraumes

Wenn man die Modellstruktur in Abb. 2.4 mit dem allgemeinen Schema der Abflusskonzentration (Abb. 1.1, Seite 2) vergleicht, fällt auf, dass das Modell den Sickerraum vernachlässigt. Die Perkolation, die PROMET als Fluss aus der letzten Bodenschicht berechnet, wird direkt als Grundwasserneubildung an das Grundwassermodell weitergegeben. Diese Vereinfachung wird durch den Mangel an Standardlösungen und Daten für die Integration des Sickerraumes in das Modell motiviert. Das Modell wird jedoch auf das Einzugsgebiet der Oberen Donau angewandt, ein Gebiet mit einer sehr reliefreichen Morphologie. In großen Teilen des Gebietes (die Alpen im Süden, die Tertiärhügel im Molassebecken, der Oberpfälzer Wald im Nordosten, siehe die Gebietsbeschreibung in Kap. 2.5, Seite 33) beträgt der vertikale Abstand zwischen der Bodenzone und dem modellierten regionalen Grundwasserspiegel mehrere hundert Meter. Eine temporäre Lösung im Projekt GLOWA-Donau ist die Umleitung eines Anteiles der Perkolation aus dem Boden direkt zum Flussnetz (Weitergabe der Flüsse ohne jeglicher Veränderung) in Anlehnung an dem Zwischenabfluss, allerdings ohne eine begründete Quantifizierung dieses Anteiles. Um den Anspruch eines Modells wie DANUBIA, physikalisch-basiert den Wasserkreislauf zu modellieren, aufrecht zu erhalten, es ist wichtig, darüber hinaus zu gehen und einen fundierteren Ansatz für die explizite hydrologische Betrachtung des Sickerraumes zu entwickeln.

Klassische physikalisch-basierte Modelle wie MIKE SHE machen die Annahme, dass der Sickerraum eine homogene ungesättigte Zone ist. In einer Arbeit über Zeitverschiebungen zwischen Infiltration und Grundwasserneubildung prüfen COOK et al. (2003) diese Annahme, die impliziert, dass die Zeitverschiebungen durch die Lösung der Richards-Gleichung (2.14) berechnet werden können. Bei einem Flurabstand von

50 m dauert es für einen homogenen lehmigen Sand 125 Jahre, bis das infiltrierte Wasser die gesättigte Zone erreicht. Eine komplette Einstellung der Infiltration würde nach 50 Jahren zu einer Verkleinerung von nur 20% der Grundwasserneubildung führen; fast 100 Jahre wären für eine Abnahme von 60% nötig.

Sickerwasser-Datierungen in tiefen ungesättigten Zonen mittels Messungen von Tracerkonzentrationen (EDMUNDS und TYLER 2002) bestätigen die analytischen Ergebnisse durch Altersschätzungen von vielen Tausenden von Jahren. Die Zahlen deuten an, dass die mittlere Eigenschaften der Bodenmatrix für den jährlichen Wasserkreislauf nur eine geringe Rolle spielen. Die quantitativ signifikanten Flüsse müssen fast vollständig von den Heterogenitäten bestimmt werden. Im Festgestein handelt es sich um die Klüfte und die Brüche in der Gesteinsmasse, im Lockergestein um durchlässige bevorzugte Fließwege.

Deterministische Ansätze für die Berechnung des Fließens durch Klüfte oder bevorzugte Fließwege bei bekannter Geometrie sind vorhanden (PRUESS 1999). Für mesoskalige Studien gibt es in der Regel keine Möglichkeit, die Struktur der Heterogenitäten auf der Mesoskala für den tiefen Untergrund messtechnisch zu erfassen. Damit ist eine direkte prozess-basierte Modellierung des Sickerraumes nur schwer vorstellbar. Man ist dazu gezwungen, über indirekte Information und Strategien die effektiven Eigenschaften zu bestimmen und damit den Raum in das Modell zu integrieren. Mehrere Lösungen, das Problem anzugehen, sind in der Literatur vorhanden. In Ergänzung zu Kap. 1.2.3 werden einige von ihnen in den nächsten Abschnitten beschrieben:

- Anwendung von Ganglinienanalyseverfahren: die wahrscheinlich am häufigsten angewandte Methode besteht darin, die Ganglinie des Gesamtabflusses zu analysieren und in mehrere Komponenten aufzuteilen. Die Komponenten werden dann unterschiedlichen physikalischen Abflussherkunftsräumen zugeteilt und mit dem Ziel analysiert, die effektiven Eigenschaften dieser Räume zu bestimmen. Mit der Frage der Zuverlässigkeit solcher Methoden beschäftigt sich ausführlich Kapitel 3, in dem die Methoden auch zum Einsatz kommen.
- Wasserbilanzansätze: Für Grundwassermodelle ist es besonders wichtig eine richtige Schätzung der Grundwasserneubildung als Modellinput zu haben. Auf der anderen Seite ist der Sickerraum nur eine Randbedingung für Grundwassermodelle, so dass möglichst stabile und einfache Lösungen gesucht werden. Kap. 2.3.1 beschreibt mehrere solcher Ansätze.
- Ansätze der konzeptionellen Modellierung: Niederschlags-Abfluss-Modelle schließen den Wasserkreislauf des Einzugsgebietes, um den stündlichen oder täglichen Gesamtabfluss zu berechnen. Da sie aber nicht an eine akkurate Abbildung einzelner Prozesse und Räume gebunden sind, lässt sich das Problem über die geschickte Auswahl der Modellstruktur und der Modellierungsstrategie umgehen (Kap. 2.3.2). Zusammen mit dem Wasserbilanzansatz der Grundwassermodelle wird dieser Punkt im Kapitel 4 nochmal aufgegriffen, wo er in einer angepassten Form angewandt wird.

Die Auflistung berücksichtigt keine Studien, die Tracer-Informationen verwenden, obwohl die Analyse der Tracer-Daten ein bedeutendes Potential für die Lösung des

Problems hat. Da solche Daten für die vorliegende Arbeit nicht vorhanden waren, wird auf die Beschreibung dieser Methoden verzichtet.

2.3.1 Der Sickerraum aus der Sicht von Grundwassermodellen

Der treibende Impuls für das Strömungsfeld eines Grundwasserleiters ist die flächenverteilte Grundwasserneubildung (GWN). Dies ist der Grund, warum die GWN-Berechnung einer der wichtigsten Schritte bei dem Aufbau eines Grundwassermodells ist. Wenn der Grundwasserspiegel nahe an der Oberfläche liegt, können Lysimeter-Messdaten oder berechnete Schätzungen der Evapotranspiration eingesetzt werden, um aus den Niederschlagszeitreihen relativ sichere GWN-Werte abzuleiten. Wenn aber tiefe Sickerräume vorliegen, sind solche Lösungen nicht mehr direkt anwendbar.

Wenn viele Messdaten über die Eigenschaften des Aquifers und über seinen Zustand (Grundwasserspiegel) vorliegen, kann man versuchen, über inverse Modellierung die Grundwasserneubildung so zu bestimmen, dass das Modell die Messdaten gut nachbildet (CHRISTENSEN et al. 1998). Problematisch ist hier die nur ungenaue Bestimmbarkeit der Aquiferparameter, die zulässt, anhand des Darcy-Gesetzes verschiedene Durchflussmengen für die gleichen piezometrischen Gradienten berechnet werden können. CHRISTENSEN et al. (1998) berichten über eine ausführliche Analyse, in der das Grundwassermodell nicht nur an Grundwasserspiegel sondern auch an Abflüsse in Gewässern angepasst wurde. Zusätzlich wurde bei der Parametrisierung eine sehr detaillierte geologischen Beschreibung berücksichtigt. Trotzdem lag die Unsicherheit der GWN-Bestimmung in größeren Einzugsgebieten bei bis zu 25%, für kleinere Raumeinheiten lag sie bei bis zu 60%.

STONE et al. (2001) oder CHAVEZ et al. (1994) stellen Ansätze vor, in denen eine konstante GWN berechnet wird. Dafür wird die Gesamtbilanz eines Einzugsgebietes anhand konzeptioneller Verfahren (z.B. die Maxey-Eakin-Methode für die Berechnung der GWN als Funktion des Niederschlags und der mittleren Geländehöhe) berechnet. Die Hauptannahme, dass die GWN konstant über die Zeit bleibt, könnte angesichts des trägen Charakters eines Grundwasserleiters für spezifische Fragestellung begründet sein. HERRON und WILSON (2001) zeigten allerdings, dass die Grundwasserneubildung in einem von ihnen untersuchten bergigen alluvialen Schuttfächer nach verschiedenen Niederschlagsereignissen abhängig vom Verlauf des Ereignisses und vom Anfangszustand zwischen 29% und 80% des Gesamtabflusses ausmachen kann. Im Rahmen eines hydrologischen Modells ist also diese Hauptannahme nicht akzeptabel und muss durch die Berechnung einer zeitlich variablen Grundwasserneubildung ersetzt werden.

Es stellt sich damit die Frage, ob ein Grundwasserströmungsmodell, das erst als ein stand-alone sektorales Modell konzipiert und parametrisiert wird, direkt in einem hydrologischen Modell integriert werden kann. Mit den Problemen, die daraus resultieren, beschäftigt sich Kapitel 4.

2.3.2 Der Sickerraum aus der Sicht konzeptioneller Niederschlags-Abfluss-Modelle

In konzeptionellen hydrologischen Modellen ist der Sickerraum wie die Boden- oder die Grundwasserzone auch als physikalischer Raum nicht explizit mitberücksichtigt.

Vielmehr wird er mit einem Zwischenabfluss, der schneller als der Basisabfluss und langsamer als der Direktabfluss ist, assoziiert. Unterschiedliche mathematische Formen werden für die Konzentration der drei Komponenten implementiert. Die große Mehrheit der Modelle benutzen dafür das Konzept des Speichers (SINGH 1995). Die Speicherparameter werden durch Kalibrierung an gemessenen Gesamtabflussdaten bestimmt.

Diese Strategie ist berechtigt und effizient, solange das Modell allein für die Prognose des Gesamtabflusses unter veränderten Niederschlagsbedingungen gebraucht wird. Für diese Fragestellung ist die physikalische Signifikanz einzelner Parameterwerte nicht von Interesse, sondern nur ihre Validierung, in der das Modell die gemessenen Gesamtabflüsse anhand neuer Daten richtig nachrechnen muss. In diesem Kontext spielen die Fragen, wie groß der Zwischenabfluss ist und aus welchem physikalischen Raum er stammt, keine Rolle.

In Kapitel 4 und 5 wird die Strategie der automatischen Anpassung der Modellparameter anhand gemessener Datensätze angewandt, allerdings konzentriert sich die Arbeit nicht nur auf die Güte der Anpassung sondern sehr intensiv auf die Unsicherheit in der Bestimmung der Parameter und auf ihre physikalische Interpretierbarkeit, mit dem Ziel die Aussagekraft und den Anwendungsbereich der Modelle zu erhöhen. Die Methoden, die für die Analyse der Unsicherheit bei diesem Vorgehen zum Einsatz kommen, werden in den nächsten Textabschnitt 2.4 beschrieben.

2.4 Unsicherheiten in der hydrologischen Modellierung

Die Quantifizierung der Unsicherheiten ist zur Zeit einer der wichtigsten Streitpunkte in der hydrologischen Modellierung. Dies hat praktische und wissenschaftlichen Gründe (SCHAEFLI 2005): wenn hydrologische Simulationen für die Unterstützung von Entscheidungen im Management- oder Planungsbereich eingesetzt werden, ist die Bewertung der Zuverlässigkeit der Ergebnisse unerlässlich. Aus Sicht der Modellierung ist die Unsicherheitsanalyse für das Verstehen des Modellverhaltens und für seine Verbesserung ebenfalls unabdingbar.

Die Unsicherheit in der hydrologischen Modellierung hat zwei Quellen (KAVETSKI et al. 2003): die Unsicherheit in den Input- und Outputdaten des Systems (insbesondere bei der Schätzung des flächenverteilten Niederschlags) und die strukturelle Unsicherheit, die mit den Vereinfachungen und den Fehlern im Modellkonzept assoziiert wird. Die Analyse ihrer Wirkung auf das hydrologische Modell konzentriert sich auf zwei Aspekte:

- die Quantifizierung der Unsicherheit der Modellergebnisse. Sie kann gegenüber den gemessenen Daten erfolgen: Dies geschieht während der Validierung durch die Prüfung der Modellgüte. Sie kann auch über die Streuung mehrerer Modellergebnisse quantifiziert werden, die alle mittels der ausgewählten Zielfunktionen als gleich gut bewertet werden.
- die Quantifizierung der Unsicherheit in der Bestimmung der Parameterwerte (oder deren Gegenteil: die Bestimmbarkeit der Parameter). Es stellt sich hier die Frage nach der Zuverlässigkeit der Parameterwerte, die anhand inverser Modellierung bestimmt wurden.

Das Streben nach einem optimalen oder wahrscheinlichsten Parametersatz war lange der bevorzugte Ansatz zur Lösung der beiden Probleme. Der Beweis (z.B. DUAN 1992, siehe auch Kap. 2.1.3), dass es einen solchen Satz in der Regel nicht gibt, führte zur Entwicklung zweier Konzepte:

- das Verwerfen des Optimierungskonzeptes und die Berechnung einer a posteriori Parameterverteilung, die an die Güte des Modells zu konditionieren ist (BEVEN und BINLEY 1992, KUCZERA und PARENT 1998). Kapitel 2.4.1 behandelt das Thema mit Fokus auf die GLUE-Methode (Generalised Likelihood Uncertainty Estimation).
- das Ersetzen der einfachen Optimierung mit einer Mehrziel-Optimierung und dem Bilden eines optimalen Pareto-Satzes (YAPO et al. 1997, GUPTA et al. 1998). Der Ansatz wird in Kapitel 2.4.2 vorgestellt.

Für die Bestimmbarkeit eines Modellparameters spielt seine Sensitivität eine große Rolle, d.h. das Ausmaß der Änderung in den Modellergebnissen als Folge einer Änderung seiner Werte (SNOWLING und KRAMMER 2001). Einzelne Parameter können aber sensitiv sein und trotzdem nicht oder nur sehr schlecht bestimmbar. Man spricht dann von einer Unsensitivität der Parametersätze (UHLENBROOK et al. 1999): Mehrere Parameter des Modells können ihre jeweilige Wirkung auf die Endergebnisse kompensieren. Als Ergänzung zu der GLUE- und der Mehrziel-Optimierungsanalyse beschäftigt sich deshalb Kapitel 2.4.3 mit der Untersuchung solcher Wechselbeziehungen. Der Schwerpunkt wird auf die Beschreibung der linearen Hauptkomponentenanalyse (JOLLIFFE 1986) gesetzt, die später in dieser Arbeit zum Einsatz kommt. Das Konzept der Modelldimensionalität, die kleinste Anzahl der Modellparameter, die für die Beschreibung der Messdaten notwendig sind, wird ebenfalls eingeführt.

2.4.1 Die GLUE-Methode

Detaillierte Untersuchungen des Parameterraumes für hydrologische Modelle haben gezeigt, dass er von einer sehr großen Anzahl von lokalen Optima charakterisiert wird. Unabhängig von der ausgewählten Zielfunktion ist ihre Modellgüte extrem ähnlich. BEVEN und BINLEY (1992) haben als Konsequenz das Optimum-Konzept angefochten und statt dessen die Equifinality vorgeschlagen: Die Koexistenz mehrerer Lösungen (Parametersätze), die mit den Daten gleich konsistent sind. Der Ursprung der Equifinality befindet sich in der Wechselbeziehungen in der Modellstruktur zwischen Prozessen und zwischen Parameterwerten und in der begrenzten Datenverfügbarkeit.

Wichtig ist, dass die Parameter nicht unabhängig voneinander betrachtet werden. Die Aussage der Equifinality ist nicht, dass für jeden Parameter mehrere Werte zu gleich guten Ergebnissen führen, sondern dass es mehrere Parametersätze, also Kombinationen zwischen bestimmten Werten für jeden Parameter, gibt, die zu gleich guten Ergebnissen führen. Die Analyse der Streuung dieser Kombinationen und der damit assoziierten Modellergebnisse quantifiziert die Unsicherheit der Ergebnisse, die Bestimmbarkeit und die Sensitivität der Parameter.

Die Anwendung des Equifinality-Konzeptes wird in der GLUE-Methode zusammengefasst (BEVEN und BINLEY 1992, FREER et al. 2003). Das Ziel der Methode ist

eine repräsentative Stichprobe des Parameterraumes, d.h. eine a priori Parameterverteilung, zu erzeugen und sie mittels des Modells zu einer a posteriori Parameterverteilung zu konditionieren. Ein Maß der Likelihood, das die Güte des Modells für jeden Punkt quantifiziert, und eine Akzeptanzgrenze (threshold) der Güte werden ausgewählt und damit die Stichprobe in zwei Teile getrennt. Nach der Terminologie von HORNBERGER und SPEAR (1981) werden die Punkte als behavioural, wenn sie den Akzeptanztest bestehen, oder als non-behavioural im entgegengesetzten Fall klassifiziert. Die Lösung des Problems ist die Gruppe der behavioural Parametersätze und der entsprechenden Modellergebnisse. Die Analyse der Streuung innerhalb der Gruppe führt zu den gesuchten Indikatoren der Unsicherheit der Modellierung.

Das GLUE-Verfahren beinhaltet die folgenden Schritte:

- die Festlegung eines zulässigen Parameterraumes, in dem die Parameter während der Generierung der a priori Verteilung Werte nehmen dürfen;
- die Auswahl einer Sampling-Methode für den Parameterraum. Monte-Carlo basierte Verfahren mit unterschiedlichen Komplexitätsgraden werden hier verwendet (BEVEN 2000, KUCZERA und PARENT 1998): vom einfachen Direct-Sampling bis zu komplizierteren Markov-Ketten-Erweiterungen;
- die Festlegung eines Likelihood-Maßes und einer Grenze zwischen behavioural und non-behavioural Parametersätzen. Die Subjektivität dieses letzten Punktes wurde kritisiert. FREER et al. (2003) argumentieren aber, dass, solange es keine objektiven Kriterien gibt, eine auf der Erfahrung basierte Auswahl und ihre klare Aussage ein zulässiges Vorgehen ist;
- die Durchführung der Modellsimulationen für jeden Punkt, die Berechnung seiner Performanz und ihre Bewertung;
- die statistische Analyse der ausgewählten Gruppe der behavioural Parametersätze und Simulationen.

Wie die einzelnen Schritte gelöst wurden, wird in Kapitel 4.2 berichtet. Kapitel 4.3 beschreibt dann die Ergebnisse der Anwendung der Methode.

2.4.2 Die Mehrziel-Optimierungsanalyse

GUPTA et al. (1998) stimmen ebenfalls überein, dass es nicht gerechtfertigt ist, sich auf einen einzigen optimalen Parametersatz festzulegen. Sie bemerken aber, dass die vielen unterschiedlichen Sätze mit einer fast gleich guten Modellgüte nicht zu den gleichen Modellergebnissen führen. Die Modellgüte ist sehr ähnlich, die berechneten Zeitreihen können sich aber signifikant unterscheiden. Ihre Schlussfolgerung ist also nicht, dass die Parametersätze mit den Daten gleich konsistent sind (Equifinality), sondern dass das benutzte Maß der Güte die Sätze nicht ausreichend voneinander unterscheidet.

Das Problem liegt darin, dass es keine Zielfunktion gibt, die alle Aspekte der Anpassung zwischen berechneten und gemessenen Ganglinien gleichzeitig berücksichtigen kann. Die Vorteile der manuellen Trial-and-Error-Kalibrierung eines Modells liegen gerade daran, dass der Experte viele unterschiedliche Kriterien visuell anwendet, um die Güte zu charakterisieren (GUPTA et al. 2003): Das Volumen eines

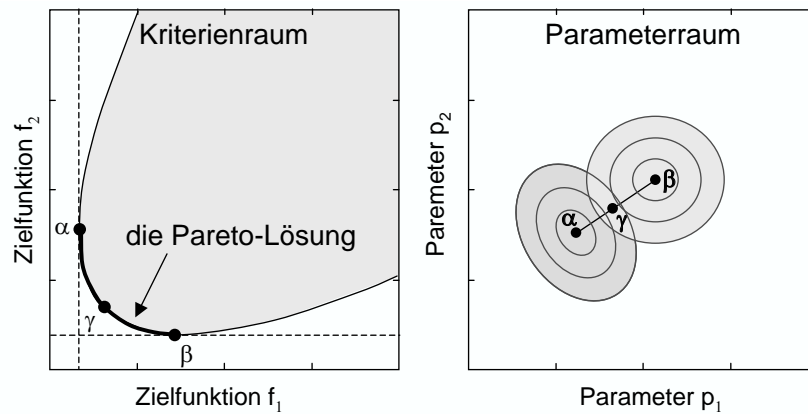


Abbildung 2.5: Pareto-Lösung für ein Problem mit zwei Parametern p_1 und p_2 und zwei Zielfunktionen f_1 und f_2 . α und β sind die Einzel-Optima, die Linie $\alpha - \gamma - \beta$ ist die Mehrziel-Pareto-Lösung (nach GUPTA et al. 2003).

Ereignisses, das Gefälle des Rückgangs, die Höhe und der Zeitpunkt des Scheitelabflusses. Ein objektiver Weg, diese Vorteile mit denen der automatischen Anpassung zu kombinieren, ist die Mehrziel-Optimierung des Modells.

Das Problem der gleichzeitigen Optimierung mehrerer Zielfunktionen in einem vorgegebenen zulässigen Parameterraum hat wegen der Fehler in den Daten und in der Modellstruktur keine einzige Lösung (siehe Abbildung 2.5). Die Verbesserung einer Funktion führt zur Verschlechterung einer anderen. Die Lösung des Problems ist der Pareto-Satz: ein Punkt gehört dazu, falls es keinen anderen Punkt im Parameterraum gibt, der für alle Zielfunktionen bessere Ergebnisse liefert. In einem Problem der Mehrziel-Optimierung sind alle Punkte im Pareto-Satz gleich optimal.

Wie bei der GLUE-Lösung erlaubt die Analyse des Pareto-Satzes die Quantifizierung der Unsicherheiten sowohl für die Modellergebnisse (die Streuung der unterschiedlichen Simulationen) als auch für die Modellparameter (die Streuung der Werte im Parameterraum).

Ein Vorteil des Ansatzes der Mehrziel-Optimierung ist, dass er die Berücksichtigung verschiedener Messdaten für die Kalibrierung des Modells erlaubt. Wenn das hydrologische Modell dazu fähig ist, z.B. den Grundwasserspiegel oder Parameter der Wasserqualität zu berechnen, lässt sich die zusätzliche Information in die Modelloptimierung explizit einbinden. Zahlreiche Studien (KUCZERA und MROCKOWSKI 1998, UHLENBROOK und LEIBUNDGUT 2002 u.a.) beweisen, dass solche Information die Bestimmbarkeit der Parameter signifikant verbessern kann.

GLUE nimmt an, dass die Quelle der Unsicherheit die Existenz einer großen Anzahl von Parametersätzen mit einer gleich guten Modellgüte ist. Die Mehrziel-Optimierung dagegen sieht die Unsicherheit als Folgerung der Tatsache, dass es keine Zielfunktion gibt, die alle Antwortmöglichkeiten eines Modells quantifizieren kann. Die Ergebnisse der beiden Methoden sind nicht widersprüchlich, sondern eher komplementär zu sehen (SCHAEFLI 2005). Deshalb erscheint ihre parallele Anwendung und ein Vergleich ihrer Ergebnisse, wie es in dieser Arbeit später gemacht wird, als sinnvolles Vorgehen. Die Unsicherheit nach der Mehrziel-Optimierung ist für ei-

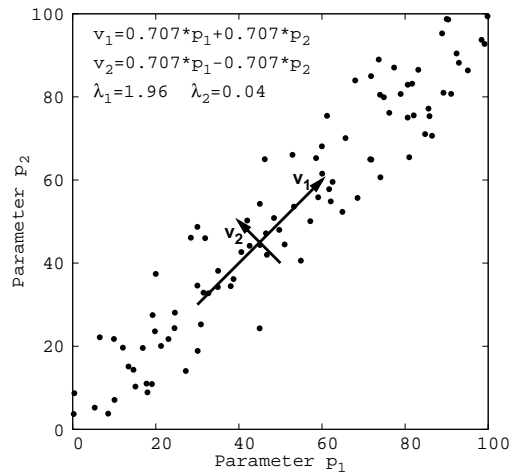


Abbildung 2.6: Darstellung der Hauptkomponentenanalyse für einen Beispieldatensatz mit zwei Parametern p_1 und p_2 . \vec{v}_1 und \vec{v}_2 sind die Hauptkomponenten (Eigenvektoren), λ_1 und λ_2 sind die Eigenwerte.

ne der Gruppe von optimalen Lösungen repräsentativ; dagegen ist die Unsicherheit nach der GLUE-Analyse (mindestens theoretisch) für den gesamten Parameterraum bezeichnend. Wie unterschiedlich die zwei Lösungen sind, und ob sie tatsächlich als ergänzend gesehen werden können, wird in Kap. 4 und 5 untersucht.

2.4.3 Wechselbeziehungen zwischen Modellparametern. Die Hauptkomponentenanalyse und die Dimensionalitätsanalyse

Die Gründe für die Unbestimmbarkeit einzelner Parameter sind die Wechselbeziehungen, die fast immer zwischen den Parametern vorhanden sind (BEVEN 2000). Mathematisch lässt sich dies mittels einer einfachen Funktion $f(p_1, p_2) = p_1 + p_2$ mit zwei Parametern p_1 und p_2 erklären. Auch wenn die f-Werte perfekt bestimmt sind, sind die von p_1 und p_2 perfekt unbestimmt wegen der Überparametrisierung von f . Ähnlich funktioniert die Überparametrisierung eines hydrologischen Modells. Die explizite Identifizierung der Wechselbeziehungen zwischen den Modellparametern leistet einen wichtigen Beitrag für das Verstehen des Verhaltens der Modellstruktur und für seine Verbesserung.

Sowohl GLUE als auch die Mehrziel-Optimierung haben als Ergebnis eine Gruppe von Parametersätzen. Da sie durch eine gute Modellgüte konditioniert werden, können solche Gruppen als Basis für die Analyse der Wechselbeziehungen benutzt werden. Die Methode, die für diesen Zweck am häufigsten zum Einsatz kommt, ist die Hauptkomponentenanalyse (JOLLIFFE 1986), die die linearen Abhängigkeiten innerhalb eines Datensatzes identifizieren kann.

Die Hauptkomponentenanalyse

Die Grundidee der Hauptkomponentenanalyse (Principal Component Analysis, PCA) ist, den untersuchten Datensatz durch einen neuen zu ersetzen, in dem die alten Parameter des Satzes mit den linearen unkorrelierten Hauptkomponenten ausgetauscht werden (JOLLIFFE 1986). Die Bedeutung jeder Komponente für die Beschreibung der Gesamtvariabilität erlaubt eine Anordnung aller Komponenten und das Beibehalten

der wichtigsten von ihnen. Das Ergebnis ist eine potentielle Reduzierung der Parameteranzahl und ein Maß für die Überparametrisierung des Modells. Die Analyse der einzelnen Komponente gibt Aufschluss über die Struktur der Wechselbeziehungen zwischen Modellparametern.

Abbildung 2.6 stellt graphisch das Konzept dar. Im angezeigten Beispiel hat der Datensatz zwei Parameter p_1 und p_2 , dessen Werte eine klare Abhängigkeit aufweisen, die durch die Hauptkomponenten \vec{v}_1 und \vec{v}_2 charakterisiert wird. Die erste Hauptkomponente \vec{v}_1 erklärt den größten Anteil (98%) der Gesamtvariabilität des Datensatzes. Die zweite Hauptkomponente \vec{v}_2 hingegen drückt die Beziehung zwischen p_1 und p_2 mit der kleinsten Variabilität aus.

Die Hauptkomponenten entsprechen den Eigenvektoren der Korrelations- oder Kovarianzmatrix des Datensatzes. Die Anordnung der Hauptkomponenten erfolgt nach der Größe ihrer Eigenwerte: \vec{v}_i entspricht dem i -größten Eigenwert λ_i . $\left(\lambda_i / \sum_{j=1}^n \lambda_j\right)$ quantifiziert den Anteil der Gesamtvariabilität des n -dimensionalen Datensatzes, die von \vec{v}_i erklärt wird. Wichtig ist, dass die Methode allein die linearen Abhängigkeiten identifizieren kann.

Die Details der praktischen Implementierung der Hauptkomponentenanalyse werden in Kap. 4.2.7 vorgestellt.

Modelldimensionalität

Die intrinsische Dimensionalität eines Datensatzes ist die kleinste Anzahl der Komponenten, die notwendig ist, um die gesamte Variabilität des Satzes zu beschreiben (KRISHNAIAH und KANAL 1982, S. 347). Die Dimensionalität ist also ein Maß für die Quantifizierung der Überparametrisierung des Feldes. Angewandt im gleichen Kontext wie die Hauptkomponentenanalyse (d.h. auf Gruppen von Parametersätzen wie GLUE oder Pareto) kann das Konzept der Dimensionalität als ein Maß der Überparametrisierung eines hydrologischen Modells benutzt werden. Nach JOLLIFE (1986) lässt sich nicht die intrinsische aber die lineare Dimensionalität anhand der Anzahl der ersten linearen Hauptkomponenten, die einen Anteil von 80 oder 90% der Gesamtvariabilität erklären, berechnen.

Obwohl die Wechselbeziehungen zwischen Modellparametern oft als Ursache für ihre Unbestimmbarkeit erkannt wurde, fehlt eine systematische Untersuchung hydrologischer Modelle zur genauen Form und Intensität dieser Beziehungen. Die Anwendung der Hauptkomponentenanalyse und die Berechnung der Modelldimensionalität soll in der vorliegenden Arbeit einen Beitrag in diese Richtung leisten. Die Ergebnisse der Anwendung werden in Kap. 4.3.3 vorgestellt.

2.5 Das Einzugsgebiet der oberen Donau

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit dem Einzugsgebiet der Oberen Donau bis zum Pegel Achleiten bei Passau (Abb. 1.2). Mit einer Fläche von 77.000 km² wird das Gebiet im Süden von den Alpen und im Norden von der Schwäbischen und Fränkischen Alb und vom Oberpfälzer Wald abgegrenzt. Das Gebiet hat ein hohes Relief mit Geländehöhen, die zwischen 285 und 3600 mNN variieren und durch ihre hohen Gradienten zu einer hohen Dynamik der hydraulischen Prozesse führen.

Die wichtigsten Nebenflüssen der Donau Iller, Lech, Isar, Vils, Salzach, Inn haben ihren Ursprung in den Alpen, die die Hauptwasserquelle des Einzugsgebietes bilden. Wegen der dort deutlich höheren Niederschlagsmengen (bis zu 2000 mm/a im Vergleich zu den 600-1000 mm/a im Rest des Gebietes), sind die alpinen Gebirge für einen großen Teil der 1390 m³/s verantwortlich, die in der Donau bei Achleiten im Mittel abfließen¹.

Für die Untersuchung des Sickerraumes und seiner Verbindung zum Grundwasser ist die hydrogeologische Situation von Bedeutung. Auch wenn die in Kapitel 4 und 5 vorgeschlagenen Modellierungsansätze nicht auf das Gesamtgebiet der Oberen Donau angewandt wurden, bildet seine Hydrogeologie die Motivation für das Modellkonzept und die Begründung für die Auswahl der Testgebiete. In der Regionalisierung der Ergebnisse der Ganglinienanalysemethoden (Kapitel 3.5) wurde ebenfalls eine hydrogeologische Klassifizierung benutzt. Die Abbildungen 2.7 und 2.8 stellen zehn aus geologischen Karten abgeleitete Basisklassen vor. Eine kurze Beschreibung jeder Klasse gibt Tabelle 2.5. Die Bearbeitung und Zusammenfassung der Information wurde von der Arbeitsgruppe durchgeführt, die am Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, den Grundwasser-Teil des GLOWA-Danube Projektes bearbeitete.

Der durchlässigste und oberste Aquifer ist das Quartär (BK 10), das deshalb auch der wichtigste Aquifer für den hydrologischen Kreislauf ist. Der größte Teil des meteorologischen Wasserkreislauf eines Jahres wird in diesem Grundwasserleiter umgesetzt, der aus der im Quartär abgelagerten alluvialen Sedimentfracht besteht. Nur im Nordosten des Einzugsgebietes (Schwäbische und Fränkische Alb) wird der gut durchlässige Malmkarst (BK 5) zum wichtigsten Grundwasserleiter. Das bis zu 5000 m mächtige tertiäre Schichtpaket (BK 7 und BK 8) hat auf der regionalen Skala betrachtet eine kleine bis sehr kleine Durchlässigkeit und ist damit ein Grundwassergeringleiter. Seine sehr große Heterogenität führt aber dazu, dass lokale Formationen erhebliche Durchlässigkeiten haben.

Die Problematik des Sickerraumes ist in den Teilen des Gebietes relevant, die von einer reliefreichen Morphologie und von der Abwesenheit eines flächendeckenden gut durchlässigen Grundwasserleiters, der nah an der Oberfläche liegt, charakterisiert werden. Das ist für die Alpen im Süden der Fall, das Oberpfälzische Hügelland im Nordosten und das tertiäre Hügelland in der Mitte des Gebietes. Die Quartärtäler sind sehr durchlässig und sehr nah an der Oberfläche, so dass man dort nicht von einem bedeutsamen Sickerraum (so wie er hier definiert wurde) sprechen kann. Der Grundwasserspiegel des Malmaquifers liegt zwar teilweise sehr tief, durch seine starke Verkarstung und die daraus entstehende besondere Eigenschaften bildet er allerdings einen Spezialfall, der getrennt vom Rest bearbeitet werden sollte (LANG 1995).

Aus den Gebieten, in denen die Sickerraumproblematik von Interesse ist, wurden zwei Testgebiete ausgewählt (die Datenverfügbarkeit hat für die Auswahl ebenfalls eine Rolle gespielt): Das Gebiet der Naab (Abb. 2.9a) deckt das Oberpfälzische Hügelland und den Oberpfälzer Wald ab, das Gebiet der Ammer (Abb. 2.9b) die Alpen und teilweise die Molassesedimente. Sie werden in den nächsten Absätzen näher vorgestellt und beschrieben.

¹Eine umfassende Sammlung der Basisdaten, die für die Hydrologie des Gebietes relevant sind, kann man auf <http://www.glowa-danube.de/atlas/atlas.htm> finden.

2.5 Das Einzugsgebiet der oberen Donau

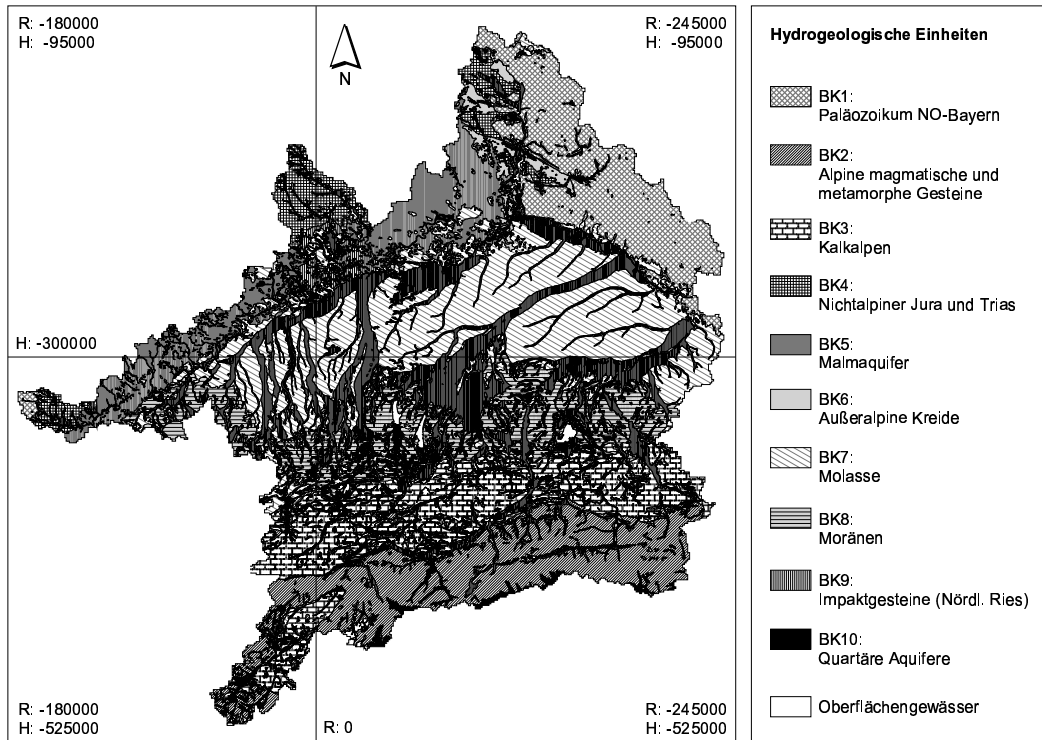


Abbildung 2.7: Geologisch-hydrogeologische Karte des Einzugsgebietes der Oberen Donau. Detaillierte Beschreibung der Basisklassen in Tabelle 2.5 (WOLF 2006).

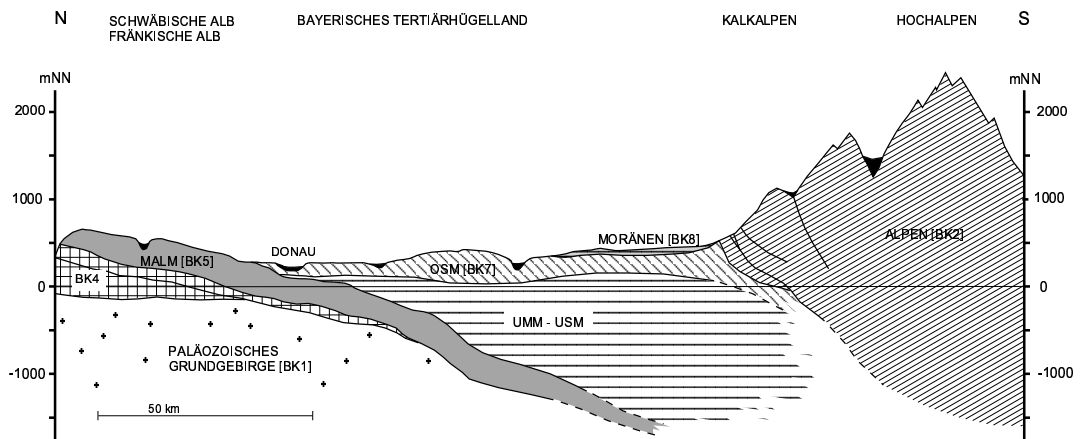


Abbildung 2.8: Schematisches geologisch-hydrogeologisches Profil durch das Einzugsgebiet der Oberen Donau (WOLF 2006).

BK1	Paläozoikum des Bayerischen und Oberpfälzer Waldes im Osten und des Schwarzwaldes im Westen, größtenteils Gneise und Granite, z.T. oberflächennah verwittert und grundwasserführend, aber nur lokal bedeutende Grundwasserleiter
BK2	Alpine magmatische und metamorphe Gesteine (Vulkanite, Granitoide, Gneise und Schiefer des Mittelostalpins) aus Trias und Jura mit sehr niedriger Permeabilität
BK3	Kalkalpen i.w.S. (+Unterengadiner Fenster): alpine Sedimente aus Trias, Jura und Kreide, vornehmlich Kalke, Dolomite und Mergel, z.T. deutlich verkarstet mit einer mittleren bis hohen Permeabilität
BK4	Außeralpiner Jura (Lias und Dogger) und Trias, undurchlässige Ton- und Mergelsteine, die wasserführenden Bereiche im Buntsandstein und Muschelkalk spielen für das Donaueinzugsgebiet keine Rolle
BK5	Malm, bedeutender Karstaquifer aus Riff- und Bankkalken mit z.T. sehr hohen Durchlässigkeiten
BK6	Außeralpine Kreide (Cenoman bis Campan), sandige und tonige Sedimente, aber auch verkarstete Kalkablagerungen, meist in hydraulischem Kontakt zum Malm
BK7	Tertiär, überwiegend Molassesedimente, wegen starker Verzahnung sandiger bis toniger Lockergesteine nur gering durchlässig, des Weiteren altquartäre Deckenschotter (z.T. sehr ergiebig, aber regional nicht zusammenhängend) und Lösssedimente
BK8	Quartäre Moränensedimente, wegen schlechter Sortierung in der Regel sehr undurchlässig, und tonige Seesedimente
BK9	Impaktgesteine des Nördlinger Rieses
BK10	Quartäre Aquifere, alluviale Kies- und Sandablagerungen mit sehr hohen Durchlässigkeiten
BK0	Oberflächengewässer, Eis und Gletscher

Tabelle 2.1: Geologisch-hydrogeologische Basisklassen im Einzugsgebiet der Oberen Donau (WOLF 2006).

2.5.1 Das Einzugsgebiet der Ammer

Aus den Kalkalpen des Ammergebirges bis zur Mündung in den Ammersee in der Jungmoränenlandschaft erstreckt sich das Einzugsgebiet der Ammer in Süd-Nord-Richtung über mehr als 40 km mit einer Gesamtfläche von 709 km². Der langjährige Niederschlag beträgt nach Daten des Deutschen Wetterdienstes (DWD) 1380 mm/a, wobei es einen mit steigender Geländehöhe signifikanten Anstieg nach Süden gibt. Auch die mittlere Temperatur variiert zwischen 4.5°C in der Bergregionen des Südens bis zu 7.5 - 8°C im Norden. Der mittlere mehrjährige Abfluss MQ am Pegel Fischen beträgt 16.6 m³/s, mit einer Spannweite zwischen $MNQ = 3.0$ m³/s und $MHQ = 199.0$ m³/s.

Die großen Reliefunterschiede (2185 mNN für die Kreuzspitze am Südrand des Gebietes und 533 mNN für den Ausgangspegel Fischen) und die Lage am Übergang zwischen den Alpen und dem Alpenvorland machen das Ammertal beispielhaft für die Geomorphologie und für die Geologie des Einzugsgebietes der Oberen Donau.

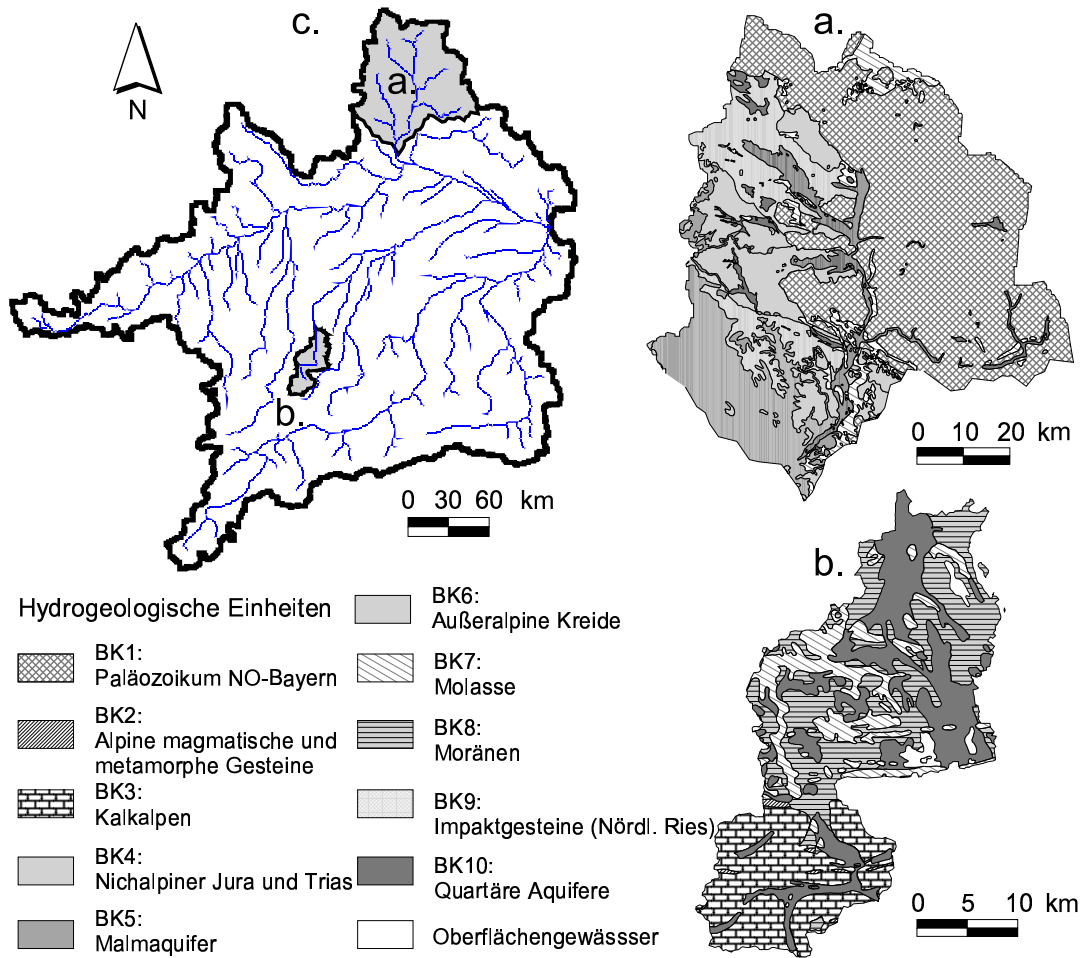


Abbildung 2.9: Die Einzugsgebiete der Naab (a) und der Ammer (b) innerhalb des Einzugsgebietes der Oberen Donau (c).

Morphologisch und hydrogeologisch (Abb. 2.9b) lässt sich das Gebiet in zwei große Teile trennen (SEILER 1977). Der Süden ist ein rein alpiner Bereich, der aus den Kalksteinen des Ostalpins (BK3) besteht. Die wichtigste Einheit ist hier der Hauptdolomit, der nur eine geringe Verkarstung und damit eine geringe Durchlässigkeit zeigt. Die Moränen- (BK8) und die Molassesedimente (BK7) in der nördlichen Hälfte haben ebenfalls meist geringe Durchlässigkeiten, wobei der relativ große Kiesanteil der Moränen durch die unsortierte Korngrößenverteilung kompensiert wird. Der Hauptgrundwasserleiter im Gebiet der Ammer besteht daher aus den alluvialen Tälern (BK10) im alpinen Bereich und aus den Schotterebenen im Alpenvorland, die mit Durchlässigkeitswerten von $10^{-3} - 10^{-2}$ m/s als sehr durchlässig zu bezeichnen sind.

2.5.2 Das Einzugsgebiet der Naab

Der nordöstliche Teil des Einzugsgebietes der Oberen Donau gehört zum Einzugsgebiet der Naab mit einer Gesamtfläche von 5512 km^2 . Zum Gebiet gehören der östliche Teil der mittleren Frankenalb, das Oberpfälzisches Hügelland, der Oberpfälzer Wald

und der südliche Teil des Fichtelgebirges. Zwischen dem Ausgangspegel Heitzenhofen an der Naab mit 334 mNN und der knapp über 900 mNN hohen Spitze des Fichtelgebirges beträgt die Reliefenergie 566 m. Das Niederschlagsfeld ist naturgemäß mit dem Relief korreliert: der mittlere Jahresniederschlag variiert zwischen ca. 600 und 1000 mm/a (STMLU 1998). Schwarzach im Osten, Heidenaab und Waldnaab im Norden und die Vils im Westen sind die Hauptzuflüsse der Naab, die im Heitzenhofen einen mittleren Abfluss von $49.2 \text{ m}^3/\text{s}$, mit einer Spannweite zwischen $MNQ = 17.6 \text{ m}^3/\text{s}$ und $MHQ = 306 \text{ m}^3/\text{s}$ aufweist.

Die einzelnen Naturräume des Gebietes der Naab können wie folgt hydrogeologisch beschrieben werden (STMLU 1998, Abbildung 2.9a):

- Der Oberpfälzer Wald und das Fichtelgebirge sind Kristallingebiete (BK1), die hauptsächlich aus Gneisen und Graniten bestehen. Das Gestein ist in seinem unverwitterten Zustand weitestgehend undurchlässig, so dass die effektive Durchlässigkeit allein von den tektonischen Störungen und von den verwitterten Zonen bestimmt wird.
- Das Oberpfälzische Hügelland besteht aus Trias-, Jura- (BK4) und Kreide-Sedimenten (BK6). Davon bilden die Trias-Sandsteine und die Kreide-Kalksandsteine Porengrundwasserleiter von regional wasserwirtschaftlicher Bedeutung. Die tonigen Jura-Schichten (Lias- und Dogger-Formationen im Norden des Gebietes) sind dagegen insbesondere für den vertikalen Wasserumsatz undurchlässig.
- Die Gesteine der Frankenalb gehören zur Malmkarst-Einheit (BK5). Die stark verkarsteten Kalk- und Dolomitgesteine bilden einen ergiebigen Kluftgrundwasserleiter, dessen Bedeutung durch die Tatsache gestärkt wird, dass weite Karstbereiche unbedeckt sind und damit günstige Voraussetzungen für eine hohe Grundwasserneubildungsrate bieten.

Die Hydrologie des Naabgebietes wird mit dem Rest des Einzugsgebietes der Oberen Donau in Kapitel 3 mit Hilfe der Ganglinienanalyseverfahren untersucht. Kapitel 4 betrachtet allein das Gebiet der Ammer und erst in Kapitel 5 wird intensiv die ausgewählte Modellierungsstrategie auf das Naabgebiet angewandt.