Verfahren der Ganglinienanalyse gehören zu den gängigen Methoden in der Hydrologie. Seit mehr als 150 Jahren (HALL 1968) kommen sie regelmäßig zum Einsatz, um einzelne Abflusskomponenten voneinander abzutrennen und ihre Eigenschaften zu bestimmen. Ihre konzeptionelle Natur hat aber dazu geführt, dass in der Literatur reichlich Beschreibungen wie "eines der verzweifeltesten Verfahren der angewandten Hydrologie" (HEWLETT und HEBBERT 1967), "die faszinierende Arena der Phantasie und Spekulation" (APPLEBY 1970), oder "die beste Methode, mit Ganglinienseparation umzugehen, ist, sie zu vermeiden" (BEVEN 2000) zu finden sind. Trotz dieser schwerwiegenden Kritik beweist die stetige Veröffentlichung neuer Algorithmen, dass das Interesse an Ganglinienanalyseverfahren nicht gebrochen ist. Die Erklärung liegt in der steigenden Notwendigkeit die Abflusskomponenten auf der Skala ganzer Einzugsgebiete zu quantifizieren, z.B. für die Berechnung des Grundwasserabflusses, der effektiven Grundwasserneubildung, der nachhaltigen Grundwasserentnahmerate oder für die hydrogeologische Charakterisierung eines Gebietes. Weil direkte Feldmessungen dafür nicht vorhanden sind, bleiben Ganglinienanalyseverfahren oft die einzige Alternative.

Auch für die Integration von Sickerräumen in Wasserhaushaltsmodelle für gekoppelte hydrologische Komplexe sind die Ergebnisse solcher Verfahren von höchster Relevanz, wenn sie als zuverlässig gelten können. Um ihre Zuverlässigkeit zu prüfen, stellt dieses Kapitel eine Studie über die Anwendbarkeit und die Konsistenz der Verfahren der Ganglinienanalyse vor. Die Studie konzentriert sich auf den Vergleich zwischen den Ergebnissen mehrerer Verfahren und auf die Interpretation der Unterschiede.

Die Hauptfrage, die hier zu beantworten ist, ist ob, der Anteil der Gesamtabflussganglinie, der von den Separationsverfahren abgetrennt wird, tatsächlich dem Grundwasser- oder dem Sickerwasserraum zugeordnet werden kann, oder ob dieser Anteil nur eine Schätzung des langsameren Teiles der Gesamtabflussganglinie ist und seine Verbindung mit bestimmten physikalischen Räumen nicht berechtigt ist.

Kapitel 3.1 gibt eine Übersicht über die Prinzipien der Verfahren, die notwendigen Voraussetzungen und die inhaltlichen Kritikpunkte. Kapitel 3.2 klassifiziert die vorhandenen Methoden nach ihrer Funktionsweise und beschreibt die wichtigsten von ihnen. In Kapitel 3.3 wird die Entwicklung und die Implementierung eines neuen Konzeptes vorgestellt, das die Anwendung der Verfahren auf alle Teileinzugsgebiete eines Einzugsgebietes ermöglicht. Die wichtigsten Ganglinienseparationsverfahren werden anhand einer im Rahmen dieser Promotion entwickelten Software auf das Einzugsgebiet der Oberen Donau angewandt und analysiert. Kapitel 3.4 stellt die Ergebnisse vor. Um die Aussagekraft der Interpretation zu erhöhen, wurde eine Regionalisierung einzelner Ergebnisse durchgeführt (Kapitel 3.5). Nach der Diskussion der Separationsverfahren, die sich allein mit der Abtrennung der Abflusskomponenten beschäftigen, beschreibt Kapitel 3.6 Methoden, die die Eigenschaften der Komponenten schätzen. Kapitel 3.7 beendet die Studie mit einer Zusammenfassung der wichtigsten gewonnenen Erkenntnisse.

## 3.1 Übersicht der Prinzipien der Ganglinienanalyse

Die gemessene Abflussganglinie an einem Flusspegel ist die integrierte Antwort des dazugehörigen oberirdischen und unterirdischen Einzugsgebietes auf den Impuls des Niederschlags. Um die Abflusskomponenten und ihre Eigenschaften voneinander abzutrennen, beruhen Ganglinienanalyseverfahren auf drei Prinzipien, die von den verschiedenen Methoden unterschiedlich umgesetzt werden:

- Die Konzentration der Abflusskomponenten erfolgt durch Fließprozesse, die durch unterschiedliche Geschwindigkeiten und Dämpfungsfaktoren charakterisiert sind. Der Oberflächenabfluss ist meist ein schnellerer Prozess als der Zwischenabfluss, der wiederum meist schneller als der Grundwasserabfluss ist. Nach einem Niederschlagsereignis treten die Komponenten mit unterschiedlichen zeitlichen Abläufen an den Messpegeln auf. Die Ganglinienanalysemethoden setzen diese dynamikorientierte Sichtweise der Abflusskonzentration um (SCHUOL 2003), indem sie zwischen schnellen und langsamen Komponenten unterscheiden.
- 2. Wenn es in einem Einzugsgebiet seit längerer Zeit nicht mehr geregnet hat, ist der Oberflächenabfluss gleich Null, das heißt, der Abfluss besteht nur aus den Komponenten, die mit den Fließprozessen im Untergrund verbunden sind. Wenn die trockene Periode länger dauert, macht sich das Entwässern des Untergrundes bemerkbar und der Abfluss nimmt ab. Das allmähliche Abnehmen des Abflusses während Zeiten mit keinem oder nur geringen Niederschlag bildet die Rezessionslinie (die Begriffe Rezessionslinie und Rückgang werden hier alternativ als Synonyme verwendet). Weil die Rezessionslinie mit der Entwässerung des Grundwasserspeichers assoziiert werden kann, können ihre Eigenschaften mit denen der Aquifere in Verbindung gesetzt werden.
- 3. Nach einer längeren Trockenzeit stammt der Abfluss ausschließlich aus dem Grundwasser. In dieser Periode ist der Abfluss deutlich kleiner als in niederschlagsreichen Zeiten. Daraus folgt, dass, genau wie die Rezessionslinien, die Niedrigwasserabflüsse als Indikator für den Grundwasserabfluss verwendet werden können.

Bestimmte Voraussetzungen müssen erfüllt sein, um die Anwendung der Ganglinienseparationsverfahren begründen zu können:

• Die ober- und die unterirdischen Einzugsgebiete müssen möglichst genau übereinstimmen, sonst ist eine sinnvolle quantitative Bilanzierung der Abflusskomponenten nur dann möglich, wenn man die Zu- und Abströme der Gebiete kennt.

- Der Pegel darf nicht nennenswert vom Grundwasser unterströmt werden, denn dieser Abflussteil wird messtechnisch nicht erfasst. Insbesondere wichtigen alluvialen Aquifer können wegen ihrer meist hohen Durchlässigkeit einen nicht vernachlässigbaren Anteil des Gesamtabflusses ableiten.
- Das Einzugsgebiet des Pegels muss groß genug sein, um die Räume, in denen die Abflusskonzentration stattfindet, als repräsentatives Elementarvolumen auf der regionalen Skala betrachten zu können. Gleichzeitig muss es klein genug sein, damit der Niederschlag gleichmäßig über die ganze Fläche fällt. Die Grenzen des Intervalls sind deterministisch nicht einheitlich bestimmbar, in der Literatur wird die untere Grenze zwischen 1 und 10 km<sup>2</sup> und die obere Grenze zwischen 500 und 1300 km<sup>2</sup> angegeben (HENNIG und SCHWARZE 2001, RUTLEDGE 1998, KÖNIG et al. 1994).
- Es dürfen keine anthropogenen Eingriffe in das System (Überleitungssysteme, Speicherseen usw.) vorliegen, denn sie verändern den zeitlichen Ablauf der Abflusskurve und erschweren eine sinnvolle Interpretation.

Der Hauptkritikpunkt an Ganglinienanalyseverfahren ist, dass die Methoden, obwohl sie auf physikalischen Prinzipien beruhen, sehr konzeptionell bleiben:

- Im Allgemeinen ist der Oberflächenabfluss schneller als die Strömung des Grundwassers, lokale Heterogenitäten im Untergrund können aber zu sehr schnellem Grundwasserfluss führen. Ein langes Niederschlagereignis oder die Schneeschmelze können das Oberflächensignal ebenfalls zu einem langsamen Signal verfälschen.
- Der Abfluss aus einem entwässernden Aquifer bildet eine Rezessionskurve ab. Die Bestimmung der Lage der Punkte, an denen diese Rezessionskurve auf einer Ganglinie anfängt/aufhört, und an denen der Oberflächenabfluss aufhört/anfängt, bleibt aber sehr ungenau. Die analytische Form dieser Kurve hängt stark von der Gebietseigenschaften ab und es ist nicht richtig, den gleichen mathematischen Ausdruck für jedes Gebiet zu benutzen.
- Es gibt keinen physikalischen Ansatz für die Ganglinienseparation für die Perioden, in denen der Abfluss steigt.
- Es gibt in der Literatur keinen Beweis und keine erfolgte Validierung von Ergebnissen solcher Methoden, da für Einzugsgebiete größer als 2-3 km<sup>2</sup> keine direkten Messdaten für den Grundwasser- oder Zwischenabfluss vorhanden sind.

Für die weiteren Anwendungen von Ganglinienanalyseverfahren in dieser Arbeit wird die die Annahme gemacht, dass die aufgelistete Voraussetzungen erfüllt sind. Ihre genaue Prüfung für jede Flussstrecke im Einzugsgebiet der Oberen Donau hätte den Rahmen dieser Arbeit gesprengt. Die Analyse wird prüfen, ob die Verfahren konsistente Ergebnissen liefern, und ob die Kritikpunkte damit aus dem Weg geräumt werden können.



Abbildung 3.1: Definition eines Abflussereignisses. links - einfaches Ereignis, rechts - komplexes Ereignis

## 3.2 Beschreibung und Klassifizierung der Ganglinienanalyse

Es gibt annähernd so viele Verfahren, wie es Veröffentlichungen in diesem Bereich gibt (TALLAKSEN 1995). Obwohl diese Aussage etwas übertrieben ist, erschwert die Vielzahl der Ganglinienseparationsverfahren den Überblick über die existierenden Techniken, über ihre chronologische und methodische Reihenfolge. Die nächsten Seiten bringen etwas Klarheit, indem die relevanten Verfahren systematisch klassifiziert und beschrieben werden. Die Auswahl wurde auf die Verfahren eingegrenzt, die sich für die automatische Bearbeitung einer großen Zahl von Abflussdaten mit einer täglichen oder gröberen Auflösung eignen. Die Klassifizierung beinhaltet fünf unterschiedliche Gruppen: graphische (Kap. 3.2.1), statistische (Kap. 3.2.2), auf der Analyse der Rückgangslinie basierte (Kap. 3.2.3), Filter (Kap. 3.2.4) und analytische Methoden (Kap. 3.2.5). Sie ähnelt der von FUREY und GUPTA (2001), mit dem Unterschied, dass hier die graphischen und die auf der Analyse der Rückgangslinie basierten Methoden voneinander abgetrennt wurden. Obwohl man die Analyse der Rückgangslinie als ein graphisches Verfahren darstellen kann, gehört sie wegen ihrer höheren Komplexität in eine eigene Klasse.

Abbildung 3.1 definiert einige Begriffe, die für die Beschreibung der Methoden wiederholt zum Einsatz kommen. Der Wichtigste ist das **Ereignis**: die Antwort des Einzugsgebietes auf ein einziges Niederschlagsereignis beobachtet auf der Abflussganglinie. Das Ereignis kann einfach oder komplex sein und kann in eine oder mehrere Anstiegsteile und Rückgangs- oder Rezessionsteile gegliedert werden.

In den weiteren Abschnitten dieses Kapitels werden für die langsame und schnelle Komponente, die aus der Abtrennung der Ganglinie resultieren, die Begriffe **Basis-abfluss**  $Q_B$  und **Direktabfluss**  $Q_D$  benutzt. Am Ende des Kapitels wird dann diskutiert, ob der Basisabfluss mit dem Grundwasserabfluss oder dem Zwischenabfluss assoziiert werden kann. Für das Verhältnis zwischen dem mittleren Basisabfluss und dem mittleren Gesamtabfluss

$$BFI = \frac{\overline{Q_B}}{\overline{Q}} \tag{3.1}$$

wird der Begriff Basisabflussindex (BFI) benutzt.

#### 3.2 Beschreibung und Klassifizierung der Ganglinienanalyse



Abbildung 3.2: Schmatische Darstellung der Ereignis-basierten graphischen Methoden. Nach PETTYJOHN und HENNING (1979) und MCCUEN (1998)

In der folgenden Beschreibung wurden die Namen der Verfahren, die später in dieser Arbeit implementiert und angewandt werden, hervorgehoben.

#### 3.2.1 Graphische Methoden

Graphische Verfahren benutzen die geometrischen Eigenschaften der Ganglinie, um den Direktabfluss vom Basisabfluss zu trennen. Für jedes Ereignis wird der obere schnell variierende Teil mit dem Direktabfluss, der untere langsam variierende Teil mit dem Basisabfluss assoziiert. Zwischen zwei Ereignissen entspricht der Basisabfluss dem Gesamtabfluss.

Abbildung 3.2 stellt einige graphischen Grundverfahren dar, die nur für einzelne Ereignisse anwendbar sind. Die gepunkteten Linien sind die Separationslinien zwischen Direkt- und Basisabfluss. NATHAN und MCMAHON (1990) teilen die Methoden in zwei Gruppen: diejenige, die annehmen, dass die Rezession des Basisabflusses nach dem Start des Ereignisses weitergeht, und die Methoden, die annehmen, dass der Basisabfluss gleichzeitig mit dem Oberflächenabfluss anfängt zu steigen. In die erste Kategorie passen die Kurven *ag, abdg* und *abfg*, in die zweite Kategorie die Kurven *acg* und *aeg* (Abb. 3.2).

Eines der ersten Verfahren, das gesamte Abflusszeitreihen in zwei Komponenten teilte, war das Natterman-Verfahren. Nach jedem Niederschlagsereignis wird "auf dem abfallenden Teil … der Punkt herausgesucht, ab dem die Kurve vom steilen in den flachen Abfall übergeht" (NATERMANN 1951). Die so gefundenen Punkte werden dann manuell verbunden. Die resultierende Linie ist die Separationslinie.

1996 veröffentlichte der U.S. Geological Survey das HYSEP-Programm (SLOTO und CROUSE 1996), das drei Methoden für automatische Ganglinienseparation implementiert: **Fixed-Interval**, **Sliding-Interval** und **Local-Minimum**. Das Pro-



Abbildung 3.3: Schmatische Darstellung der HYSEP Methoden nach SLOTO und CROUSE (1996). a - Fixed-Interval, b - Sliding-Interval, c - Local-Minima. OA -Oberflächenabfluss, BA - Basisabfluss

gramm basiert auf einer Studie von PETTYJOHN und HENNING (1979) und rechnet die manuellen Verfahren, die diese vorschlagen, numerisch nach. Die Auswahl der Tiefpunkte erfolgt nach einer älteren empirischen Beziehung:

$$N = 0.827 \cdot A^{0.2} \tag{3.2}$$

Gl. 3.2 wurde bereits von LINSLEY et al. 1975 als Faustregel für die Dauer N des Direktabflusses nach dem Erreichen des Scheitelpunktes als Funktion von der Größe A des Einzugsgebietes (in km<sup>2</sup>) verwendet. Abb. 3.3 präsentiert schematisch die Algorithmen der drei Verfahren: Basierend auf N wird eine Intervalllänge<sup>1</sup> errechnet, mit der auf drei verschiedene Arten, die Ganglinie nach Tiefpunkten abgesucht wird.

Fixed-Interval liefert meistens die größten Verhältnisse zwischen Basisabfluss und Gesamtabfluss, Local-Minimum die kleinsten (SINCLAIR und PITZ 1999). Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen sind aber relativ klein (SCHUOL 2003): Die Spannweite der BFI-Werte ist nicht größer als 0.04, was die drei HYSEP-Methoden letztendlich sehr ähnlich macht.

Die **Smoothed-Minima**-Methode wurde 1980 am Institut für Hydrologie, Wallingford UK, entwickelt (INSTITUTE OF HYDROLGY 1980). Die Methode ähnelt den HYSEP-Techniken, wobei für die Intervalllänge einfach der Wert 5 angenommen wird (für Gebietsgrößen zwischen 80 und 630 km<sup>2</sup> nimmt die Intervallänge von HYSEP auch den Wert 5 an). Der Separationsalgorithmus ist dem von Local-Minimum sehr ähnlich, mit dem Unterschied einer etwas strengeren Prüfung bei der Tiefpunktauswahl.

#### 3.2.2 Statistische Methoden

Eine andere Möglichkeit, die Abflussganglinie in mehrere Komponenten zu trennen, ist die Anwendung statistischer Ganglinienkennzahlen. Statistische Methoden beziehen sich nicht auf einzelne Ereignisse, sondern auf die Analyse ganzer verfügbaren Zeitreihen. Damit hofft man, dass spezielle Bedingungen (z.B. ein besonders ungleichmässig verteiltes Niederschlagsrereignis oder ein überdurchschnittlicher Grundwasserspiegel) durch Mittelung ihren Einfluss verlieren und dass damit spezifische Eigenschaften der Einzugsgebietes zum Vorschein kommen.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Die Intervalllänge ist die ungerade natürliche Zahl zwischen 3 und 11, die am nächsten zu 2N ist.



Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Kille-Methode: Korrektur der angeordneten MoNQ-Kurve.

Niedrigwasserabflüsse können mit dem unterirdischen Basisabfluss in Verbindung gebracht werden. WUNDT (1958) hat die Konsequenz aus dieser Idee gezogen und die monatlichen Niedrigwasserwerte (MoNQ) als ein Maß für den Basisabfluss benutzt. Die Zuteilung der MoNQ-Werte als Basisabflusswert für jeden Monat wird als das **Wundt**-Verfahren bezeichnet.

Mehrere Autoren (KILLE 1970, RIEKEL 1983, SCHRÄDER und SZYMCZAK 1984) haben angemerkt, dass für nasse Monate oder Jahre das Wundt-Verfahren zu zu hohe Basisabflusswerten berechnet. Basierend auf einer Untersuchung im hessischen Mittelgebirge und Gebirgsvorland argumentiert KILLE (1970), dass in niederschlagsreichen Monaten die *MoNQ*-Werte auch einen signifikanten Anteil am Zwischenabfluss enthalten. Um diesen Aspekt zu korrigieren, schlägt er das **Kille**-Vefahren vor. Es rechnet zuerst wie bei Wundt die *MoNQ*-Werte jedes Monats der Zeitreihe und ordnet sie aufsteigend an (Abb. 3.4). Die Werte werden dann durch die Verlängerung des quasi-linearen Niedrigwertebereiches korrigiert. Die korrigierten Abflüsse werden wieder den entsprechnden Monaten zugeteilt. Wie Wundt rechnet Kille den Basisabfluss mit einer monatlichen Auflösung.

Eine zweite Verbesserungsmöglichkeit für Wundt schlägt das **LfW**-Verfahren (vom Bayerischen Landesamt für Wasserwirtschaft, LFW 1996) vor. Nach der Berechnung der MoNQ-Werte für jeden Monat in der Zeitreihe, werden für jeden Monat des Jahres die langjährigen Monatsmittel berechnet. Es wird dann nach dem "niedrigsten Mittelwert der Monatsmittel von sechs zusammenhängenden Monaten (6-MoMNQ)" gesucht. Das Ergebnis ist eine Zahl, die als mittlere Grundwasserneubildung  $\overline{GWN}$  interpretiert wird. Bei der Analyse einer längeren Zeitperiode kann das System als stationär angesehen werden:  $\overline{GWN}$  ist dem mittleren Basisabfluss gleich.

#### 3.2.3 Separation mittels der Rezessionsanalyse

Für einen eindimensionalen Aquifer unter gespannten Verhältnissen kann die transiente Gleichung der Grundwasserströmung zu einer linearen Lösung vereinfacht wer-



Abbildung 3.5: Abflussganglinie für einen Pegel in einer Klimaregion mit mehrmonatiger Trockenheit (SCHWARZE et al. 1991).

den (SZILAGYI und PARLANGE 1998):

$$Q(t) = Q(t_0)e^{-\alpha(t-t_0)}$$
(3.3)

Die Lösung gilt für einen uniformen isotropen und homogenen Grundwasserleiter mit bestimmten Anfangs- und Randbedingungen. Der Fluss Q(t) aus einem gespannten Aquifer ohne Grundwasserneubildung wird zu einer linearen Funktion der Zeit, wenn er auf einer logarihtmischen Skala dargestellt wird. Q(t) in Gl. 3.3 ist dem Abfluss aus einem Einzellinearspeicher (ELS) (Gl. 2.4, Seite 14) äquivalent, wenn kein Zufluss in den Speicher stattfindet. Der Speicherkoeffizient  $\alpha$  wird hier Rezessionskonstante oder Rückgangskonstante genannt.

Durch die Anwendung eines solchen Modells für die Rezessionsperioden der Abflussganglinie lässt sich der Basisabfluss bestimmen. Wegen ihrer Einfachheit und der Übereinstimmung mit gemessenen Daten (Abb. 3.5) repräsentiert Gl. 3.3 den Startpunkt für fast jede Rezessionsanalyse (RORABAUGH 1964, NATHAN und MCMAHON 1990, ZECHARIAS und BRUTSAERT 1988). Zahlreiche Untersuchungen (RORABAUGH 1964, TALLAKSEN 1995, VOGEL und KROLL 1996, VITVAR et al. 2002) haben unterschiedliche Ansätze vorgeschlagen, um die Rezessionskonstante  $\alpha$  aus den Aquiferparametern abzuleiten. Da Gl. 3.3 nur für idealisierte Bedingungen gilt, gibt es keine akzeptierte Interpretation dafür. RORABAUGH (1964), WITTENBERG (1994), RUT-LEDGE (1998) u.a. haben gezeigt, dass die Rezessionskurve eine starke Nichtlinearität aufweist, wenn die Bedingungen von denen abweichen, die für die Bestimmung von Gleichung 3.3 benutzt wurden.

Eine auf der Rezessionsanalyse basierte Separationsmethode beinhaltet die folgenden Schritte (TALLAKSEN 1995): die Auswahl der Rezessionsperioden, die Bestimmung der Rezessionsparameter, die Separation der Ganglinien während der Rezessionsperioden und die Extrapolation der Separation zwischen den Rezessionsperioden.

Eine Rezessionsperiode dauert von dem Scheitelpunkt bis zum nächsten Anstieg des Abflusses. Der erste Teil dieser Periode, der dem Scheitelpunkt folgt, wird normalerweise von der Analyse ausgeschlossen, weil in dieser Zeit der Einfluss des Oberflächenabflusses noch dominant ist. Mehrere Ansätze sind für die genaue Definition der Länge dieses Teiles vorhanden. Ein Ansatz wurde schon bei der Beschreibung der HYSEP-Verfahren vorgestellt. Für komplexe Gebiete in nicht-ariden Regionen ist es schwierig, genügend lange Perioden mit kontinuierlich sinkenden Abflüssen zu finden. Um das Problem zu lösen, wird manchmal (VOGEL und KROLL 1992, SCHWARZE 2001) ein n-tägiges gleitendes Mittel angewandt und dann die Rezessionsperioden auf der geglätteten Kurve definiert. Für die notwendige Länge der Rezessionsperioden zitiert TALLAKSEN (1995) mehrere Arbeiten, in denen eine Mindestlänge zwischen vier und zehn Tage ausgewählt wurde.

Nach der Identifizierung der Rezessionsperioden müssen die Parameter der Rückgangslinien bestimmt werden. Unterschiedliche Rezessionen liefern aber für die gleiche Ganglinie unterschiedliche Ergebnisse (e.g. VOGEL und KROLL 1992). WITTEN-BERG (1994) wählt subjektiv die repräsentativste Rezession aus. SCHWARZE et al. (1991) empfehlen nur die Nutzung der Rezessionen, die zu Parameterwerten in einem vordefinierten Intervall führen. Manchmal werden die einzelnen Perioden zusammengesetzt und eine Master Recession Curve (MRC) gebildet (MRC ist in der deutschen Literatur auch als die Trockenwetterfalllinie bekannt, HÖLTING 1996). Daran wird dann eine analytische Form angepasst und damit die gesuchten Regressionsparameter bestimmt. TALLAKSEN (1995) und VOGEL und KROLL (1996) beschreiben noch andere Ansätze, wie z.B. Autoregression-Modelle.

Nach der Bestimmung der Rezessionsparameter kann die Ganglinienseparation durchgeführt werden. Auf die ausgewählten Rezessionsperioden werden die analytischen Rezessionen mit den berechneten Parametern für die Bildung der Separationslinien angewandt, wobei die Berechnung rückwärts, angefangen mit dem letzten Punkt, durchgeführt wird. Für die Extrapolation der Ergebnisse auf die Perioden zwischen den einzelnen Rezessionen gibt es keine einheitliche Regel. Wie FUREY und GUPTA (2001) bemerkten ist keine Methode während der Anstiegsphase physikalisch begründet. Verschiedene Algorithmen (SCHWARZE et al. 1991, WITTENBERG und SI-VAPALAN 1999) werden dafür verwendet, die alle einen gewissen Grad an Willkürlichkeit haben.

Die folgenden Absätze beschreiben die drei wichtigsten Separationsverfahren, die auf der Analyse der Rezession beruhen.

Basierend auf den theoretischen Ergebnissen von RORABAUGH (1964) haben RUT-LEDGE und DANIEL (1994) und RUTLEDGE (1998) das lineare Modell direkt angewandt und eine halbautomatische Methode, hier als **Rora**-Methode bezeichnet, zur Bestimmung der Gleichung der MRC, der Grundwasserneubildung, und des Basisabflusses entwickelt. Um den Basisabfluss zwischen den Rezessionen zu berechnen, wird er einfach linear interpoliert und anschließend die Werte, die über den Abflusswerten liegen, korrigiert. Aus der Zusammenstellung der Koeffizienten aller Rezessionsperioden wird dann über eine Regressionsanalyse eine nicht-lineare Beziehung zwischen dem Rezessionskoeffizienten und dem Logarithmus des gemessenen Abflusses bestimmt.

WITTENBERG (1994) macht die Bemerkung, dass viele gemessene Rezessionskurven kein lineares Verhalten nachweisen und schlägt eine Generalisierung des Einzel-



Abbildung 3.6: Ganglinienseparation nach Wittenberg (WITTENBERG, 1998)

linearspeichers zu einer nichtlinearen Form vor:

$$S(i) = a \cdot Q(i)^b \tag{3.4}$$

mit den Speicherparametern a und b, die anhand der beobachteten Rezessionskurve zu kalibrieren sind. Für die Kalibrierung wendet WITTENBERG (1994) eine Trial-and-Error-Methode an, um die Abweichung der analytischen Kurve von den gemessenen Werten zu minimieren.

Für die analytische Form der Rezessionskurve folgt aus Gl. 3.4 die rückwärts gerichtete Form (WITTENBERG 1999 b):

$$Q(i-1) = \left(Q(i)^{b-1} + \frac{dt \cdot (b-1)}{a \cdot b}\right)^{\frac{1}{b-1}}$$
(3.5)

Ein empirisches Verfahren (Abb. 3.6) extrapoliert die Separationslinie zwischen den Rezessionen.

Um das nichtlineare Verfahren physikalisch zu begründen, beweist WITTENBERG (1997), dass Gl. 3.4 die analytische Lösung für den Abfluss aus einem homogenen isotropen ungespannten Aquifer mit einer bestimmten Geometrie ist, wobei a eine Funktion der Aquiferparameter ist und b gleich 0.5. Obwohl die Lösung nicht direkt anwendbar ist, wird sie zusammen mit experimentellen Ergebnissen (WITTENBERG 1998, WITTENBERG 1999a) dafür benutzt, um einen b-Wert von 0.5 zu empfehlen. Die Bestimmung von a über die Anpassung an die Rezessionskurven wird erweitert (WITTENBERG und SIVAPALAN 1999, AKSOY und WITTENBERG 2001), indem saisonale Schwankungen bestimmt werden, um die durch die Evapotranspiration verstärkten Sommerrezessionen zu berücksichtigen. In der vorliegenden Arbeit wurden bei der Implementierung der **Wittenberg**-Methode die a-Werte durch die Anpassung an die untere Umhüllende der MRC kalibriert. Für b wurde der Wert 0.5 benutzt.

**DIFGA** (Differenzenganglinienanalyse) ist "eine algorithmierte und rechnergestützte Separationsmethode" (SCHWARZE et al. 1991), entwickelt an der Technischen Universität Dresden. Die Methode wendet auch das lineare Speicherkonzept an. Der Unterschied zu anderen Methoden liegt aber darin, dass die Methode die Abflussganglinie nicht nur in zwei, sondern in drei oder vier Komponenten einteilt. DIFGA unterscheidet explizit zwischen dem langsamen Basisabfluss und dem schnelleren Zwischenabfluss (oder kurzfristigen Basisabfluss). Wenn Daten in stündlicher Auflösung vorliegen, werden auch zwei Direktabfluss-Komponenten identifiziert.

Um die Separation durchzuführen, werden zuerst anhand von berechneten gleitenden Mitteln die Rezessionsperioden sehr trockener Jahre identifiziert. Dann wird mit Hilfe von Trendanalysen und unter Verwendung von Gl. 3.3 die Speicherkonstante der langsamsten Komponente berechnet. Die Rückgangsgeraden werden noch so angepasst, dass sie die Ganglinie in keinem Punkt überschreiten. Anschließend werden sie über die Ganglinienanstiegsphasen miteinander linear verbunden. Das Verfahren wird für den Rest der Abflusskurve wiederholt, um den Zwischenabfluss zu bestimmen. Es ist ein halb-automatisiertes Verfahren, weil relativ zeitaufwendige manuelle Korrekturen der berechneten Kurven notwendig sind: Die Bearbeitung einer Ganglinie nimmt mehrere Stunden im Anspruch. Der Nutzer des Programms hat die Möglichkeit, die Berechnung der Speicherkonstante der langsamen Komponente durch Auswahl oder Elimination der Rezessionsperioden und durch Angabe eines Wertebereiches zu steuern.

DIFGA kombiniert das Separationsverfahren mit einer Wasserhaushaltsbilanzierung, wobei Niederschlagsdaten mit der über die Änderungen in den Speichern berechneten Grundwasserneubildung verglichen werden. Das Zeitintervall für die Bilanzierung ist ein Monat.

Bei DIFGA handelt sich um einen konzeptionellen Ansatz "ohne direkten Bezug zu den physikalischen Strukturen und Prozessen" (JELINEK et al. 1999). Es wird jedoch versucht, mit Hilfe der analytischen Lösung der instationären Grabenströmung für den Grundwasserhaushalt eines einzelnen Hanges das Modell von mehreren parallelen Linearspeichern physikalisch zu interpretieren (HENNING und SCHWARZE 2001). Eine andere Herangehensweise erfolgt über die analytische Lösung der Boussinesq-Gleichung (SCHUOL, 2003). Beide Ansätze liefern analytische Lösungen, die "in Form eines linearen Faltungsintegrals darstellbar sind, dessen Impulsantwortfunktion durch eine Parallelschaltung von Impulsantworten des Einzellinearspeichers gebildet wird" (SCHWARZE et al. 1999). Als Ergebnis dieser Analyse wird die Rückgangskonstante des langsameren Basisabflusses abhängig von mehreren aggregierten hydrogeologischen Parametern ausgedrückt:

$$\alpha = \frac{4}{\pi^2} \cdot \frac{S}{k_f} \cdot \frac{L^2}{m},\tag{3.6}$$

mit der Rückgangskonstante  $\alpha$  [T], der Mächtigkeit des Aquifers L [L], der speichernutzbaren Porosität S [-], der Aquiferdurchlässigkeit  $k_f$  [T/L] und der Fließlänge L [L]. SCHWARZE et al. (1999) haben diese Formulierung für mehrere Gebiete untersucht und sind zu zufriedenstellenden Ergebnissen gekommen.

Für praktische Anwendungen wird das Lithofazieskonzept, das "eine primär nach hydrogeologische Gesichtpunkten vorgenommene Klassifikation des Untersuchungsraums" (GABRIEL und ZIEGLER 1989) ist, angewandt. Basierend darauf und auf Untersuchungen in mehr als 100 Einzugsgebieten, hauptsächlich im Festgesteinbereich, wurde die Rückgangskonstante  $\alpha$  als Funktion der hydrogeologischen Einheit abgeleitet. Für jede hydrogeologische Einheit wurde kein scharfer Wert, sondern eine Wertespannweite bestimmt. SCHWARZE et al. (1999) empfehlen die Anwendung des DIFGA-Ansatzes für Festgesteins-Einzugsgebiete. Wegen der Heterogenität des Gebietsuntergrundes existieren dort hydrologisch unterschiedlich reagierende Teilsysteme und deshalb ist die Hypothese von mehreren parallelen Komponenten vernünftig. Für Lockergesteins-Einzugsgebiete, in denen die Umsatzräume aller langsamen Abflussanteile eines Gebiets hydraulisch kommunizieren, ist die Betrachtung eines einzelnen nichtlinearen Speichers geeigneter.

#### 3.2.4 Digitale-Filter-Methoden

HOLLICK und LYNE (1979) haben die Teilung Direkt-/Basisabfluss als eine Teilung Schnell-/Langsamabfluss systematisch betrachtet und Methoden aus dem Bereich der Signalverarbeitung auf Abflussganglinien angewandt. Ihre **Digital-Filter**-Methode beruht auf der rekursiven Beziehung:

$$Q_B(i) = \beta \cdot Q_B(i-1) + \frac{1-\beta}{2} \cdot (Q(i) + Q(i-1))$$
(3.7)

mit einem dimensionslosen Filterparameter  $\beta$ . Die Bedingung  $Q_B(i) \leq Q(i)$  muss nach jedem Zeitschritt geprüft und, falls nötig, korrigiert werden. Zusätzlich wird nach jedem vorwärts gerichteten Filterpass ein rückwärts gerichteter Pass empfohlen, um eine Phasenverschiebung zu vermeiden. HOLLICK und LYNE (1979) argumentieren, dass ein solches objektives und automatisches Verfahren viel von der Subjektivität und Willkürlichkeit anderer Methoden vermeidet. Im Gegenteil zu graphischen Methoden ist es sehr leicht zu automatisieren. Durch Änderung des  $\beta$ -Wertes kann die gewünschte Separation angepasst werden, wobei die Größe von  $\beta$  den Attenuationsgrad und die Anzahl der Pässe die Glättung entscheiden. HOLLICK und LYNE (1979) empfehlen  $\beta$ -Werte zwischen 0.75 und 0.80.

NATHAN und MCMAHON (1990) haben die Digital-Filter-Methode auf 186 Pegel für  $\beta$ -Werte von 0.90, 0.925 und 0.95 und drei Filterpässe (vorwärts, rückwärts, vorwärts) angewandt. Sie charakterisieren es nach visueller Prüfung als stabiler und zuverlässiger als andere Verfahren. Der  $\beta$ -Wert von 0.925 lieferte die besten Schätzungen für den BFI-Index.

Nach CHAPMAN (1991) folgt, dass der Basisabfluss aus Gl. 3.7 konstant bleibt, wenn es keinen Direktabfluss gibt. Dies wiederspricht der konventionellen Rezessionstheorie und deswegen schlägt er einen anderen Filter vor:

$$Q_B(i) = \beta \cdot Q_B(i-1) + \frac{1-\beta}{2} \cdot (Q_D(i) + Q_D(i-1))$$
(3.8)

Jetzt hat der Filterparameter  $\beta$  die Bedeutung einer Rezessionskonstante, wenn kein Direktabfluss stattfindet. Angewandt auf Messdaten liefert Gl. 3.8 Ergebnisse, die CHAPMAN (1991) als glaubwürdiger bewertet. Er argumentiert auch, dass mit Gl. 3.8 der  $\beta$ -Wert für jeden Pegel via Rezessionsanalyse berechnet werden kann. NATHAN und MCMAHON antworten im gleichen Artikel, dass die besseren Ergebnisse von Gl. 3.8 auch mit Gl. 3.7 durch Änderung von  $\beta$  hätten berechnet werden können. Die Tatsache, dass der Basisabfluss konstant für Direktabflusswerte gleich Null bleibt, wird praktisch durch die Zwangsbedingung  $Q_B \leq Q$  korrigiert.

CHAPMAN und MAXWELL (1996), CHAPMAN (1999) beschreiben weitere mögliche Filterformen mit einem, zwei oder drei Filterparametern. Sie empfehlen die Auswahl der Parameter durch Kalibrierung für jeden Pegel, basierend auf dem Endpunkt des Direktabflusses für große Ereignisse. Die ursprüngliche Form (Gl. 3.7) wird aber häufiger angewandt (ARNOLD et al. 1993, ARNOLD et al. 1995, MAU und WIN-TER 1997, ARNOLD und ALLEN 1999, SMAKHTIN 2001), besonders nach ihrer Implementierung im Wasserhaushaltsmodell SWAT (ARNOLD et al. 2000). Der Vergleich mehrerer Filterformen von CHAPMAN (1999) bleibt unschlüssig, da Korrelationen zwischen den Ergebnissen von der Art, wie man die Filterparameter auswählt, beeinflusst werden können.

SPONGBERG (2000) benutzt die Fourier-Frequenz-Analyse, um die allgemeine Filter-Theorie zu prüfen. Er beweist, dass der berechnete Basisabfluss als ein rein niederfrequentes Signal betrachtet werden kann. Der dem Nadelimpuls ähnliche Direktabfluss ist aber eine Mischung aus Signalen eines ganzen Frequenzbereichs, d.h., es gibt eine signifikante Überlappung zwischen Direkt- und Basisabfluss im Bereich der niedrigen Frequenzen. Deshalb ist mit Digital-Filtern eine perfekte Separation der beiden Bereiche nicht möglich: Der Versuch, die Amplitude der niedrigeren Frequenzen des Direktabflusses zu dämpfen, hat die gleiche Wirkung auf den Basisabfluss. Trotzdem empfiehlt er eher wenige Filterpässe mit hoher Attenuation (d.h. mit großen Filterparametern) als viele kleine Attenuationspässe.

#### 3.2.5 Analytische Methoden

Es existieren zahlreiche Verfahren, die die Analyse der Rückgänge einer Ganglinie theoretisch begründen. Es gibt aber nur zwei Methoden, die die Ganglinienseparation für die gesamte Ganglinie analytisch durchführen.

Der erste Ansatz wurde von BIRTLES (1978) eingeführt. Er startet von der allgemeinen zwei-dimensionalen Grundwasserströmungsgleichung und löst unter Anwendung des Gauß-Theorems die Gleichung nach dem Grundwasseraustausch durch die Randbedingungen des Systems. Mehrere Netzpunkte oder Regionen können definiert werden, jede Region entspricht einer Abflusskomponente. Drei Komponenten werden mit der üblichen Interpretation unterschieden: Direktabfluss, Zwischenabfluss und Basisabfluss. Vereinfachende Annahmen werden für die Beziehungen zwischen Niederschlag, Verdunstung und Abfluss gemacht und die Parameter des Algorithmus werden dann mit gemessenen Abflussdaten kalibriert. Angewandt auf ein Einzugsgebiet konnte der Ansatz die Haupttrends für den Basisabfluss, verglichen mit Ergebnissen aus der Niedrigwasserstatistik, zufriedenstellend reproduzieren. Wegen der relativen Komplexität der Theorie und wegen des nötigen iterativen Kalibrationsverfahrens wurde die Birtles-Methode nicht weiter entwickelt oder verwendet.

FUREY und GUPTA (2001) betonen in einer Analyse der bisherigen Filter-Methoden die Willkürlichkeit in der Auswahl der Filterparameter und den Mangel an physikalischer Fundiertheit. Deshalb machen sie den Versuch eine physikalisch-basierte analytische Filter-Methode zu entwickeln. Aus der Kontinuitätsgleichung und physikalischen Zustandsfunktionen leiten sie den folgenden Ausdruck für den Basisabfluss aus einem Hang ab:

$$Q_B(i) = (1 - \chi dt)Q_B(i-1) + \chi dt GWN(i-1)$$
(3.9)

mit einer Funktion  $\chi$  der physikalischen Eigenschaften des Hanges.

Zusätzlich gelten die Bedingungen:

$$Q_D(i) = c_1 N(i); \ GWN(i+d_N) = c_3 N(i); \ Q(i) = Q_B(i) + Q_D(i)$$
(3.10)

 $c_1$  ist der Oberflächenabfluss-Anteil vom Niederschlag,  $c_3$  der Grundwasserneubildungsanteil vom Niederschlag N und  $d_N$  die Zeitverzögerung zwischen Infiltration und effektiver Grundwasserneubildung.

Aus Gl. 3.9 und Gl. 3.10 kann man die Filter-Form **Furey-Gupta** für einen Hang ableiten:

$$Q_B(i) = (1 - \chi dt)Q_B(i-1) + \chi dt \frac{c_3}{c_1} (N(i-d_N-1) - Q(i-d_N-1))$$
(3.11)

Wenn man ein Einzugsgebiet als die Summe von mehreren Hängen betrachtet und annimmt, dass die Eigenschaften aller Hänge gleich sind, kann man Gl. 3.11 auf das gesamte Einzugsgebiet anwenden. Der Parameter  $\chi$  kann auch aus Gl. 3.11 durch die Substitution  $Q_B(i) = Q(i) - Q_D(i)$  und die Bedingung, dass die Niederschlagsgrößen gleich Null sind, als Funktion der Wasserbilanzgrößen geschrieben werden:

$$\chi dt = 1 - \frac{Q(i)}{Q(i-1)}, \ N(i) = N(i-1) = N(i-d_N-1) = 0$$
 (3.12)

$$c_1 = \frac{Q_B(i) - (1 - \chi dt)Q_B(i - 1))}{N(i)}, N(i) > 0, \ N(i - 1) = N(i - d_N - 1) = 0$$
(3.13)

$$c_2 = 1 - \frac{\sum_{i=i_0}^{i=T} Q(i))}{\sum_{i=i_0}^{i=T} N(i))}$$
(3.14)

 $c_2$  ist der Evapotranspiration-Anteil des Niederschlags, T die für die Bestimmung der Parameter benutzte Länge der Zeitreihe und  $i_0$  der erste Wert in der benutzten Zeitreihe.

Vier Annahmen müssen gemacht werden, um die Filtergleichung Gl. 3.11 einsetzen zu können. Als erstes muss die Zeit, die der Oberflächenabfluss braucht, um am Flusspegel anzukommen, vernachlässigbar sein. Zweitens bleiben die Verhältnisse  $c_3/c_1$  konstant im Raum und  $GWN(i + d_N)/Q_D(i)$  konstant in der Zeit. Drittens ist die Verzögerung *d* konstant. Viertens wird es angenommen, dass die effektive Grundwasserneubildung GWN eine gedämpfte Form des Niederschlags ist. Alle vier Annahmen sind Vereinfachungen, die die Ergebnisse der Methoden gegebenenfalls verfälschen können.

FUREY und GUPTA (2001) empfehlen als praktische Regel für die Bestimmung von  $\chi \cdot dt$  die Auswahl der zweitägigen Perioden, die einem niederschlagslosen Zeitraum von mindestens zehn Tagen folgen. Dazu muss noch die Bedingung Q(i) < Q(i-1) erfüllt werden. Die Bestimmung von d kann nur auf Grund hydrogeologischer Vorkenntnisse gemacht werden, um die Zeit, die das Wasser von der Infiltration im Boden bis zum Erreichen des Grundwasserspiegels braucht, zu rechnen, wobei die vorgestellten Ergebnisse darauf hindeuten, dass Änderungen in den  $d_N$ -Werten keinen großen

Einfluss haben. Für die Bestimmung von  $c_1$  werden die zweitägigen Perioden gesucht, die die gleichen Bedingungen wie bei der Bestimmung von  $\chi$  erfüllen, mit der Ausnahme, dass es jetzt am zweiten Tag der Periode regnen muss (siehe Gl. 3.13).

Als Kriterien für die Auswertung des entwickelten Verfahrens werden zwei Tests gemacht. Der erste Test ist die Prüfung, ob der vorgeschlagenen Filter Gl. 3.11 Basisabflüsse liefert, die nie über dem Gesamtabflüssen liegen. Der zweite Test basiert auf der Tatsache, dass im Testeinzugsgebiet der jährliche Minimalabflusswert fast ausschließlich aus Basisabfluss besteht. Der berechnete Basisabfluss wird also mit dem gemessenen Abfluss verglichen. Die Auswertung der Ergebnisse und der Vergleich mit denen, die aus zwei anderen Filter-Methoden stammen, ist als unschlüssig dargestellt (FUREY und GUPTA 2001), wobei die Autoren argumentieren, dass allein ihre Methode physikalisch basiert ist.

## 3.3 Berechnung der Abflussganglinien für Teileinzugsgebiete

Ganglinienanalyse-Verfahren sollen auf das gesamte Einzugsgebiet der Oberen Donau angewendet werden. Gemessene Daten von 209 Pegeln stehen dafür mit Längen zwischen 7 und 50 Jahren zur Verfügung. Die Herausforderung ist, dass der Anwendungsbereich der Verfahren auf Gebiete begrenzt ist, deren Größe nicht mehr als ca. 1000 km<sup>2</sup> beträgt. Das würde die Analyse auf die kleineren Kopfeinzugsgebiete einschränken. Um die Analyse auf das gesamte Gebiet zu erweitern, wird die folgende Lösung vorgeschlagen:

- 1. Die Teilung des Gesamteinzugsgebietes in Teileinzugsgebiete, die aus dem digitalen Geländemodell (DGM) und der Lage der Pegelstationen abgeleitet werden;
- 2. Die Entwicklung, Parametrisierung und Anwendung eines Flussroutingmodells, das die gemessenen Ganglinien jedes Pegels bis zum nächsten flussabwärts liegenden Pegel routet;
- 3. Die Anwendung des Flussroutingmodells, um für jedes Teileinzugsgebiet ein eigenes hydrologisches Signal, d.h. eine eigene Ganglinie, zu berechnen.
- 4. Die Anwendung der Ganglinienseparationsverfahren auf die berechneten Ganglinien der Teileinzugsgebiete. Die Ergebnisse dieser Anwendung werden in Kapitel 3.4 vorgestellt.

Für die Teilung des Gesamtgebietes in Teileinzugsgebiete wurden Techniken aus dem Bereich geographischer Informationssysteme (GIS) benutzt. Für das DGM mit einer Auflösung von 1000 m  $\times$  1000 m wurde der sogenannte Akkumulationsdatensatz berechnet. Die Akkumulation in einer Zelle ist die kumulierte Anzahl der stromaufwärts liegenden Zellen, die in diese Zelle entwässern. Dadurch wird jeder Zelle die Identifikationsnummer der flussabwärts am nächsten liegenden Pegelzelle zugeteilt. Eine Pegelzelle ist einfach eine Rasterzelle, in der sich ein Pegel befindet. Für die Berechnung wurde ein von SCHMIDT (2001) entwickelter Algorithmus verwendet. Damit wird dann das Gebiet in eine bestimmte Anzahl von Teileinzugsgebieten eingeteilt. Jedes Teileinzugsgebiet hat einen und nur einen Ausgangspegel



Abbildung 3.7: Generierung der Struktur der Teileinzugsgebiete basierend auf dem DGM und der Lage der Pegel.

(flussabwärts), und keinen, einen oder mehrere Eingangspegel (flussaufwärts). Abb. 3.7 stellt das Ergebnis des Verfahrens dar: 209 Teileinzugsgebiete mit einer mittleren Fläche von 367 km<sup>2</sup>.

Ein numerisches Programm wurde dann für das Flussrouten (Punkte 2 und 3) entwickelt und implementiert. Die nötigen Eingangsdaten sind die Ganglinien an jedem Pegel, die Struktur der Teileinzugsgebiete und deren Eingangs- und Ausgangspegel. Das Ergebnis ist eine Ganglinie für jedes Teileinzugsgebiet, die durch das Subtrahieren der gerouteten Eingangsganglinien von den Ausgangsganglinien berechnet wird. Das Flussdiagramm des entwickelten Programms ist in Abb. 3.8 dargestellt und wird im Text nicht mehr im Einzelnen beschrieben, mit der Ausnahme bestimmter nicht selbsterklärender Aspekte.

Das Flussroutingmodell beruht auf dem Konzept der linearen Speicherkaskade. Für Anwendungen mit dem Ziel, die Ganglinie von einem Pegel zum nächsten Pegel zu routen, ist ein solches konzeptionelles Modell die logische zeit-, daten- und arbeitssparende Alternative gegenüber hydraulischen auf den Saint-Venant-Gleichungen basierenden Modellen (PLATE et al. 1977). Das Modell macht die Vereinfachung, dass das Routing zwischen einem Eingangspegel und dem Ausgangspegel davon unabhängig ist, ob es einen oder mehrere Eingangspegel gibt.

Die Parametrisierung des Modells erfolgt Ereignis-basiert. Dafür mussten auf beiden Ganglinien (Eingang - flussaufwärts und Ausgang - flussabwärts) signifikante aneinander passende Ereignisse mittels mehrerer Trendanalyse-Routinen gefunden werden. Diese Ereignisse wurden auf geglätteten Ganglinien<sup>2</sup> definiert, um die Wirkung kleiner täglicher Oszillationen zu eliminieren. Die Erfahrung mit dem entwickelten Modell hat gezeigt, dass die Kalibrierung für komplexe mehrspitzige Ereignisse manchmal unrealistische Werte liefert. Deshalb werden die Modellparameter über

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Das siebentägige gleitende Mittel wurde benutzt.



Abbildung 3.8: Flussdiagramm des entwickelten Verfahrens zur Berechnung des hydrologischen Signals aller Teileinzugsgebiete.

alle Ereignispaare nur nach Entfernung der Ausreißer gemittelt.

Das Verfahren wurde erfolgreich angewandt. Es war für jedes Einzugsgebiet möglich, aneinander passende Ereignisse zu finden und darauf basierend das Modell für jede Eingangspegel-Ausgangspegel-Strecke zu parametrisieren. Für jede der 205 Strecken wurden im Durchschnitt ca. 18 Paare von Ereignissen identifiziert, was die Repräsentativität der gemittelten Werte gewährleistet.

Der Erfolg oder das Misslingen des Routingverfahrens muss auch relativ zur geplanten Anwendung der Ergebnisse bewertet werden. Bei der Anwendung von Ganglinienseparations-Verfahren sind die Rückgänge und deren Gefälle besonders wichtig. Die mit dem Routingmodell berechneten Ganglinien sind das Ergebnis einer Subtraktion zwischen zwei oder mehreren Ganglinien. Bei der Subtraktion von zwei großen Zahlen können kleine Fehler das Ergebnis stark beeinflussen. Die Gefahr besteht also, dass die berechneten Rückgänge mit Fehlern behaftet sein könnten. Um diese Frage zu klären, wurden beispielhaft mehrere Pegel ausgewählt und für sie und die dazwischen liegenden Teileinzugsgebiete die Master Recession Curves (MRC) analysiert. In der Analyse wurde das nichtlineare Wittenberg-Modell an die MRC angepasst und die *a*-Werte (siehe Gl. 3.4) miteinander verglichen. Die *a*-Werte für die gerechneten Ganglinien sind im Vergleich zu den Werten der gemessenen Ganglinien als nicht besonders steil oder flach aufgefallen, was die erwähnte Befürchtung (mindestens teilweise) aus dem Weg räumt.

# 3.4 Anwendung signifikanter Ganglinienseparationsverfahren auf Ganglinien im Einzugsgebiet der Oberen Donau

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Anwendung der ausgewählten Separationsverfahren auf die Ganglinien des Einzugsgebietes der Oberen Donau vorgestellt. Der Schwerpunkt wird auf die Unterschiede und auf die Vergleichbarkeit der Ergebnisse verschiedener Verfahren gesetzt.

Für die Analyse wurden im Rahmen dieser Arbeit folgende elf Separationsverfahren in einer einheitlichen numerischen Software implementiert: Fixed-Interval, Sliding-Interval, Local-Minimum, Smoothed Minima, Wundt, Kille, LfW, Rora, Wittenberg, Digital-Filter (die Hollik-Lyne Version) und Furey-Gupta. Das zwölfte angewandte Verfahren, DIFGA, wurde in seiner kommerziellen Version eingesetzt, da eine neue Implementierung wegen der Komplexität und des halb-automatischen Charakters extrem arbeitsaufwendig gewesen wäre. Eine Funktion wurde aber vorbereitet, so dass die DIFGA-Ergebnisse in der entwickelten Software eingelesen und weiter bearbeitet werden. Die Software erlaubt dem Nutzer alle oder nur einige Verfahren auf beliebig viele Datensätze anzuwenden. Spezielle Funktionen bezüglich der Speicherverwaltung wurden programmiert, um die Arbeit mit großen Datenmengen problemlos und ohne Zeitaufwand zu ermöglichen. Die Auswertung der Ergebnisse wurde ebenfalls in die Software integriert, wobei der Nutzer die Freiheit hat, die gewünschte Form der Ausgaben zu definieren.

Die mit dem Routingmodell berechneten Ganglinien der 209 Teileinzugsgebiete wurden analysiert. Die Anwendung von DIFGA auf alle Ganglinien hätte zu viel Zeit im Anspruch genommen, deshalb wurde sie auf die sieben Ganglinien des Ammergebietes beschränkt. Ebenfalls wurde Furey-Gupta nur auf das Einzugsgebiet der



Abbildung 3.9: Separationslinien für ein ausgewähltes Ereignis für das Teileinzugsgebiet Mühlried an der Paar.

Ammer angewandt, weil es nicht nur Abflussganglinien sondern auch Niederschlagszeitreihen für die gleiche Periode benötigt. Für die Digital-Filter-Methode wurden die Ergebnisse nach einem, zwei und drei Filterpässen analysiert. Damit bestehen die Gesamtergebnisse für jede Ganglinie aus fünfzehn Separationslinien (DIFGA rechnet zwei und die Digital-Filter drei Separationslinien) für das Einzugsgebiet der Ammer und aus zwölf Separationslinien für das restliche Einzugsgebiet.

Abb. 3.9 zeigt beispielhaft die zwölf Separationslinien für ein Ereignis am Pegel Mühlried an der Paar. Die großen Abweichungen zwischen den Separationslinien machen deutlich, dass der Vergleich zwischen den Ergebnissen einzelner Methoden nur auf statistischen Indikatoren oder auf zeitlich aggregierten Werten erfolgen kann. Dass Separationsergebnisse nicht auf der Tagesskala sondern auf monatlicher oder jährlicher Skala interpretiert werden sollten, ist mehrfach in der Literatur erwähnt (z.B. RUTLEDGE 1998, SCHWARZE 2001). Als Hauptindikator für den berechneten Basisabfluss jeder Methode wurde der **Basisabflussindex (BFI)** (Gl. 3.1) analysiert, indem die Separationslinien über die gesamte Zeitreihe integriert wurden. Um die Unterschiede zwischen den dynamischen Verläufen der Separationslinien zu quantifizieren, wurde die Pearsonsche-Korrelationsmatrix K berechnet.

Die erste interessante Frage ist, wie lang die verwendete Messzeitreihe sein muss, um einen stabilen BFI zu berechnen. Abbildung 3.10 zeigt die Streuung der gerechneten BFI-Werte für neun unterschiedliche zeitliche Ebenen für den Pegel Weilheim an der Ammer. Die Werte wurden mit dem Wittenberg-Verfahren berechnet, sie sind aber für alle Methoden repräsentativ. Eine klare Konvergenz ist entlang der Zeitskala zu beobachten. Monatliche BFI-Werte sind in einem breiten Intervall gestreut, das Intervall ist aber deutlich kleiner, sobald man die Werte über ein Jahr mittelt. Die saisonale Wirkung auf die Abflusskurve scheint damit deutlich mehr Einfluss auf die BFI-Verteilung zu haben als die Unterschiede zwischen verschiedenen Jahren. Die Standardabweichungen der monatlichen Werte bewegen sich im Intervall von 0.10 bis 0.15, ab dem jährlichen Wert ist das Intervall von 0.03 bis 0.05. Wenn man berücksichtigt, dass der BFI-Wert nicht als genaue Zahl, sondern eher als Schätzwert zu verstehen ist, reichen schon Messzeitreihen mit einer Länge von wenigen Jahren, um einen relativ stabilen BFI-Wert zu berechnen. Man beachte aber, dass eventuelle langfristige Änderungen oder Entwicklungen in der Struktur der Abflusskurve dabei überhaupt nicht erfasst sind. Die Länge der hier verwendeten Ganglinien beträgt, bedingt durch die Datenverfügbarkeit, zwischen 7 und 50 Jahren und ist also ausreichend für eine Analyse.

Die folgende Präsentation der Ergebnisse erfolgt in mehreren Schritten. Im ersten Schritt beantwortet Kapitel 3.4.1 die Frage, wie unterschiedlich die Ergebnisse der Separationsverfahren sind. Kap. 3.4.2 ist eine detaillierte Untersuchung der Beziehungen zwischen den Ergebnissen verschiedener Verfahren. Kap. 3.4.3 analysiert die Abhängigkeit der Ergebnisse von der räumlichen Skala, und damit die Frage der Vergleichbarkeit der an unterschiedlichen Pegel berechneten Ergebnisse. Kap 3.4.4 fasst die Erkenntnisse zusammen und interpretiert sie.

### 3.4.1 Systematische Auswertung der Unterschiede zwischen den Ergebnissen verschiedener Separationsverfahren

Die Analyse erfolgte gleichzeitig für die beiden Datensätze von Separationslinien: zwölf Linien für jede der 209 Ganglinien des Gesamtgebietes der Oberen Donau und fünfzehn Linien (zwei von DIFGA und eine von Furey-Gupta) für die sieben Ganglinien des Ammergebietes.

Die Konsequenz aus Abb. 3.9 war, dass die Separationslinien auf monatlichen und jährlichen (statt täglichen) Skalen verglichen werden sollten. Abb. 3.11 stellt für den Pegel Weilheim an der Ammer die fünfzehn Separationslinien dar, die zeitlich auf der jährlichen Skala integriert wurden. Die Separationslinien sind nicht identisch, verlaufen aber fast perfekt parallel. Sie folgen alle dem gleichen dynamischen Verlauf: dem Verlauf der Gesamtabflusskurve.

Wenn der Quasi-Parallelismus der Separationslinien für alle ausgewerteten Ganglinien gültig wäre, würde dies zu hohen Korrelationswerten K zwischen den einzelnen Linien führen. Tab. 3.1 präsentiert die mittleren K-Werte für die 209 Ganglinien auf der täglichen, monatlichen und jährlichen Skala: Mit mittleren und minimalen Korrelationswerten von 0.82 und 0.50 (täglich), 0.92 und 0.73 (monatlich) und 0.94 und 0.76 (jährlich) kann man schon ab der monatlichen Skala von einer fast identischen Dynamik der Separationslinien sprechen. Die Standardabweichungen der Korrelationswerte innerhalb des aus 209 Ganglinien bestehenden Datensatzes sind 0.11 (täglich), 0.07 (monatlich) und 0.08 (jährlich) und damit klein genug, um die Aussagen, die auf Grund der Mittelwerte gemacht werden, als grundlegende Eigenschaften der Separationsverfahren zu bestätigen.

Die analysierten Methoden setzen auf der Tagesskala und für einzelne Ereignisse sehr unterschiedliche Algorithmen ein, um den Basisabfluss zu berechnen. Ihre grundsätzliche Funktionsweise ist aber identisch: Für jedes Ereignis wird der obere Teil der Abflusskurve abgeschnitten und der Rest als Basisabfluss interpretiert. Die logische Folge dieses Vorgehens ist der hier bewiesene Quasi-Parallelismus. Der



Abbildung 3.10: Verhalten des BFI-Wertes bei zeitlicher Skalierung für den Pegel Weilheim an der Ammer



Abbildung 3.11: Ganglinienseparationslinien für den Pegel Weilheim - jährliche Mittelwerte



Abbildung 3.12: Ganglinienseparationslinien für den Pegel Weilheim an der Ammer - mehrjährigen Monatsmittelwerte

täglich	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(11)	(12)	(13)
FixedInterval (1)	1.00	0.92	0.89	0.84	0.80	0.70	0.74	0.88	0.67	0.87	0.90	0.82
Sliding Interval (2)	0.92	1.00	0.90	0.86	0.81	0.70	0.75	0.90	0.67	0.89	0.92	0.83
Local Minimum (3)	0.89	0.90	1.00	0.82	0.86	0.75	0.68	0.89	0.72	0.88	0.92	0.87
Wittenberg (4)	0.84	0.86	0.82	1.00	0.73	0.64	0.82	0.82	0.61	0.82	0.85	0.74
Smoothed Minima (5)	0.80	0.81	0.86	0.73	1.00	0.84	0.59	0.83	0.81	0.83	0.91	0.92
Wundt (6)	0.70	0.70	0.75	0.64	0.84	1.00	0.52	0.73	0.95	0.73	0.83	0.88
LfW (7)	0.74	0.75	0.68	0.82	0.59	0.52	1.00	0.71	0.50	0.76	0.74	0.61
Rora (8)	0.88	0.90	0.89	0.82	0.83	0.73	0.71	1.00	0.70	0.89	0.90	0.85
Kille (9)	0.67	0.67	0.72	0.61	0.81	0.95	0.50	0.70	1.00	0.71	0.79	0.85
Dig.Filt. Pass 1 (11)	0.87	0.89	0.88	0.82	0.83	0.73	0.76	0.89	0.71	1.00	0.91	0.89
Dig.Filt. Pass 2 (12)	0.90	0.92	0.92	0.85	0.91	0.83	0.74	0.90	0.79	0.91	1.00	0.93
Dig.Filt. Pass 3 (13)	0.82	0.83	0.87	0.74	0.92	0.88	0.61	0.85	0.85	0.89	0.93	1.00
monatlich	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(11)	(12)	(13)
FixedInterval (1)	1.00	0.99	0.96	0.96	0.92	0.86	0.92	0.95	0.83	0.97	0.97	0.93
Sliding Interval (2)	0.99	1.00	0.97	0.97	0.92	0.87	0.93	0.96	0.84	0.98	0.98	0.94
Local Minimum (3)	0.96	0.97	1.00	0.95	0.92	0.87	0.89	0.94	0.83	0.96	0.96	0.93
Wittenberg (4)	0.96	0.97	0.95	1.00	0.89	0.84	0.95	0.94	0.81	0.97	0.96	0.91
Smoothed Minima (5)	0.92	0.92	0.92	0.89	1.00	0.91	0.82	0.91	0.87	0.92	0.96	0.95
Wundt (6)	0.86	0.87	0.87	0.84	0.91	1.00	0.76	0.86	0.95	0.87	0.92	0.95
LfW (7)	0.92	0.93	0.89	0.95	0.82	0.76	1.00	0.89	0.73	0.94	0.90	0.84
Rora (8)	0.95	0.96	0.94	0.94	0.91	0.86	0.89	1.00	0.83	0.95	0.95	0.92
Kille (9)	0.83	0.84	0.83	0.81	0.87	0.95	0.73	0.83	1.00	0.84	0.89	0.92
Dig.Filt. Pass 1 (11)	0.97	0.98	0.96	0.97	0.92	0.87	0.94	0.95	0.84	1.00	0.97	0.95
Dig.Filt. Pass 2 (12)	0.97	0.98	0.96	0.96	0.96	0.92	0.90	0.95	0.89	0.97	1.00	0.97
Dig.Filt. Pass 3 (13)	0.93	0.94	0.93	0.91	0.95	0.95	0.84	0.92	0.92	0.95	0.97	1.00
···· · ·	-											
jahrlich	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(11)	(12)	(13)
FixedInterval (1)	1.00	0.99	0.97	0.98	0.94	0.89	0.95	0.96	0.83	0.99	0.98	0.95
Sliding Interval (2)	0.99	1.00	0.98	0.98	0.94	0.90	0.95	0.97	0.84	0.99	0.98	0.96
Local Minimum (3)	0.97	0.98	1.00	0.96	0.94	0.89	0.92	0.95	0.83	0.97	0.97	0.95
Wittenberg (4)	0.98	0.98	0.96	1.00	0.92	0.88	0.96	0.95	0.82	0.99	0.97	0.94
Smoothed Minima (5)	0.94	0.94	0.94	0.92	1.00	0.93	0.87	0.93	0.87	0.95	0.97	0.96
Wundt (6)	0.89	0.90	0.89	0.88	0.93	1.00	0.82	0.89	0.93	0.90	0.94	0.96
LtW (7)	0.95	0.95	0.92	0.96	0.87	0.82	1.00	0.92	0.76	0.96	0.92	0.89
Rora <b>(8)</b>	0.96	0.97	0.95	0.95	0.93	0.89	0.92	1.00	0.83	0.96	0.96	0.94
Kille (9)	0.83	0.84	0.83	0.82	0.87	0.93	0.76	0.83	1.00	0.85	0.89	0.92
Dig.Filt. Pass 1 (11)	0.99	0.99	0.97	0.99	0.95	0.90	0.96	0.96	0.85	1.00	0.99	0.96
Dig.Filt. Pass 2 (12)	0.98	0.98	0.97	0.97	0.97	0.94	0.92	0.96	0.89	0.99	1.00	0.99
Dig.Filt. Pass 3 (13)	0.95	0.96	0.95	0.94	0.96	0.96	0.89	0.94	0.92	0.96	0.99	1.00

**Tabelle 3.1:** Korrelationen K zwischen den zwölf Separationslinien gemittelt über alle 209 Ganglinien des Einzugsgebietes der Oberen Donau. Für  $K \in (0.85; 1.0]$  ist der Hintergrund weiß; für  $K \in [0.7; 0.85]$  ist der Hintergrund hell grau; für  $K \in [-1.0; 0.7]$  ist der Hintergrund dunkel grau

Unterschied zwischen den Verfahren besteht allein im relativen Niveau unter der Gesamtabflusslinie, auf das die Separationslinie gestellt ist. Der Basisabflussindex BFI quantifiziert dieses Niveau und ist damit ein ausreichender Parameter, um Separationsverfahren voneinander zu unterscheiden.

Ein Separationsverfahren sollte aber eine Ausnahme bilden: Die DIFGA-QG2 Komponente, die den langsamen Basisabfluss darstellt, versucht methodisch, sich vom einfachen o.g. Schema zu trennen. Obwohl ihre Bildung auch von der Gesamtabflusslinie startet, sollte das Fokussieren auf ein lineares Speichermodell, dessen Rückgangskonstante für den gesamte Zeitraum gleich bleibt, zu einer eigenen Dynamik führen. Weil DIFGA und Furey-Gupta nur auf das Ammergebiet angewandt wurden, hat die Korrelationsstatistik in Tab. 3.1 die beiden DIFGA-Komponenten nicht mitberücksichtigt. In Abb. 3.12 ist deutlich zu sehen, wie alle Separationslinien

jährlich	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)	(14)	(15)
FixedInterval (1)	1.00	1.00	0.97	1.00	0.97	0.95	0.98	0.99	0.95	0.99	1.00	1.00	0.99	0.71	0.99
Sliding Interval (2)	1.00	1.00	0.98	1.00	0.97	0.95	0.98	0.99	0.95	1.00	1.00	1.00	0.99	0.69	0.99
Local Minimum (3)	0.97	0.98	1.00	0.96	0.97	0.95	0.93	0.96	0.96	0.96	0.96	0.97	0.97	0.65	0.97
Wittenberg (4)	1.00	1.00	0.96	1.00	0.96	0.94	0.99	1.00	0.94	1.00	1.00	0.99	0.98	0.69	0.99
Smoothed Minima (5)	0.97	0.97	0.97	0.96	1.00	0.96	0.93	0.95	0.96	0.95	0.96	0.97	0.97	0.68	0.96
Wundt (6)	0.95	0.95	0.95	0.94	0.96	1.00	0.89	0.93	1.00	0.93	0.94	0.96	0.97	0.68	0.93
LfW (7)	0.98	0.98	0.93	0.99	0.93	0.89	1.00	0.99	0.90	0.99	0.99	0.98	0.96	0.67	0.98
Rora (8)	0.99	0.99	0.96	1.00	0.95	0.93	0.99	1.00	0.94	1.00	1.00	0.99	0.98	0.68	0.99
Kille (9)	0.95	0.95	0.96	0.94	0.96	1.00	0.90	0.94	1.00	0.93	0.94	0.96	0.98	0.69	0.94
Furey-Gupta (10)	0.99	1.00	0.96	1.00	0.95	0.93	0.99	1.00	0.93	1.00	1.00	0.99	0.98	0.69	0.99
Dig.Filt. Pass 1 (11)	1.00	1.00	0.96	1.00	0.96	0.94	0.99	1.00	0.94	1.00	1.00	1.00	0.99	0.70	0.99
Dig.Filt. Pass 2 (12)	1.00	1.00	0.97	0.99	0.97	0.96	0.98	0.99	0.96	0.99	1.00	1.00	1.00	0.70	0.99
Dig.Filt. Pass 3 (13)	0.99	0.99	0.97	0.98	0.97	0.97	0.96	0.98	0.98	0.98	0.99	1.00	1.00	0.73	0.97
DIFGA QG2 (14)	0.71	0.69	0.65	0.69	0.68	0.68	0.67	0.68	0.69	0.69	0.70	0.70	0.73	1.00	0.62
DIFGA QG1+QG2 (15)	0.99	0.99	0.97	0.99	0.96	0.93	0.98	0.99	0.94	0.99	0.99	0.99	0.97	0.62	1.00

**Tabelle 3.2:** Korrelationen K zwischen den fünfzehn Separationslinien gemittelt über die sieben Ganglinien der Ammergebietes. Für  $K \in (0.90; 1.0]$  ist den Hintergrund weiß; für  $K \in (0.75; 0.90]$  ist den Hintergrund hellgrau; für  $K \in [-1.0; 0.75]$  ist den Hintergrund dunkelgrau

in ihrem jährlichen Verlauf die Abflussmaxima am Anfang des Sommers abschneiden, die für die alpinen Pegel sehr typisch sind (SCHUOL 2003). Die Ausnahmen dazu sind die LfW-Linie, die immer parallel zur Gesamtabflusslinie verläuft und, wie erwartet, die DIFGA-QG2-Linie. Die jährliche Schwankung fällt dort deutlich weniger ausgeprägt aus als bei den anderen Verfahren. Tab. 3.2 stellt die Korrelationen auf der jährlichen Skala nur für die Pegel des Ammergebietes dar. Die Ausnahmeposition der DIFGA-QG2-Linie ist deutlich zu sehen: Sie ist die einzige, deren Korrelationen zu den anderen Linien systematisch niedriger ausfallen.

Bisher wurde gezeigt, dass für jede Ganglinie die verschiedenen Separationslinien quasi-parallel sind, das heißt, dass die Anordnung der Verfahren nach der Größe des berechneten Basisabflusses konstant für den gesamten Zeitverlauf bleibt. Es wäre interessant herauszufinden, ob diese Anordnung für alle Ganglinien gleich bleibt. Dafür wurde der BFI-Rang Begriff eingeführt: Er ist die Position eines Verfahrens in der Anordnung, die nach der Größe des berechneten Basisabflusses gemacht wurde. Der BFI-Rang nimmt z.B. den Wert 1 für den kleinsten Wert und den Wert 12 für den größten Wert.

Abb. 3.13 zeigt die Statistik der Anordnung für die 209 Ganglinien. Der BFI-Rang kann für die meisten der zwölf Verfahren als stabil oder sehr stabil bewertet werden, mit nur kleinen Abweichungen zwischen den Ganglinien. Diejenigen, die den kleinsten BFI-Rang haben, und damit also die kleinsten BFI-Werte rechnen (LfW, Kille, Wundt), haben einen deutlich stabileren Rang als die Verfahren, die größere Werte liefern (Wittenberg, Rora, Fixed Interval, Digital-Filter Pass1). Dies liegt daran, dass es mehrere Verfahren gibt, die ungefähr einen gleich hohen BFI-Wert rechnen, und die dadurch die Plätze häufiger tauschen. Aus den Ergebnissen für das Ammergebiet (Abb. 3.12 am Beispiel des Pegels Weilheim) gehört Furey-Gupta und DIFGA-QG1+QG2 in der Kategorie der Methoden mit den höchsten und DIFGA-QG2 in der Kategorie mit den niedrigsten BFI-Werten.

Abb. 3.14 zeigt die Spannweite der berechneten BFI-Werte über die 209 Ganglinien für jedes der zwölf Verfahren. Die Länge der Spannweite bleibt zwischen den Verfahren relativ konstant, mit einer mittleren Länge von 0.3 und einer Standardab-



Abbildung 3.13: BFI-Rangstatistik für alle Separationsverfahren angewandt auf die 209 Ganglinien im Einzugsgebiet der Oberen Donau. Der BFI-Rang ist die Position des Verfahren, nachdem eine Anordnung aller Verfahren nach der Größe des berechneten BFI ausgeführt wurde (1 für den kleinsten Wert, 12 für den größten).



Abbildung 3.14: Spannweite der berechneten BFI-Werte für jedes Separationsverfahren über die 209 Ganglinien.

weichung von 0.08. Die "niedrigen" Verfahren (LfW, Kille, Wundt) haben die größten Spannweiten und die "höheren" Verfahren (Wittenberg, Rora) die kleinsten Spannweiten. Die Erklärung dafür ist, dass "niedrige" Verfahren, die versuchen nur den sehr langsamen Teil einer Ganglinie zu identifizieren, empfindlicher auf den Unterschied zwischen einer schnellen Gebirgsganglinie und einer langsamen Vorlandsganglinie reagieren.

Die Schlussfolgerung dieser Ergebnisse ist die Erkenntnis, dass verschiedene Methoden quasi-parallele Sperationslinien berechnen und dass über alle Einzugsgebiete die Annordnung der Separationslinien sehr ähnlich bleibt. Das nächste Kapitel

Separationsverfahren	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(14)	(15)	(1) FixedInterval		
Über alle Zeitreihen gemi	ber alle Zeitreihen gemittelte optimierte Digital-Filter-Parameter														
Mittel Koef n	I Koef n 1 2 1 1 2 4 5 1 6 1 11 2														
Mittel Koef b	0.79	0.70	0.85	0.58	0.90	0.91	0.88	0.85	0.92	0.92	2 0.97 0.80		(5) Smoothed Minima		
Mittlere NS-Werte berech	net mit d	en für jed	e einzelr	e Zeitreih	e und Ve	erfahren op	otimierte	n Digita	al-Filter-	Param	etern		(7) LfW		
Mittel NS_Tag	0.85	0.91	0.86	0.85	0.78	0.81	0.31	0.85	0.67	0.77	0.36	0.87	(8) Rora		
Mittel NS_Monat	0.96	0.98	0.94	0.95	0.92	0.90	0.28	0.92	0.75	0.83	0.38	0.94	(9) Kille		
Mittel NS_Jahr	0.93	0.95	0.90	0.89	0.89	0.91	-2.17	0.87	0.23	0.66	0.46	0.90	(10) Furey Gupta		
													(14) DIFGA QG2		
NS-Werte berechnet mit of	den für je	de Methoo	le <b>über a</b>	Ile Zeitrei	hen gem	ittelten Dig	gital-Filte	er-Para	metern				(15) DIFGA QG1+QG2		
Mittel NS_Tag	0.29	0.80	0.17	0.55	0.62	0.73	-0.65	0.25	0.02	0.06	0.26	0.88			
Mittel NS_Monat	0.62	0.88	0.62	0.83	0.80	0.88	-0.70	0.62	0.15	-0.09	0.27	0.93			
Mittel NS_Jahr	0.01	0.74	0.04	0.42	0.48	0.71	-3.58	0.11	-0.07	-3.32	0.32	0.87			

**Tabelle 3.3:** Ergebnisse der Kalibrierung der Digital-Filter-Methode an den anderen Separationsverfahren berechnet für die 209 Ganglinien des Gesamtgebietes der Oberen Donau. Der Nash-Sutcliff-Beiwert  $NS \in [-\infty; 1]$ , 1 bedeutet eine perfekte Anpassung.

-	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)	(13)	(14)	(15)		
(1)	1.00	0.82	0.32	0.50	Х	Х	0.07	0.69	Х	0.46	0.58	Х	Х	Х	0.65	(1)	FixedInterval
(2)	0.82	1.00	0.38	0.53	Х	Х	0.11	0.76	Х	0.58	0.66	Х	Х	Х	0.71	(2)	Sliding Interval
(3)	0.66	0.73	1.00	Х	Х	Х	Х	0.71	Х	0.48	0.68	0.16	Х	Х	0.72	(3)	Local Minimum
(4)	0.31	0.42	Х	1.00	Х	Х	0.32	0.26	Х	Х	0.02	Х	Х	Х	0.52	(4)	Wittenberg
(5)	Х	Х	Х	Х	1.00	Х	Х	Х	Х	Х	Х	0.72	0.25	Х	Х	(5)	Smoothed Minima
(6)	Х	Х	Х	Х	Х	1.00	Х	Х	0.81	Х	Х	0.09	0.25	Х	Х	(6)	Wundt
(7)	Х	Х	Х	Х	Х	Х	1.00	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	(7)	LfW
(8)	0.64	0.74	0.19	Х	Х	Х	0.02	1.00	Х	0.64	0.78	Х	Х	Х	0.76	(8)	Rora
(9)	Х	Х	Х	Х	Х	0.83	Х	Х	1.00	Х	Х	Х	0.31	Х	Х	(9)	Kille
(10)	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	1.00	0.40	Х	Х	Х	Х	(10)	Furey-Gupta
(11)	0.56	0.67	0.15	Х	Х	Х	0.10	0.79	Х	0.74	1.00	Х	Х	Х	0.54	(11)	Dig.Filt. Pass 1
(12)	Х	Х	0.34	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	1.00	Х	Х	Х	(12)	Dig.Filt. Pass 2
(13)	Х	Х	Х	Х	0.71	Х	Х	Х	Х	Х	0.16	0.46	1.00	Х	0.16	(13)	Dig.Filt. Pass 3
(14)	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	Х	1.00	Х	(14)	DIFGA QG2
(15)	0.52	0.64	0.15	Х	Х	Х	0.05	0.67	Х	0.24	0.41	Х	Х	Х	1.00	(15)	DIFGA QG1+QG2

**Tabelle 3.4:** Ergebnisse der regressionsgestützten Analyse (mittlere NS-Beiwerte nach dem Jackknifing-Verfahren) über die Permanenz der Beziehungen zwischen verschiedenen Separationslinien. Die Analyse wurde für die Ganglinien des Ammergebietes durchgeführt.  $NS \in [-\infty; 1]$ , 1 bedeutet eine perfekte Anpassung. Nur die Werte über 0.0 werden dargestellt.

beschäftigt sich mit der Frage, ob die Ähnlichkeit zwischen den Verfahren so weit geht, dass sich dafür feste mathematische Beziehungen finden lassen.

# 3.4.2 Mathematische Beziehungen zwischen Ergebnissen verschiedenen Separationsverfahren

Hohe Korrelationswerte zwischen den unterschiedlichen Separationsergebnissen für jede Ganglinie bedeuten, dass direkte Beziehungen zwischen diesen Ergebnissen vorhanden sind. Diese Aussage würde viel an Relevanz gewinnen, wenn man zeigen könnte, dass diese Beziehungen für alle Einzugsgebiete gleich bleiben: Man müsste dann nur ein Verfahren effektiv einsetzen und könnte die Ergebnisse der anderen nachrechnen.

Eine Möglichkeit, diesen Punkt zu klären, wäre der Einsatz einer linearen Regres-

sionsanalyse zwischen den Separationslinien. Bevor diese vorgestellt wird, wird eine alternative Lösung vorgestellt. Als CHAPMAN (1991) den Digital-Filter-Algorithmus von Lyne-Hollick kritisiert und eine Verbesserung vorschlägt, antworten NATHAN und MCMAHON im gleichen Artikel, dass die Kritik nicht relevant sei, weil Lyne-Hollick immer durch Änderungen des Filterparameters und der Anzahl der Filterpässe angepasst werden kann. Bis jetzt wurde die Digital-Filter-Methode in dieser Arbeit in der von NATHAN und MCMAHON (1990) vorgeschlagenen Form, mit  $\beta = 0.925$ und n = 1, 2 und 3 angewandt. Die Idee, die zwei Parameter des Digital-Filter-Algorithmus an den Ergebnissen anderer Verfahren zu kalibrieren, wurde übernommen, um die ursprüngliche Frage der Beziehungen zwischen den Separationslinien zu beantworten. Diesem Ansatz folgend wurde für jede der 209 Ganglinien die Gl. 3.7 der Digital-Filter an den übrigen elf Separationslinien anhand eines automatischen Optimierungsverfahrens kalibriert. Der Nash-Sutcliff-Beiwert NS zwischen den beiden Separationslinien auf der täglichen Skala wurde als Ziel der Optimierung gesetzt.

Tab. 3.3 stellt die Ergebnisse dieser Analyse dar. Die Kalibrierung der Digital-Filter an den anderen Verfahren für jede einzelne Ganglinie erfolgte mit guten Ergebnissen (NS > 0.75 für alle Zeitskalen) für neun von zwölf Verfahren. Die Werte gelten aber für eine individuelle Anpassung der Parameter an jede Ganglinie. Wenn für jedes Verfahren alle Ganglinien gleichzeitig angepasst werden, sind die NS-Beiwerte deutlich schlechter und ein Zeichnen dafür, dass die gesuchten Beziehungen zwischen den Separationslinien nicht für alle Einzugsgebiete gleich sind.

Die regressionsgestützte Analyse der Permanenz der Beziehungen zwischen verschiedenen Separationslinien wurde aus Recheneffizienzgründen nur für die Ganglinien des Ammergebietes ausgeführt und beruhrt auf der Jackknifing-Methodik (SI-MONOFF 1996). Jede Ganglinie wurde einmal aus dem Datensatz entfernt und die übrigen Ganglinien wurden verwendet, um die optimalen Regressionsparameter zwischen je zwei Separationslinien zu berechnen. Anschließend wurden die gefundenen Parameter auf die erste Ganglinie angewandt und mit dem entfernten Datensatz verglichen. Die berechneten mittleren NS-Beiwerte werden in Tab. 3.4 vorgestellt. Nur 8 aus 210 Werten sind über 0.75 (dem Wert, ab dem eine Anpassung als erfolgreich bewertet werden kann), nur 34 sind über 0.5. Wie bei der Digital-Filter-Kalibrierung (Tab. 3.3) sind die Verfahren am unteren BFI-Bereich (LfW und DIFGA-QG2) die unabhängigsten Verfahren, da ihre Ergebnisse aus keinem der übrigen Verfahren abgeleitet werden können. Die Güte der Regression zwischen den Ergebnissen der am oberen BFI-Bereich gruppierten Verfahren (Fixed Interval, Sliding Interval, Rora, DIFGA QG1+QG2) ist dagegen etwas höher, was eine Bestätigung der Ähnlichkeit ihrer Ergebnisse ist.

Obwohl die Separationslinien parallel zueinander verlaufen und ihre Anordnung sehr stabil bleibt, kann man also nicht daraus ableiten, dass durch die Anwendung eines einzigen Verfahrens die übrigen Ergebnisse nachgerechnet werden können.

### 3.4.3 Analyse der Abhängigkeit der Ergebnisse von Ganglinienseparationsverfahren von der räumlichen Skala

Autoren vieler Ganglinienanalysemethoden warnen vor der Anwendung der Verfahren auf zu große Einzugsgebiete. Die angegebene obere Grenze schwankt zwischen 500 km<sup>2</sup> (SCHWARZE et al. 1999) und 1300 km<sup>2</sup> (RUTLEDGE 1998) und wird mit

der Heterogenität des Niederschlagfeldes begründet. Die Ergebnisse der Anwendung zwölf verschiedener Verfahren auf 209 Teileinzugsgebiete mit Größen zwischen 55 und 2775 km<sup>2</sup> erlauben eine detailliertere Analyse dieser Fragestellung. Zusätzlich ist die Untersuchung der Abhängigkeit von der räumlichen Skala ein wichtiger Beitrag in der Frage der Vergleichbarkeit der Ergebnisse, die an unterschiedlichen Pegeln berechnet wurden. Neben den zwölf Verfahren, die auf die 209 Ganglinien des Gesamtgebietes der Oberen Donau angewandt wurden, wurde die Analyse auch für den Unterschied BFI<sub>max</sub> – BFI<sub>min</sub> (die Breite des BFI-Bereiches für eine Ganglinie) durchgeführt.

Abb. 3.15 stellt die linearen Korrelationskoeffizienten zwischen dem BFI-Wert und der Gebietsfläche über die 209 Teileinzugsgebiete vor. Der t-Test (HARTUNG 2002, S. 547) wurde angewandt, um das Signifikanzniveau der Korrelationswerte gegen über der Hypothese, dass die beiden zu vergleichenden Variablen voneinander unabhängig sind, zu berechnen. Aus den dreizehn Korrelationskoeffizienten (zwölf BFI und der Unterschied BFI<sub>max</sub> – BFI<sub>min</sub>) wurde der Unabhängigkeitshypothese in zehn Fällen zum Niveau 0.95 und in sieben Fällen zum Niveau 0.99 widersprochen. Alle signifikanten Korrelationswerte sind negativ: Ein systematischer absteigender BFI-Trend mit steigender Fläche des Einzugsgebietes ist also vorhanden. Diese Aussage widerspricht anscheinend den Ergebnissen von LACEY und GRAYSON (1998), wobei die von ihnen untersuchten 114 Einzugsgebiete in Südost-Australien maximal 100 km<sup>2</sup> groß waren (nur 17 % der hier untersuchten Gebiete sind kleiner als diese Grenze). Auch in den Arbeiten von HABERLANDT at al. (2001) und ARMBRUSTER (2002) erscheint die Fläche nicht als Parameter von dem der BFI-Wert signifikant abhängig wäre.

In Abb. 3.15 kann aber man beobachten, dass der negative Trend hauptsächlich von den wenigen Einzugsgebieten mit einer Fläche größer als 1000-1300 km<sup>2</sup> gegeben wird. Die Angaben in der Literatur (HENNIG und SCHWARZE 2001, RUTLEDGE 1998, KÖNIG et al. 1994) konnten also bestätigt werden. Für zu große Gebiete finden Niederschlagsereignisse nicht mehr gleichzeitig auf der Gesamtfläche statt (RUTLEDGE 1998), was dazu führt, dass die Abflussganglinie von mehreren lokalen Minima und Maxima geprägt ist. Das bedeutet wiederum einen kleineren Basisabflussanteil.

Ein zusätzlicher Test der Beziehung zwischen dem BFI und der Einzugsgebietsgröße wird in dieser Arbeit durch die besondere Art der Berechnung der Einzugsgebietsganglinie entwickelt. Das in Kap. 3.3 beschriebene Flussmodell rechnet eine Ganglinie für jede Raumeinheit aufwärts von einem Pegel oder zwischen zwei Pegeln. Damit bietet sich eine neue Alternative an. Der Basisabflussanteil eines Einzugsgebiets kann über die Addition der Basisabflussanteile seiner Teileinzugsgebiete berechnet werden. Wenn mehrere Pegel vorhanden sind, ergeben sich viele Berechnungsmöglichkeiten für den gleichen Paremeter, den GesamtBFI. Jede Möglichkeit ist von einer mittleren Größe der verwendeten Teileinzugsgebiete charakterisiert. Durch den direkten Vergleich der Ergebnisse, die auf unterschiedlichen räumlichen Skalen beruhen, kann man direkt die Wirkung der Gebietsgröße auf den BFI-Wert abschätzen. Weiterhin wird in dieser Arbeit dieser Vergleich als Additivitätsanalyse bezeichnet. Wenn das Ergebnis über mehrere Berechnungsmöglichkeiten für ein bestimmtes Verfahren gleich bleibt, wird die Methode als additiv (und als nicht additiv, wenn das Gegenteil wahr ist) charakterisiert.

Sechs Gebiete wurden für diese Analyse ausgewählt: das Naabtal im Oberpfälzer



Abbildung 3.15: Links Korrelation zwischen den berechneten BFI-Wert und der Fläche des Teileinzugsgebietes. Anhand des t-Testes ist der für das Verfahren der Unbhängigkeitshypothese notwendige Korrelationwert gleich 0.08 für das Niveau 0.90, 0.11 für das Niveau 0.95 und 0.16 für das Niveau 0.99.
 Rechts Darstellung der BFI-Werte (Rora) gegenüber der Einzugsgebiets-fläche.

Wald, das Ötztal und das Silltal in den Alpen, das Ammertal an der Grenze zwischen den Alpen und dem Voralpenraum und das Illertal und das Vilstal im Quartär-Molasse Bereich. Die sechs Gebiete mit insgesamt 39 Teileinzugsgebieten decken damit fast alle wichtigen hydrogeologischen Haupteinheiten des Einzugsgebietes der Oberen Donau ab. Sie erlauben durch sequentielle Gruppierungen der Teileinzugsgebiete den beschriebenen Vergleich für 21 Raumeinheiten, wobei für jede Raumeinheit zwischen zwei und sechs BFI-Berechnungsalternativen vorliegen.

Abb. 3.16 zeigt den Vergleich für das Einzugsgebiet des Pegels Weilheim an der Ammer. Fünf Berechnungsalternativen (Fälle) wurden verglichen. Das Ergebnis fällt überraschend deutlich aus: Alle zwölf Verfahren verhalten sich eindeutig nicht additiv. Je mehr Teileinzugsgebiete (oder je kleiner die Fläche der Grundeinheit) in der Berechnung einbezogen werden, desto kleiner ist der aggregierte BFI-Endwert. Der Unterschied zwischen dem ersten und dem fünften Fall beträgt zwischen 0.06 und 0.17 und ist damit nicht vernachlässigbar.

Die Statistik für alle untersuchten Fälle ist in Abb. 3.17 dargestellt. Zuerst wurden die BFI-Werte über sämtliche Separationsverfahren gemittelt: Das Ergebnis wird mit  $\overline{\text{BFI}}$  bezeichnet. Dann wurde ein Maß für die Nicht-Additivität ausgesucht: die Variable  $\overline{\text{BFI}}_1 - \overline{\text{BFI}}_n$ , mit  $\overline{\text{BFI}}_1$ , dem  $\overline{\text{BFI}}$ -Wert berechnet anhand der Ganglinie des Gesamteinzugsgebiets, und  $\overline{\text{BFI}}_n$ , dem  $\overline{\text{BFI}}$ -Wert berechnet durch die Aggregierung der Ergebnisse aus n-Teileinzugsgebieten. Je größer der Unterschied ist, desto größer ist die Nicht-Additivität der Verfahren. Die  $\overline{\text{BFI}}_1 - \overline{\text{BFI}}_n$ -Werte wurden gegenüber der Anzahl n der in der Aggregierung mitgenommenen Teileinzugsgebiete und gegenüber  $A_1 - A_n$ , mit  $A_1$  der Fläche des Gesamteinzugsgebietes und  $A_n$  der mittleren Fläche der n Teileinzugsgebiete, dargestellt.

Das für die Weilheim-Ganglinie gezeigte Verhalten wird hier bestätigt. Sämtliche berechneten Fälle zeigen einen deutlichen Anstieg des BFI mit dem Anstieg der Fläche. Jedes der sechs Teileinzugsgebiete scheint eine eigene Dynamik zu haben, deshalb wäre die Quantifizierung des Anstiegstrendes über alle Punkte nicht sinnvoll.

3.4 Anwendung signifikanter Ganglinienseparationsverfahren



Abbildung 3.16: BFI-Additivitätsanalyse für das Einzugsgebiet Weilheim an der Ammer (n ist die Anzahl der Teileinzugsgebiete, die in der Aggregierung mitberücksichtigt wurden; A<sub>n</sub> ist die mittlere Fläche der n Teileinzugsgebiete).

Bemerkenswert ist aber, dass keine untere Grenze für dieses Verhalten zu beobachten ist. Die kleinsten  $A_1 - A_n$ -Werte in der Analyse sind im Bereich  $50 - 150 \text{ km}^2$  und die  $\overline{BFI}_1 - \overline{BFI}_n$  sind schon ab hier nicht vernachlässigbar.

Bevor physikalische Gründe formuliert werden, ist es ratsam zuerst die Methodik in Frage zu stellen. Ein mögliches Argument, sie abzulehnen, ist, dass die BFI-Werte nicht auf gemessenen Ganglinien sondern auf Ganglinien, die selber Modellergebnisse und damit mit Modellierungsfehlern und Unsicherheiten behaftet sind, berechnet wurden.

Wie in Kapitel 3.3 berichtet wurde, hat das Flussroutingmodell alle gestellten Tests bestanden, auch wenn keine "echte" Validierung des Flussmodells durchgeführt wurde, weil keine direkten Messdaten für die Ganglinie eines Zwischenteileinzugsgebietes zur Verfügung standen. Wenn man annimmt, dass das Ergebnis kein Modellfehler ist, wäre eine mögliche Erklärung die Wirkung der hydraulischen Dämpfung. Sogar in einem 50 km<sup>2</sup> großen Einzugsgebiet ist der Hauptflussverlauf mehr als 10 km lang, die Länge steigt mit der zunehmenden Gebietsfläche. Die Ganglinien einzelner kleiner Teileinzugsgebiete werden weniger von der Dämpfung und von der davon resultierenden Verflachung geprägt als die Ganglinie des Gesamtgebietes. Eine flachere Ganglinie bedeutet auch mehr Basisabflussanteil. Je länger der Flussverlauf ist, desto grösser wird der Wasseranteil, der fälschlicherweise als langsamer Basisabfluss interpretiert wird. Eine zweite Erklärung wäre die Wirkung der Superposition der Signale, die aus unterschiedlichen Teilen des Gebietes stammen. Die Superposition von mehreren schnellen Signalen mit niedrigen BFI-Werten könnte bei kleinen zeitlichen Verschiebungen zu einem langsameren Signal mit einem hohen BFI-Wert führen.

## 3.4.4 Interpretation der Ergebnisse

Zwölf verschiedene Separationsverfahren wurden auf die Ganglinien des Einzugsgebiets der oberen Donau angewandt. Die wichtigsten Ergebnisse sind hier zusammengefasst:



**Abbildung 3.17:** BFI-Additivitätsanalyse für sechs ausgewählten Einzusgebiete.**oben** -  $\overline{BFI_1} - \overline{BFI_n}$  gegenüber n; **unten** -  $\overline{BFI_1} - \overline{BFI_n}$  gegenüber  $A_1 - A_n$ .  $\overline{BFI}$  ist der Basisabflussindex gemittelt über sämtliche angewandte Separationsverfahren,  $A_n$  ist die Fläche des Teileinzugsgebietes und der Index n gibt die Anzahl der Teileinzugsgebiete, die in der Aggregierung mitberücksichgt wurden.

- Die sehr unterschiedlichen Separationsalgorithmen führen, wenn auf höheren zeitlichen Skalen aggregiert, zu sehr ähnlichen Linien in ihrer Dynamik, die als quasi-parallel bezeichnet werden können. Die linearen Korrelationswerte sind entsprechend sehr hoch: Auf der monatlichen Skala beträgt der Mittelwert 0.92. Eine Ausnahme bildet die langsame DIFGA-QG2-Komponente, die eine eigene, deutlich gedämpftere Dynamik hat.
- Weil sie fast die gleiche Dynamik haben, können die Separationsverfahren ausreichend durch den BFI unterschieden werden. Es gibt Verfahren, die systematisch hohe BFI-Werte liefern (Fixed Interval, Rora, Wittenberg, DIFGA-QG1+QG2) und Verfahren, die systematisch niedrige BFI-Werte liefern (LfW, Kille, DIFGA-QG2). Die Anordnung der Verfahren nach dem BFI-Wert führt zu einer sehr stabilen Hierarchie. Um den Bereich der BFI-Werte zu definieren, reicht es also aus, zwei Verfahren anzuwenden, eins für die obere Grenze und eins für die untere Grenze. Die beiden DIFGA-Komponenten sind dafür geeignet; andere Paare (z.B. Digital-Filter und LfW), die einfacher zu berechnen sind, sind aber auch einsetzbar.
- Obwohl für jede Ganglinie die Korrelationswerte zwischen den Separationslinien sehr hoch sind, können die Beziehungen zwischen den Separationslinien nicht für alle Ganglinien verallgemeinert werden. Diese Aussage gilt stärker für die niedrigen BFI-Verfahren als für die hohen BFI-Verfahren.

- Ab einer bestimmten Gebietsgröße sind die BFI-Werte stark abhängig von der Fläche. Die festgestellte Grenze liegt zwischen 1000 und 1300 km<sup>2</sup> und entspricht vielen Literaturergebnissen.
- Alle Ganglinienseparationsverfahren verhalten sich stark nicht-additiv. Die Folge ist, dass Ergebnisse auf unterschiedlichen räumlichen Skalen nicht direkt miteinander vergleichbar sind.

Die wichtigste Erkenntnis ist die Definition des Basisabflussbereiches. Zwei mögliche physikalische Interpretationen bieten sich in Anlehnung an die Literatur an:

- Der Basisabflussbereich kann als der Bereich gesehen werden, in dem sich die Grundwasserabflussganglinie oder die Summe der Grundwasser- und Sickerwasserganglinien mit einer gewissen Plausibilität befinden. Es ist die Interpretation, die PETTYJOHN und HENNING (1979) gemeint haben, als sie schrieben, dass das was Ganglinienseparationsmethoden aussagen, das ist, dass der Basisabfluss "wahrscheinlich nicht kleiner als ca. \_ und nicht größer als ca. \_" ist.
- Relevanter für diese Arbeit ist die Interpretation, die von den Autoren des DIFGA-Verfahrens (SCHWARZE et al. 1999) gegeben wird. Die untere Grenze des Bereiches entspricht dem langsamen, tiefen Grundwasserabfluss, der Bereich selber dagegen dem schnelleren Zwischenabfluss, der in dieser Arbeit weiter mit dem Abfluss aus dem Sickerraum identifiziert wird. Wichtig ist, dass diese Interpretation sich fundamental auf die Separation schnell/mittel/langsam für Direkt-/Zwischen-/Basisabfluss stützt. Die Tracer-basierten Untersuchungen, die sich mit dem Thema befassen (SCHWARZE et al. 1991, CHAPMAN und MAXWELL 1996, UHLENBROOK et al. 2002), bestätigen teilweise diese Interpretation, auch wenn die berücksichtigten Gebiete wenige km<sup>2</sup> groß sind und damit zu klein für einen wirklich relevanten Vergleich. Die Unsicherheit dieser Interpretation ist aber erheblich höher.

# 3.5 Regionalisierung der Ergebnisse der Ganglinienanalyse

Ein wichtiges Ziel dieses Kapitels besteht darin, Aussagen über die Zuverlässigkeit zu treffen, mit der man die Ergebnisse der Ganglinienseparationsverfahren physikalisch interpretieren kann. Die Verfahren verwenden die Abflussganglinie als einzige Informationsquelle, eine physikalische Interpretation hingegen verbindet die Ergebnisse mit den Gebietseigenschaften. Man muss aber zuerst eine solche Verbindung nachweisen, um die Berechtigung für die Interpretation zu gewinnen. Die systematische Untersuchung der Existenz einer solchen Verbindung wird als Regionalisierungsanalyse bezeichnet (SCHREIBER 1995).

Methodisch gesehen kann der Nachweis deterministisch oder stochastisch sein. Der deterministische Weg besteht darin, analytische Beziehungen anhand mathematischer Gleichungen verschiedener physikalischer Prozesse abzuleiten. Der stochastische Weg bedeutet, statistische Verfahren zu verwenden, um zu solchen Beziehungen zu kommen. Das verbreiteste Verfahren, das auch hier zum Einsatz kommt, ist die mehrfache lineare Regressionsanalyse.

Die lineare Regressionsanalyse wird verwendet, um den Einfluss npar Parameter  $x_{ij}$  auf eine Variable  $y_j$  zu prüfen und zu quantifizieren (*i* dem Index über die Parameter und *j* dem Index über die Datensätze, PEDHAZUR 1997). Eine formelle lineare mathematische Beziehung zwischen den Parametern und der Variable ist:

$$y_j = a_0 + \sum_{i=1}^{npar} a_i \cdot x_{ij}$$
(3.15)

mit den unbekannten Regressionskoeffizienten  $a_i$ . Wenn np Datensätze vorhanden sind (hier die Anzahl der Ganglinien und der damit verbundenen Einzugsgebiete) bilden die np Gleichungen 3.15 ein lineares Gleichungssystem mit npar + 1 Unbekannten  $a_i$ . Für np > npar ist das System überbestimmt und hat keine eindeutige Lösung. Deswegen muss ein Optimierungsverfahren eingesetzt werden, um die npar+1 Unbekannten zu bestimmen, die der np-große  $y_j$ -Datensatz am bestens durch die mit Gl. 3.15 gerechneten  $\hat{y}_j$  nachbildet. Für die Optimierung wird die Methode der kleinsten Quadrate angewandt, die  $\sum_{i=1}^{np} (y_j - \hat{y}_j)^2$  minimiert. Die Minimierung erfolgt durch die (npar + 1)-fache Ableitung von E nach  $a_i$ , i = 0, npar. Das Ergebnis der Ableitung ist ein lineares Gleichungssystem mit npar + 1 Gleichungen und Unbekannten. Das System hat, wenn sich die Daten nicht widersprechen, genau eine Lösung. Für seine Lösung können viele klassische Methoden verwendet werden, eine mit dem Crout-Algorithmus gerechnete LU-Zerlegung wurde in dieser Arbeit wegen ihrer Sparsamkeit an Rechenressourcen ausgesucht (Implementierung nach PRESS et al. 1991, S. 36).

Die Variablen  $y_j$  sind hier die zwölf BFI-Werte, die für alle 209 Ganglinien des Einzugsgebietes der Oberen Donau berechnet wurden, dazu noch BFI<sub>max</sub> – BFI<sub>min</sub>: Dreizehn Regionalisierungsprobleme waren also zu lösen. Die Hauptschwierigkeit in einer Regionalisierung ist die Auswahl der unabhängigen Parameter, hier die Gebietseigenschaften. Das Ziel ist, die Parameter zu finden, die am meisten die BFI-Werte beeinflussen und die zu einer optimalen Güte der Regression führen. Die Anzahl der Parameter muss so klein wie möglich sein, um auf der einen Seite kein überparametrisiertes Regressionsmodell zu haben und auf der anderen Seite die Aussagekraft der Parameterauswahl zu erhöhen. Die zwei Ziele, maximale Güte und minimale Parameter steigt. Das Problem hat damit keine eindeutige Lösung. Um es zu bewältigen, wurde ein mehrstufiges Verfahren verwendet, das ähnlich dem von Samaniego (2003) ist. Es wird hier nur zusammengefasst, für mehr Details wird auf die zitierte Arbeit hingewiesen:

- Schritt 1 Alle Gebietsparameter, die potentiell eine Einfluss haben könnten, werden ausgesucht und für alle Teileinzugsgebiete berechnet. Über diese Auswahl der Parameter wird später in diesem Kapitel berichtet;
- Schritt 2 Schrittweise Vorwärts- und Rückwärts-Eliminierungen werden durchgeführt, um die Parameter, die den kleinsten Einfluss haben, von der Auswahl zu entfernen (GILCHRISK 1984). Als Maß der Regression wurde die Güte der Schätzung  $R^2$  ausgewählt:

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{np} (y_{j} - \hat{y}_{j})^{2}}{\sum_{j=1}^{np} (y_{j} - \bar{y})^{2}}$$
(3.16)

mit  $\bar{y}$  dem Mittelwert von  $y_j$ , j = 1, np. Die beiden Algorithmen haben als Ergebnis zwei Rangfolgen aller Parameter geordnet nach der Stärke ihres Einflusses. Die zwei Rangfolgen werden aggregiert, dabei wird ein kleiner (0.5) Kompensationsparameter verwendet, so dass die Parameter, die auf beiden Listen auf einer niedrigen Stelle stehen, eliminiert werden. Aus Gründen der Recheneffizienz wurden nach diesem Verfahren die besten 16 Parameter behalten;

Schritt 3 Mit den übrig gebliebenen Parametern werden alle möglichen Kombinationen gebildet und die Regression für jede Kombination gelöst. Für 16 Parameter gibt es  $2^{16} - 1 = 65535$  Kombinationen. Die besten 500 Kombinationen werden ausgesucht, wobei das Einordnen nach dem  $C_p$ -Wert, auch Mallows-Statistik genannt, geschieht.

$$C_p = \frac{(1 - R_p^2)(np - npar)}{1 - R_{npar}^2} + 2p - np$$
(3.17)

mit p der reduzierten Zahl der Parameter,  $R_p^2$  der entsprechenden Regressionsgüte,  $R_{npar}^2$  der Regressionsgüte für das Modell mit allen npar-Parametern (das gesättigte Modell).  $C_p$  drückt wie  $R^2$  die Güte der Schätzung aus (BE-RENSON et al. 1983), wobei ein mit steigender Anzahl der Parameter steigender Straffterm zugefügt wird, um die Präferenz für sparsame Modelle zu betonen;

Schritt 4 Alle 500 ausgewählten Kombinationen werden validiert. Dafür wird die Cross-Validierungs-Technik, ein spezieller Fall der Jackknifing-Methode, angewandt (SIMONOFF 1996). Die Methode besteht darin, ein Mitglied aus dem Datensatz zu entfernen, die Regression für den Rest des Datensatzes zu lösen, um sie dann auf das entfernte Mitglied anzuwenden. Das Verfahren wird für alle Datensatzmitglieder wiederholt. Die Methode ist in ihrer Philosophie der üblichen Modellvalidierung ähnlich: Das kalibrierte Modell wird anhand neuer Daten geprüft. Um die Kombinationen wieder anzuordnen, wird die Jackknife-Statistik  $\Theta$  als Gütemaß benutzt:

$$\Theta = \sum_{j=1}^{np} (y_j - \hat{y}_j)^2.$$
(3.18)

Die besten 50 Kombinationen werden für den nächsten Schritt ausgesucht;

Schritt 5 In diesem Schritt wird jede verbliebene Kombination anhand eines Signifikanztests für jeden ihrer Parameter  $x_{kj}$ , j = 1, np geprüft: Die Wahrscheinlichheit, mit der die Hypothese, dass  $y_j$  und  $x_{kj}$  voneinander unabhängig sind, nicht verworfen werden kann, wird errechnet. Dafür wird die Resampling- (oder Bootstrapping) Technik benutzt (CANTY 2002). Für jeden Parameter  $x_{kj}$ , j = 1, npeiner Kombination werden in der  $a_{ij}$ -Matrix n = 1000 zufällige Permutationen des Spaltenvektors  $a_{kj}$ , j = 1, np gebildet und damit der ursprüngliche Vektor ersetzt. Nach jeder Lösung des Regressionsproblems wird geprüft, ob das neue Bestimmtheitsmaß besser ist als das, das mit den richtigen  $a_{kj}$ , j = 1, np-Daten berechnet wurde. Wenn dies für mehrere Permutationen der Fall ist (5 % wurde

hier als oberste Grenze ausgesucht), ist dies ein Zeichnen, dass der Parameter  $x_{kj}$  mit einer Wahrscheinlichkeit von mehr als 5 % von  $y_j$  unabhängig sein könnte: Die Kombination wird verworfen;

Schritt 6 Die übrig gebliebenen Kombinationen sind die Lösung des Problems. Für jeden Parameter der Matrix, mit dem die Analyse angefangen wurde, wird errechnet, in wieviel Prozent der Endkombinationen er anwesend ist. Je höher dieser Anteil ist, desto stärker ist der Einfluss des Parameters auf den Basisabflussanteil.

Für die Erstgenerierung des Parametersatzes wurden Gebietseigenschaften aus fünf Klassen ausgesucht: Morphologie, Meteorologie, Landnutzung, Boden und Hydrogeologie. Um die Empfindlichkeit des Verfahrens gegenüber der Parameterauswahl zu testen, wurde die gesamte Analyse für zwei Parametersätze durchgeführt: einen mit insgesamt 22 Parametern (p22) und einen mit 41 Parametern (p41). Die folgenden Eigenschaften oder Klassifikationen wurden verwendet:

- Morphologie Fläche des Teileinzugsgebietes, mittlere Höhe des Geländes, Standardabweichung der Höhe innerhalb des Einzugsgebietes, der Gebietsformfaktor (Fläche geteilt durch Umfang), die Flussnetzdichte. Für p41 zusätzlich: das mittlere Gefälle und der topographische Index (BEVEN 2000).
- Meteorologie Für beide Parametersätze p22 und p41 nur der mittlere jährliche Gebietsniederschlag.
- Landnutzung Für p22 die Klassifizierung: Ackerland, Grünland, Wald, Siedlung, Fels. Für p41: die Klassifizierung - Sommergetreide, Wintergetreide, Mais, Grünland, Laubwald, Nadelwald, Siedlung, Fels, Gewässer, Gletscher. Als Regressionsparameter wurde der prozentuelle Anteil jeder Klasse im Gebiet benutzt.
- Boden p22: Sand, sandiger Lehm, Lehm und Ton, Felsboden. p41: Mittelsand, Grobsandkies, lehmiger Sand, sandiger Lehm, toniger Schluff, schluffiger Lehm, Lehm, Ton, Moorboden, Felsboden.
- Hydrogeologie p22: Paläozoikum des Bayerischen Waldes, nicht verkarstete alpine Gesteine, Kalkalpen, Karstaquifer (Malm+Kreide), Molassesedimente (Tertiär), Quartäre Moränensedimente, alluviale Aquifere. p41: Paläozoikum des Bayerischen Waldes, nicht verkarstete alpine Gesteine, Kalkalpen, (Malm) Karstaquifer, Kretazische Sedimente, Molassesedimente (Tertiär), Quartäre Moränensedimente, alluviale Aquifere, Sedimente aus Lias und Trias Gesteine, Nordlinger Ries, Wasser+Eis+Gletscher Flächen.

Die Güte der Endergebnisse  $R^2$  für beide Parametrisierungen und für jedes Separationsverfahren ist in Abbildung 3.18 dargestellt. Abbildung 3.19 zeigt die Schätzung der BFI-Werte. Im Allgemeinen versagt das Verfahren dabei, die ganze Variabilität der auf den Ganglinien berechneten BFI-Werte mit Hilfe der Gebietseigenschaften nachzubilden. Insbesondere die niedrigen BFI-Werte konnten durch die mehrfache Regression nicht richtig nachgerechnet werden. Das ist der Grund, warum die hier vorgestellten Ergebnisse mit einem mittleren  $\mathbb{R}^2 = 0.39$  bescheidener ausfallen als



**Abbildung 3.18:** Güte  $\mathbb{R}^2$  der Ergebnisse der Regionalisierung für die beiden verwendeten Parametersätze.

die, die in der Literatur zu finden sind:  $R^2 = 0.72$  für 114 Teileinzugsgebiete in Südost-Australien (LACEY und GRAYSON 1998),  $R^2 = 0.51$  in einer Studie über Baden-Württemberg (SCHREIBER 1995),  $R^2 = 0.76$  ebenfalls für Baden-Württemberg (AMBRUSTER 2002). Eine mögliche Erklärung ist, dass die 209 Teileinzugsgebiete durch die sehr unterschiedlichen Gebietseigenschaften (sehr große Flächenspannweite, sehr großer Höhenunterschied) ein weniger homogenes Bild als in den zitierten Fällen geben. Es ist interessant, dass die beste Anpassung für die Regionalisierung von BFI<sub>max</sub> – BFI<sub>min</sub> erhalten wurde, die einzige Variable, die nicht direkt aus den Ganglinien berechnet wurde.

Die Parameterauswahl enthält im Durchschnitt (über die 13 Regressionsprobleme und über die 50 Kombinationen in der Lösung jedes Problems) 8 Parameter für den p22-Datensatz und 12 für den p41-Datensatz. Wenn man die Parametermatrix der beiden Datensätze mit der Methode der Hauptkomponenten (JOLLIFE 1986) analysiert, entsprechen die Zahlen in beiden Fällen einer erklärten inneren Variabilität von ca. 80%. Das Ergebnis ist mit dem von Samaniego (2003) vergleichbar, der mit seiner Parameterauswahl 75-80% der inneren Variabilität seines Datensatzes erklärt hat.

Um die Beschreibung der Parameterauswahl übersichtlicher zu machen, wurden die 13 BFI-Werte zu drei Kategorien zusammengefasst: obere BFI-Grenze (Mittelwert von Fixed-Interval, Wittenberg, Rora und Digital-Filter Pass 1), untere BFI-Grenze (Mittelwert von Wundt, Kille, LfW und Digital Filter Pass 3) und BFI-Spannweite (BFI<sub>max</sub> – BFI<sub>min</sub>). Abbildung 3.20 zeigt die Anteile der Parameterklassen an der Parameterauswahl für die p22- und p41-Parametrisierungen. Die relativ großen Unterschiede zwischen den p22- und p41-Ergebnissen könnten wahrscheinlich dadurch erklärt werden, dass es zwischen den Gebietsparametern Abhängigkeiten gibt, die zu gegenseitigen Kompensationen im Parameterraum führen. Dass die Landnutzung, die Bodenart, die hydrogeologische Einheit und die Morphologie voneinander abhängig sind, ist offensichtlich. Ob ein Gebiet mit Laub-, Nadelwald oder Ackerland bedeckt ist, hängt stark von der Morphologie des Geländes und von der Bodenart ab. Der Boden ist meist die oberste verwitterte geologische Schicht und damit von der Geologie abhängig, aber die Landnutzung hat auch einen Einfluss; die Morphologie ist letztendlich durch ihre Entstehung von der Geologie bestimmt. Das Ergebnis der Regionalisierung bestätigt diese Aussagen.

Für die Interpretation der Parameterauswahl wurde verstärkt auf die p22-Parameterisierung gesetzt, in der die Hydrogeologie eine größere Rolle spielt. Tab. 3.5



Abbildung 3.19: Ergebnisse der BFI-Regionalisierung mit der reduzierten p<br/>41- Parameterisierung für jeden der dreizehn BFI-Werte. Die statistischen Parameter<br/> $R^2$ - Bestimmheitsmass, rs- Rest<br/>streuung,  $\Theta$ - Jackknife Statistik und  $C_b$ - Mallows Statistik sind angegeben.


Abbildung 3.20: Anteil der Paramaterklassen an der Endparameterauswahl für die zwei Parametrisierungssätze p22 und p41. Die 13 BFI-Regressionen wurden zu drei Kategorien zusammengefasst: obere BFI-Grenze, untere BFI-Grenze, BFI-Spannweite (Max-Min).

fasst die Häufigkeiten des Auftretens jedes Parameters in der Endkombinationen zusammen. Das Plus- oder Minuszeichen vor dem Häufigkeitswert ist das Vorzeichen des Regressionskoeffizienten für den gleichen Parameter und bezeichnet den positiven oder negativen Einfluss auf den BFI-Wert. Der Wert -0.50 für dem Parameter Fläche und für die Variable  $BFI_{max}$  bedeutet z.B., dass die Fläche in 50% der Regressionslösungen für die Berechnung von  $BFI_{max}$  auftritt und dass der Koeffizient der Fläche in der Regressionsgleichung negativ ist.

Die negative Korrelation zwischen dem Quartätanteil und allen drei BFI-Kategorien sind darauf zurückzuführen, dass für die großen Einzugsgebiete im Donautal, in denen der Quartäranteil groß ist, die BFI-Werte auffällig klein waren, was teilweise durch die für Separationsverfahren zu großen Flächen erklärt wurde. Die untere BFI-Grenze ist mit der mittleren Geländehöhe und mit der Standardabweichung der Geländehöhe stark negativ korreliert. Die drei Parameter sind besonders im alpinen Raum sehr groß, was zu einem kleinen BFI<sub>min</sub>-Wert in den Alpen führt. Die schnellen Fließprozesse in steilen hohen Gebieten sollten in der Tat zu kleineren langsamen Grundwasserabflussmengen führen. Dabei zeichnen sich Unterschiede zwischen den verkarsteten und nicht-verkarsteten alpinen Regionen.

Der positive Einfluss des Anteiles der nicht verkarsteten Alpen könnte als Beweis gesehen werden, dass die Verkarstung zu einem größeren Zwischenabfluss führt, zum Nachteil des langsames Grundwasserabflusses. Die Wald- und Grünlandregionen, die ein größeres Wasserspeichervermögen haben, haben ebenfalls einen positiven Einfluss auf den BFI<sub>min</sub>-Wert, in Gegensatz zu den Ackerland- und Siedlungregionen, in denen der Oberflächenabflussanteil höher ist. Der sehr undurchlässige Lehm-Ton-Boden hat auch einen negativen Enfluss auf die untere BFI-Grenze. Kombiniert mit dem positiven Einfluss auf die BFI-Spannweite deutet das auf Zwischenabfluss-dominierte Prozesse im alpinen Vorland hin, wo die undurchlässigen Moränensedimente sich befinden, und wo keine großen durchlässigen Grundwasserleiter vorhanden sind. Die Bodenklasse sandiger Lehm und die Geologieklasse Tertiär sind verbreitet im Tertiärhügelland und ihr positiver Einfluss auf den BFI<sub>min</sub> deutet darauf hin, dass die Anwesenheit des tiefen Tertiär-Grundwasserleiters zu einer wichtigeren langsamen Grundwasserabflusskomponente führt. Die BFI-Spannweite ist mit der Geologieklasse Paläozoikum des Bayerischen Waldes stark positiv korreliert. Im Bayerischen Wald werden die Fließprozesse von Kluftgesteinen dominiert, was zu hohen Zwischenabflüssen führt. Eine höhere Geländehöhe bedeutet auch mehr Zwischenabfluss. Die Landnutzung Wald hat einen negativen Einfluss auf den Zwischenabfluss.

	Morphologie F		Fläche	Mittel_DGM	StAbw_D0	GM Formfakt	or	Flussnetzdichte		Niederschlag			
	BFI <sub>max</sub>		- 0.50	+ 0.47	+ 0.47 - 1.00		0.00		- 0.10				
	BFI <sub>min</sub>		0.00	- 0.50	- 0.92	- 0.04	4	- 0.91		+ 0.09			
	BFI <sub>m</sub>	<sub>ax</sub> -BFI <sub>min</sub>	+ 0.17	+ 1.00	0.00	+ 0.1	7	0.0	00	+ 0.26			
Boden	Sand	Sandige	r Lehm	Lehm - Ton	Felsboden	Landnutzung	A	Ackerland	Wald	Grünland	Sie	dlung	Felsboden
BFI <sub>max</sub>	- 0.20	+ 0.	.33	- 0.71	+ 0.35	BFI <sub>max</sub>		- 0.36	- 0.44	+ 0.12	- (	0.11	+ 0.25
BFI <sub>min</sub>	- 0.30	+ 0.	.50	- 0.50	+ 0.65	BFI <sub>min</sub>		- 0.18	+ 0.35	+ 0.32	- (	0.19	+ 0.08
BFI <sub>max</sub> -BFI <sub>min</sub>	+ 0.52	- 0.	61	+ 0.52	- 0.61	BFI <sub>max</sub> -BFI <sub>mi</sub>	n	+ 0.26	- 1.00	0.00	0	.00	+ 0.13
Geologie	Paläo	z. Bayer. \	Vald A	pin nicht Karst	Alpin Karst	Malm Karst	Те	rtiär Molas	se M	oränen Sedi	m.	Quart	är Sand
BFI <sub>max</sub>		+ 0.07		+ 0.99	+ 0.26	- 0.06		- 0.05		- 0.43		-	0.98
BFI <sub>min</sub>		- 0.18		+ 0.83	+ 0.19	+ 0.03		+ 0.90		- 0.38		-	0.44
BFI <sub>max</sub> -BFI <sub>min</sub>		+ 1.00		+ 0.13	0.00	0.00		- 1.00		0.00		-	1.00

Tabelle 3.5: Zusammenfassung der Häufigkeiten der Regressionsparameter in der Regionalisierung der BFI-Werte. Das Plus- und Minus-zeichnen vor der Häufigkeit ist das Zeichnen des Regressionskoeffizientes für den gleichen Parameter. Die Häufigkeitswerte größer als 0.50 sind grau hinterlegt, um ihren stärkeren Einfluss zu betonen.

Wegen der Einzigartigkeit jeder Region ist es schwierig, die Einflüsse der Gebietsparameter auf die BFI-Werte, so wie sie in unterschiedlichen Studien bewiesen wurden, in einen direkten Vergleich zu stellen. LACEY und GRAYSON (1998) haben für ihr südost-australisches Gebiet als wichtigste Parameter einen von ihnen entwickelten Geologie-Vegetations-Index berechnet. In ZECHARIAS und BRUTSAERT (1988), VOGEL und KROLL (1992) und HABERLAND et al. (2001), treten morphologische Parameter, wie das mittlere Gefälle oder der topographische Index, auf, die auch hier in der p41-Parameterisierung besonders einflussreich waren. In AMBRUS-TER (2002) und GUSTART (1993) sind alle wichtigen Parameter von den spezifischen Boden- und Geologieklassifizierungen abhängig. In einer Studie der Regionalisierung der Grundwasserneubildung (NEUMANN 2004) für ganz Deutschland haben die klimatischen Eigenschaften verschiedener Regionen einen deutlich größeren Einfluss als die Geologie oder die Landnutzung.

Durch die Regionalisierungsanalyse, die in diesem Kapitel vorgestellt wurde, konnten gewisse Argumente für die physikalische Interpretation der BFI-Werte gefunden wurden. Die Deutung der unteren BFI-Grenze als Anteil an langsamen Grundwasserabfluss und der BFI-Spannweite als Zwischenabfluss scheint durch die Analyse der damit verbundenen Gebietsparameter relativ tragfähig zu sein. Auf der anderen Seite deutet die systematische Unterschätzung der Variabilität der BFI-Werte durch die Regression darauf hin, dass es wichtige Parameter, die diese Variabilität erklären und die hier nicht eingesetzt wurden, geben sollte.

# 3.6 Andere Methoden zur Ganglinienanalyse

Bis jetzt wurde in diesem Kapitel die Anwendung einiger Ganglinienseparationsverfahren diskutiert. Der Bereich der Ganglinienanalyseverfahren enthält jedoch auch andere Methoden. Wie die Separationsverfahren nutzen sie Abflussganglinien, aber auch Niederschlagszeitreihen und verschiedene Modellergebnisse zusammen mit mathematischen und statistischen Algorithmen, um Schlüsse über die hydrologischen Prozesse auf der Einzugsgebietskala zu ziehen. Drei solche Methoden werden hier



Abbildung 3.21: Bestimmung der Master Recession Curve (MRC) durch Aggregierung (Matching-Strip-Methode) der einzelnen Rückgänge. Die obere, mittlere und untere Umhüllenden der MRC werden dargestellt.



Abbildung 3.22: Anpassung des Einzelnlinearspeichermodells (ELS) an der Master Recession Curve (MRC). links - Anpassung des Modells mit einem ELS. Für die weitere Analyse wurde  $K_{end} = (K_{min} + K_{ave} + K_{max})/3$  verwendet. rechts - Anpassung des Modells mit zwei ELS dargestellt für nur einen der charakteristischen Rückgänge.  $K_{21}$  - schnellen Speicher,  $K_{22}$  - langsamen Speicher.

diskutiert und auf das Ammergebiet angewandt. Es handelt sich um die Ganglinienrückgangsanalyse, die Korrelogrammanalyse und die Berechnung einer Zeitskala der Antwort des Einzugsgebietes. Die drei Methoden berechnen eine signifikante Dauer der hydrologischen Prozesse in einem Einzugsgebiet. Sie werden zuerst beschrieben und dann ihre Ergebnisse vorgestellt.

Der **Ganglinienrückgang** kann mit der Entwässerung der Untergrundspeicherräume assoziiert werden. Durch die Anpassung einer mathematischen Funktion an den Rückgang, lassen sich die Parameter dieser Funktion später physikalisch interpretieren. Dafür wurde hier ein Linearspeichermodell mit einem Speicher (mit dem Koeffizient  $K(MRC_1)$  mit der Einheit Zeit) bzw. mit zwei Speichern (schnell- $K(MRC_{21})$ und langsam- $K(MRC_{22})$ ) angewandt und an die gebildete Master Recession Curve (MRC) angepasst.

In Abb. 3.21 ist die Bildung der MRC nach der Matching-Strip-Methode (NATHAN und MCMAHON 1990) dargestellt. Die einzelnen Rückgänge werden umgedreht und dann aneinander entlang der Zeitachse verschoben und systematisch angeordnet. Um die MRC besser zu beschreiben, wurden drei charakteristische Rückgänge gebildet: die obere, mittlere und untere Umhüllende der MRC. Der Mittelwert der Speicher-



**Abbildung 3.23:** Korrelogramm zwischen den berechneten PROMET-Ergebnissen und den Abflussganglinien für das Einzugsgebiet Unternogg an der Halbammer.  $Q_D$  - Oberflächenabfluss,  $P_{Gebirge}$  - Perkolation über die Gebirgsregion,  $P_{Tal}$  - Perkolation über den Talaquifer, Q - Abfluss.

konstanten der drei Rückgänge werden dann später in der Analyse verwendet. Die Anpassung der ein- und zwei-ELS-Modelle ist in Abb.

Um die mittleren Dauer eines Prozesses zu quantifizieren, kann man die zeitliche Verschiebung zwischen dem Input- und dem Outputsignal in der Form des Korrelogramms berechnen. Das Korrelogramm zwischen zwei Zeitreihen X und Y ist die Funktion  $r_{XY}(k)$ , die lineare Korrelation zwischen den Zeitreihen  $X_t$  und  $Y_{t+k}$ . Die Funktion gibt die Stärke des linearen Zusammenhangs bei einer Zeitverschiebung k (HARTUNG 2002, S. 728) an. Hier wurde das Korrelogramm zwischen den Ergebnissen des PROMET-Bodenwasserhaushaltmodells und den Abflussganglinien der Teileinzugsgebiete gerechnet. Die PROMET-Ergebnisse (der Oberflächenabfluss  $Q_D$ , die Perkolation  $P_{Gebirge}$  über die Gebirgsregion und die Perkolation  $P_{Tal}$  über den Talaquifer) wurden über die einzelnen Teileinzugsgebiete aggregiert. Mittels der Analyse des Korrelogramms kann man die maximale Zeitverschiebung berechnen, für die zwischen den PROMET-Ergebnissen und dem Abfluss noch ein signifikanter Zusammenhang nachweisbar ist. Diese Zeitverschiebung kann dann als die obere Grenze für die Dauer des physikalischen Prozesses, der die erste Zeitreihe (PRO-MET) in die zweite Zeitreihe (Abfluss) umwandelt, interpretiert werden. Abb. 3.23 zeigt die Analyse für den Pegel Unternogg an der Halbammer. Der Unterschied zwischen dem schnellen Oberflächenabfluss mit einer Antwortzeit von nur einem Tag und der langsamen Grundwasserperkolation ist deutlich zu sehen.

Eine andere Möglichkeit, die Dauer des hydrologischen Prozesses in einem Einzugsgebiet zu bestimmen, ist, eine so genannte **Antwortzeitskala des Einzugsgebietes** (*catchment response timescale* - RTS, MORIN et al. 2002) zu berechnen. Das Verfahren basiert auf dem Glätteunterschied zwischen der aggregierten Niederschlags- und der Abflussganglinie. Die Abflussganglinie ist immer glatter als die Niederschlagsganglinie und dafür ist das Einzugsgebiet verantwortlich. In diesem Verfahren wird die Zeitskala gesucht, die man für eine gleitende Mittelung braucht, um der Niederschlagszeitreihe die gleiche Glätte wie der Abflussganglinie zu geben. Das Verhältnis zwischen der Anzahl der Scheitelpunkte und der aufsummierten Länge der Ganglinienanstiegsteile dient als Quantifizierungsmaß der Glätte.

Ezg	K <sub>QG1</sub>	$K_{QG2}$	K(MRC <sub>1</sub> )	K(MRC <sub>21</sub> )	K(MRC <sub>22</sub> )	RTS	T <sub>korr</sub> (Q <sub>D</sub> )	T <sub>korr</sub> (P <sub>Gebirge)</sub>	$T_{korr}(P_{Tal})$
1	11	230	18	21	1132	3	1	50	50
2	12	230	23	38	894	3	1	45	45
3	11	230	18	21	1132	3	1	30	30
4	16	180	26	21	845	2	1	15	12
5	9	200	18	28	806	2	1	30	35
6	12	160	15	13	387	3	2	50	50
7	9	190	8	3	101	2	1	55	55
11	8	130	9	14	140	2	1	65	65
22	14	120	16	83	128	2	1	60	55
33	9	160	11	22	197	1	1	50	50
66	11	150	24	5	405	2	2	50	50

 

 Tabelle 3.6: Charakteristische Zeiten f

 f
 ür die hydrologischen Prozesse im Einzugsgebiet der Ammer. Alle Zahlen haben als Einheit Tag.

Im Einzugsgebiet der Ammer sind sieben gemessene Ganglinien verfügbar. Zusätzlich wurden auch die Ganglinien der vier Zwischenteileinzugsgebiete mit dem in Kap. 3.3 beschriebenen Flussmodell berechnet (11, 22, 33 und 66), insgesamt also elf Ganglinien. Tab. 3.6 fasst die Ergebnisse der drei Methoden zusammen. Die vom DIFGA-Verfahren berechneten Speicherkoeffizienten werden dabei auch dargestellt.

Auf Grund der Werte in Tabelle 3.6 lassen sich drei Spannweiten identifizieren. Zuerst die schnellste Komponente, die unmittelbar nach dem Niederschlagsereignis im Fluss auftritt und die hauptsächlich aus Oberflächenabfluss besteht. Die Zeitskala dieser Komponente wird von der RTS und von der  $T_{korr}(Q_D)$  wiedergegeben und bewegt sich im Bereich von einen bis maximal drei Tagen. Es ist interessant, dass die einzigen Einzugsgebiete, für die  $T_{korr}(Q_D)$  den Wert 2 und nicht 1 annimmt, die Einzugsgebiete sind, die den Staffelsee enthalten (6, 66). Der See hat eine abbremsende Wirkung und diese wird von der Analyse aufgefangen.

Die zweite Komponente, bestimmbar in den Werten von  $K_{QG1}$ ,  $K(MRC_1)$  und  $K(MRC_{21})$ , hat Werte im Intervall [8:30] Tage, mit wenigen Ausreißern auf beiden Seiten des Intervalls. Diese Komponente kann, der Interpretation von SCHWARZE et al. (1999) folgend, als die schnelle Grundwasser- oder als die Zwischenabflusskomponente gedeutet werden.

Die letzte Komponente (K<sub>QG2</sub>, K(MRC<sub>22</sub>), T<sub>korr</sub>( $P_{Gebirge}$ ) und T<sub>korr</sub>( $P_{Tal}$ )) mit Werten im Intervall [30:800] Tage (Ausreißer ausgeschlossen) ist die langsamste und kann als Grundwasserabfluss interpretiert werden. Die sehr große Spannweite deutet auf eine große Unsicherheit in der Bestimmung hin und macht eine direkte Anwendung der Ergebnisse fraglich. Die kleinsten T<sub>korr</sub>-Zeiten wurden für die steilsten Gebiete 4 und 5 berechnet, eine Bestätigung für die Plausibilität der Korrelogrammanalyse.

Diese Werte werden später in der Arbeit (Kap. 5.4) mit Modellierungsergebnissen verglichen, um so mehr über ihre Anwendbarkeit sagen zu können.

# 3.7 Ganglinienanalyse - Zusammenfassung und Ausblick

Die in diesem Kapitel vorgestellte Arbeit ist eine detaillierte Übersicht über die Ganglinienanalyseverfahren, ein oft angewandtes aber höchst umstrittenes Werkzeug zum Gewinn von Erkenntnissen über die hydrologischen Prozesse in einem Einzugsgebiet. Es gelang, ein Konzept für die Teilung des Abflusses in Direkt-, Zwischen- und Grundwasserabflusse zu entwickeln: die untere Grenze des BFI-Bereiches ( $BFI_{min}$ ) für den Grundwasserabfluss, die Breite des BFI-Bereiches ( $BFI_{max}$ - $BFI_{min}$ ) als Zwischenabfluss. Das Konzept konnte zwar nicht eindeutig validiert werden, bestimmte Nachweise konnten jedoch anhand der Regionalisierungsanalyse und auch durch die Anwendung anderer Ganglinienanalyseverfahren erbracht werden.

Diesem Konzept folgend, wurden die Ergebnisse der Ganglinienseparation in das Einzugsgebiet der Oberen Donau in zwei Karten zusammengefasst (Abbildung 3.24): Sie stellen die geschätzten prozentuellen Grundwasser- und Zwischenabflussanteile für jedes Teileinzugsgebiet dar. Der größere Anteil am Zwischenabfluss in den nicht verkarsteten Südalpen und im Oberpfälzer Wald konnte so quantifiziert werden, sowie die Aufteilung zwischen Grundwasser und Zwischenabfluss im Molassebecken. Die Tatsache, dass solche Karten nicht komplett validierbar sind, ermutigt nicht zu einer Anwendung für quantitative Aussagen. Sie sind jedoch zum Vergleich mit Modellierungsergebnissen geeignet (siehe Kap. 4.5).

Auf Grund der umfassenden vorliegenden Untersuchung ist es vertretbar zu behaupten, dass die Grenzen der Erkenntnisse, die allein durch Analyse der Abflussdaten zu erzielen sind, erreicht wurden. Es wird daher bezweifelt, dass die Weiterentwicklung von Verfahren, die mit den gleichen Daten arbeiten, zu grundsätzlich neuen Ergebnissen führen könnte. Man sollte neue Messdaten benutzen, z.B. Tracer, um neue Informationen zu analysieren und damit mehr Sicherheit zu gewinnen.



**Abbildung 3.24:** Verteilung der durch Ganglinienanalyse bestimmten Anteile des Grundwasser-  $(BFI_{min})$  und Zwischenabflusses  $(BFI_{max} - BFI_{min})$  im Einzugsgebiet der Oberen Donau. Die Werte sind in Prozent vom Gesamtabfluss angegeben.

# 4 Modellierung der Abflusskonzentration in einem Wasserhaushaltsmodellkomplex unter Berücksichtigung des Sickerraumes. Fallstudie Ammer

Das Ziel dieses Kapitels ist, die Modellierung der Abflusskonzentration in Wasserhaushaltsmodellen unter expliziter Berücksichtigung des Sickerraumes theoretisch zu lösen und für den Fall des Ammergebiets praktisch umzusetzen. Kapitel 4.1 stellt das Modellkonzept und die entwickelte Modellstruktur vor. Die Strategie der Parametrisierung des Modells und der Auswertung der Modellergebnisse wird ausführlich in Kapitel 4.2 beschrieben. Es wird geprüft, ob eine gute Modellgüte **und** sensitive, physikalisch-interpretierbare Parameterwerte der Abflusskonzentration für den Sickerraum und auch für die anderen Prozessräume auf Grund der existierenden Daten erzielt werden können. Deshalb konzentriert sich die Strategie auf die Bestimmbarkeit und Unsicherheit der Modellparameter und auf die Evaluierung der Modellstruktur.

Die praktische Bewertung des Modellkonzeptes und der Modellierungsstrategie wird im Gebiet der Ammer durchgeführt. Kapitel 4.3 stellt die Ergebnisse der Modellanwendung vor. Zwei Modellversionen werden verglichen, die durch unterschiedliche Grade der Konzeptionalisierung charakterisiert sind. Dies dient der Ermittlung der Vor- und Nachteile der Anwendung von möglichst physikalisch-basierten Ansätzen für die Modellierung der Abflusskonzentration. Der Aufbau eines klassischen Niederschlag-Abfluss-Modells für das Gebiet der Ammer (Kap. 4.4) dient dem Vergleich mit dem entwickelten Modell. Damit lässt sich bestimmen, welche der gewonnenen Erkenntnisse für eine spezifische Modellstruktur charakteristisch sind und welche verallgemeinert werden können.

Kapitel 4.5 fasst die wichtigsten Erkenntnisse und Aussagen zusammen. Die Modellierungsergebnisse werden mit den Resultaten der Ganglinienanalyseverfahren verglichen.

# 4.1 Entwicklung des Modellkonzeptes

### 4.1.1 Vorstellung des physikalischen Konzeptes

In der klassischen konzeptionellen hydrologischen Modellierung basiert die Struktur der Modelle auf den durch das Höhenmodell und durch die Lage der Flusspegel abgegrenzten Teileinzugsgebieten. Das Teileinzugsgebiet ist die fundamentale Einheit des Modells, auch wenn bestimmte Prozesse auf weiter unterteilten räumlichen Einheiten gelöst werden. Es gibt **einen** feiner aufgelösten **Input**, den gemessenen oder



Abbildung 4.1: Prinzipschema der hydrologischen Prozesse der Abflusskonzentration in einem alpinen Einzugsgebiet

modellierten Niederschlag und nur **einen Output**, den gemessenen Abfluss am Pegel. Das Modellierungsproblem ist nur lösbar, wenn der Input **und** der Output des Systems bekannt sind. Die zwei Datenreihen werden dann in einem inversen Modellierungskontext verwendet, um die Eigenschaften des Systems, die Modellparameter, zu bestimmen. Erst dann kann das Modell angewandt werden, um Szenarien zu rechnen, für die der Output nicht bekannt ist.

Diese Situation gilt, solange keine a priori Modellparameter vorliegen. Je mehr sich das Modell in seiner Prozessbehandlung auf physikalische Gesetze stützt, desto mehr können über Feldmessungen gewonnene Werte zumindest als Anhaltswerte für die Modellparameter benutzt werden (siehe auch Kapitel 2). Für den betrachteten Fall des Sickerraumes können keine a priori Werte benutzt werden, weil es keine Messwerte für die Struktur der prozessdominierenden Heterogenitäten gibt. Man ist also dazu gezwungen, das klassische Schema der inversen Modellierung zu benutzen, das im vorherigen Absatz skizziert wurde.

Abbildung 1.1 in Kapitel 1.2 (Seite 2) beschreibt den allgemeinen Fall für die hier verwendete Definition des Sickerraumes. Die Schwierigkeit ist, dass die Grundwasserströmung in den tiefen Aquiferen die auf der Basis der Topographie der Erdoberfläche gemachte Unterteilung in Teileinzugsgebiete nicht mehr respektiert. Die grenzüberschreitenden Flüsse in diesen Aquiferen können nicht mit ausreichender Genauigkeit quantifiziert werden, so dass das Modellierungsproblem nicht mehr lösbar ist, weil die Teileinzugsgebiete nicht mehr als geschlossene Systeme behandelt werden können. Deshalb wurden die Untersuchungen in dieser Arbeit auf die Fälle eingeschränkt, in denen die Annahme gemacht werden kann, dass die Abflüsse der Fließgewässer und der alluvialen Grundwasserleiter die einzigen hydrologisch signfikanten Zu- und Abströme der Gebiete sind.

In den alpinen Bereichen ist das Schema der Abbildung 1.1 nicht mehr gültig, weil dort die tiefen Grundwasserleiter entweder nicht vorhanden sind oder eine untergeordenete Rolle für den jährlichen Wasserhaushalt des Gebietes spielen (Abbildung 4.1). Trotz der sehr begrenzten Information über die hydrogelogische Rolle des tieferen Untergrundes der Alpen wird diese Annahme für den Kontext dieser Arbeit als berechtigt gesehen. Falls keine wichtigen Verkarstungen im Grundgebirge vorliegen, lassen sich damit die Teileinzugsgebiete wieder als hydrologisch unabhängige Einheiten behandeln. Wie bereits erwähnt, erfüllen die geologischen Formationen im Ammergebiet diese Voraussetzung (DOBEN 1976).

Die gleiche Annahme kann in Teilen des Alpenvorlandes gemacht werden, in denen die Durchlässigkeit der hydrogeologischen Einheiten, die nach dem Schema in Abbildung 1.1 die Rolle des tiefen Grundwasserleiters übernehmen, so gering ist, dass sie hydrologisch als nicht signifikant eingeschätzt werden können. Für den Fall des Ammergebietes bilden die gefalteten und ungefalteten Molasse-Formationen mit einer Durchlässigkeit, die mehrere Größenordnungen kleiner ist als bei den alluvialen Talaquiferen, eine solche Situation. Die mit Abstand wichtigste Rolle (gemessen am Wasserumsatz) in der Grundwasserströmung spielen für diese Fälle die alluvialen Ablagerungen der quartären Flusssysteme, die in dieser Arbeit als alluviale oder quartäre Aquifere bezeichnet werden.

### 4.1.2 Vorstellung der entwickelten Modellstruktur

Abbildung 4.2 zeigt die vorgeschlagene Modellstruktur, die eine technische Implementierung des Prinzipschemas in Abb. 4.1 ist. Das Bodenwasserhaushaltsmodell rechnet für jede Rasterzelle zwei Abflusskomponenten: den Oberflächenabfluss und die Perkolation. Der Oberflächenabfluss, die Summe der Überschreitung der Infiltrationskapazität und der Übersättigung der obersten Bodenschicht, wird anhand einer Modelleinheit (E1), die das Fließen über das Gelände repräsentiert, direkt zum Fluss geroutet. Die Perkolation aus den Bodenzellen, die direkt über aktiven Zellen des Flussaquifer-Grundwassermodells liegen, wird ohne Veränderung oder zeitliche Verzögerung als vertikale Grundwasserneubildung in das Grundwassermodell gespeist. Die aktiven Zellen des Grundwassermodells decken die Fläche des quartären Aquifers ab.

Die Perkolation aus den Bodenzellen, die in den Gebirgsregionen der Teileinzugsgebiete liegen, fließt in den für den Sickerraum vorgesehenen Modellteil, der aus zwei Modelleinheiten (E2 und E3) und einem Trennparameter (s) besteht. Die Perkolation wird zuerst über alle nicht-quartären Zellen eines Teileinzugsgebietes aggregiert und anhand s in zwei Teile separiert. Der erste Teil (E2), entspricht dem Zwischenabfluss, d.h. dem Exfiltrieren des Wassers aus dem Berghang und dem Fließen bis in das Oberflächengewässer. Der zweite Teil (E3) entspricht der vertikalen Sickerung durch das Gebirge und dem Exfiltrieren im Tal in den alluvialen Aquifer und wird als laterale Grundwasserneubildung in das Grundwassermodell gespeist.

Die wichtigsten Aspekte des Sickerraumes für die Hydrologie eines Gebietes werden damit in der Modellstruktur komprimiert. Zusammen mit der Modellierungsstrategie soll das erlauben, den Zwischenabfluss und die Grundwasserneubildung zu quantifizieren und damit genauer die Prozesse der Abflusskonzentration nachzubilden. Die schematische Beschreibung des Sickerraumes im Modell steht mit der Verfügbarkeit der Daten in direkter Verbindung. Falls determinstische Informationen über die Struktur und die Eigenschaften des Untergrundes flächendeckend vorhanden wären, könnte eine detailliertere Modellstruktur erstellt werden. Aber auch mit dem in dieser

### 4 Modellierung der Abflusskonzentration. Fallstudie Ammer



Abbildung 4.2: Entwickelte Modellstruktur für den Komplex Bodenraum-Sickerraum-Grundwasser-Oberflächengewässer. Die Pfeile zeigen die Fließrichtung der mit kursiven Buchstaben bezeichneten Flusskomponenten zwischen zwei Modulen. GWN - Grundwasserneubildung.

Arbeit entwickelten konzeptionellen Modell lassen sich die hydrologisch relevantesten Eigenschaften bestimmen, wie in diesem und nächsten Kapitel der Arbeit gezeigt wird.

Die laterale Grundwasserneubildung wird von der Zelle, in der sie berechnete wird, auf die aktive Zelle des Grundwassermodells, die in Fließrichtung am nächsten liegt, umverteilt. Für die Bestimmung einer Hauptfließrichtung für jede Zelle wurde die Definition von JENSON und DOMINGUE (1988) in der leicht veränderten Form des Programms TOPAZ (GARBRECHT und MARTZ 1995) angewandt.

Das Flussaquifer-Grundwassermodell bekommt als Input die räumlich-verteilte, vertikale und laterale Grundwasserneubildung und rechnet als Output die Exfiltration in die Flüsse, d.h. den Grundwasserabfluss. Aus der Summe der drei Komponenten Oberflächen-, Zwischen- und Grundwasserabfluss wird der Gesamtabfluss gebildet, der vom Flussmodell von Pegel zu Pegel geroutet wird.

Für das Grundwassermodell (Einheit E4) kommt das MODFLOW-Modell in der Version 2000 1.15.00 (HARBAUGH et al. 2000) zum Einsatz. Der MODFLOW-Code wurde komplett in die hier entwickelte Software integriert, was erhebliche Performanzvorteile gegenüber einer indirekten Kopplung hat. Für die anderen drei Ablaufeinheiten (E1, E2 und E3) wurde das konzeptionelle Modell einer linearen Speicherkaskade angewandt. Dank seiner Flexibilität und der besseren Beschreibung der Translations- und Retentionseffekte des Abflussbildungsprozesses ist dieses Modell anderen konzeptionellen Modellen, wie z.B. einem einfacheren Einzellinearspeicher, überlegen (BEVEN 2000). Die numerische Implementierung der Speicherkaskade folgt den Algorithmen, die in Kap. 2.1.2 beschrieben sind.

Für das Flussmodell (Einheit E5) wurde nicht der hydrodynamische Diffusions-

wellenansatz angewandt, der z.B. im Projekt GLOWA-Danube zum Einsatz kommt, sondern ein einfacherer konzeptioneller Ansatz gewählt. Die höhere Komplexität einer direkten Implementierung des hydrodynamischen Verfahrens in die hier entwickelte Software hätte den Rahmen dieser Arbeit gesprengt. Da sich das Fließgewässermodell nicht im Fokus der Arbeit befindet, wurde die Anwendung eines auf dem Konzept der linearen Speicherkaskade basierenden konzeptionellen Modells als ausreichend angesehen. PLATE et al. (1977) bewerten die Genauigkeit der Anwendung der linearen Speicherkaskade für die Modellierung des Ablaufes von Hochwasserwellen in Gerinnen als vergleichbar mit der des Diffusionswellenansatzes. Der einzige Nachteil ist, dass es keine Möglichkeit zur Berücksichtigung von Veränderungen im Fluss (z.B. Staustufenbau) gibt, was aber für die hier geplante Anwendung nicht von Bedeutung ist.

Für die Implementierung wurde ein FORTRAN-Programm für das Modellschema in Abbildung 4.2 entwickelt. Das Bodenwasserhaushaltsmodell PROMET wurde nicht direkt eingebaut, seine Ergebnisse bilden den Input des Programms. Die Software besteht aus den fünf Einheiten E1 bis E5 und aus den dazwischen vorhandenen Schnittstellen. Zusätzlich verwaltet das Programm die Struktur der Teileinzugsgebiete und das Flussnetz. Bei der Entwicklung wurde darauf geachtet, das Programm so flexibel und modular wie möglich zu halten, so dass Änderungen oder Erweiterungen der Modellstruktur problemlos möglich sind. Die Software beinhaltet auch viele Werkzeuge mit Algorithmen und Methoden, die für die Parametrisierung des Modells und für die Auswertung der Modellergebnisse notwendig sind. Diese Werkzeuge sowie andere Aspekte der Modellierung werden ausführlich in Kap. 4.2 beschrieben.

## 4.2 Entwicklung einer Modellierungsstrategie

Das Einzugsgebiet der Ammer wurde auf Grund der vorhandenen Flusspegel mittels der in Kapitel 3.3 erklärten Algorithmen in sieben Teileinzugsgebiete mit Flächen zwischen 50 und 300 km<sup>2</sup> geteilt. Die Abbildung 4.3 zeigt die Lage der Flusspegel (mit dem Namen des Pegels und dem Abflussmittelwert) und die Umrisse der darauf basierenden Teileinzugsgebiete sowie die Lage der Grundwasserpegel, das Oberflächengewässernetz und die Umrisse des quartären Aquifers. Das entwickelte Modell betrachtet die beiden Seen (Staffelsee und Riegsee) nicht explizit, dafür wurden in den betroffenen Teileinzugsgebieten die Obergrenzen der Oberflächenabfluss-Parameter in der Kalibrierung erhöht (siehe Kap. 4.2.3). Die Maulenbachquelle, die im jährlichen Mittel eine Schüttung von 1 m<sup>3</sup>/s hat und die in das benachbarte Loisachtal fließt, wurde im Modell mit berücksichtigt. Ebenso wurden die Wasserentnahmen berücksichtigt, die aber mit insgesamt 0.18 m<sup>3</sup>/s nur eine geringe Rolle im Wasserhaushalt spielen.

Die nächsten Absätze beschreiben die Einzelheiten der Modellierungsstrategie: die Einbindung des Bodenwasserhaushaltsmodells (4.2.1) und des Grundwasserströmungsmodells (4.2.2), die Definition des zulässigen Parameterraumes (4.2.3) und die Auswahl der Zielfunktionen (4.2.4), die Art und Weise in der die Mehrziel-Optimierungs- (4.2.5), die GLUE- (4.2.6) und die Dimensionalitätsanalyse (4.2.7) angewandt wurden.

Um die Vor- und Nachteile einer möglichst prozess-basierten Modellierung zu er-



Abbildung 4.3: Das Einzugsgebiet der Ammer.

mitteln, wurden zwei Modellkonfigurationen unabhängig voneinander behandelt. In der ersten Modellkonfiguration (**Fall 1**) simuliert eine Speicherkaskade die Grundwasserströmung (Einheit E4). Erst in der zweiten Modellkonfiguration (**Fall 2**) kommt das MODFLOW-Modell zum Einsatz. Alle Verfahren für die Bewertung der Güte und der Unsicherheit des Modells wurden auf beide Fälle angewandt, um den Vergleich beider Strategien zu ermöglichen.

### 4.2.1 Einbindung des Bodenwasserhaushaltsmodells

Die Ergebnisse des Bodenwasserhaushaltsmodells PROMET, die das Inputsignal bilden, wurden von Dr. Ralf Ludwig an der Ludwig Maximilian Universität München berechnet und dem Autor dieser Arbeit zur Verfügung gestellt. Sie decken die Dekade von 01. November 1990 - 31. Oktober 2000 ab. Die Überschneidung mit dem Zeitraum, für den die gemessenen Abflussdaten und Grundwasserstände verfügbar sind, liefert den Zeitraum der Modellierung: 01. November 1990 - 01. Januar 2000. Die 3349 Tage, etwas mehr als neun Jahre, sind ausreichend, da sie sowohl trockene (Jahr 1997, jährlicher Mittelwert  $MQ_{97} = 10.92 \text{ m}^3/\text{s} = 70.9\% MQ^1$ ) als auch feuchte Bedingungen (Jahr 1998,  $MQ_{98} = 21.66 \text{ m}^3/\text{s} = 140.6\% MQ$ ) einschließen. Die letzten sechs Jahre dienten der Kalibrierung, die ersten drei der Validierung.

Die verfügbaren Ergebnisse des Bodenwasserhaushaltsmodells haben eine räumliche Auflösung von 1 km  $\times$  1 km. Das Bodenwasserhaushaltsmodell hat einen Rechenzeitschritt von 1 Stunde, die Ergebnisse, die in dieser Arbeit verwendet wurde, sind gemittelte Tageswerte. Sowohl die räumliche als auch die zeitliche Auflösung

 $<sup>^1</sup> MQ$ - langjähriger Mittelwert, gemessen am Pegel Weilheim

könnten sich im steilen Ammergebiet als zu grob erweisen; sie sind allerdings übliche Werte für die mesoskalige Modellierung.

Ein Problem der verwendeten Ergebnisse der PROMET-Simulationen ist, dass sie auf unkorrigierten Niederschlagdaten basieren. Bei der Messung der Niederschlagsmengen treten Fehler auf, die eine systematische Unterschätzung der Werte zur Folge haben. Die Ursachen der Fehler werden ausführlich bei DVWK (1991) und LAPIN (1990) beschrieben. Wegen der Komplexität des Problems gibt es keine geeignete Korrektur der gemessenen Daten, so dass sie oft direkt eingesetzt werden. Eine andere Lösung ist, konstante Korrekturfaktoren zu benutzen, die auf Grund zahlreicher Feld- und Laborversuche bestimmt worden sind. Grundsätzlich sind diese Faktoren für die Wintermonate (Schnee) größer als für den Rest des Jahres. DVWK (1997) empfiehlt als allgemeine Regel für Deutschland einen Korrekturfaktor von 1.1 im Sommer und von 1.2 im Winter. RICHTER (1995) gibt präzisere monatliche Werte für Stationen "mäßig geschützter Lage" der Region Alpenvorland und Alpen und ermittelt einen mittleren jährlichen Korrekturfaktor von 1.08.

Der Vergleich zwischen den PROMET-Ergebnissen und den gemessenen Abflussdaten für den Modellierungszeitraum zeigt, dass die ersten mit 1.11 multipliziert werden müssen, um die Wasserbilanz auszugleichen. Der Wert ist den erwähnten Faktoren der Niederschlagskorrektur sehr nah, es scheint also plausibel, dass der Unterschied überwiegend durch die nicht angewandte Korrektur zu erklären ist. Um die Güte des hier getesteten Modellierungsansatzes dadurch nicht negativ zu beeinflussen, wurden die PROMET-Ergebnisse vor ihrem Einsatz mit dem oben genannten Faktor korrigiert.

In Abb. 4.4 sind die Zeitreihen der gemessenen Abflussdaten und der aggregierten PROMET-Ergebnisse (Perkolation+Oberflächenabfluss) für vier Pegel für das hydrologische Jahr 1997 dargestellt (siehe Abb. 4.3 für die Lage der Pegel). Der Vergleich der beiden Zeitreihen zeigt eine relativ gute bis sehr gute Übereinstimmung für die Pegel Peissenberg und Weilheim, eine mäßige Übereinstimmung für den Pegel Unternogg und eine sehr schlechte Übereinstimmung für den Pegel Obernach. Bei dem letzten Pegel hat das Bodenwasserhaushaltsmodell das Signal zu stark gedämpft, so dass sowohl die Spitzenabflüsse als auch die Dynamik der berechneten Ganglinien deutlich die Messdaten verfehlt haben. Im Fall Unternogg, repräsentativ für den alpinen Bereich des Einzugsgebietes, wurde die Dynamik relativ gut berechnet, die Höchstwerte sind aber unterschätzt und die berechneten Rückgänge zeigen auch eine etwas zu hohe Dämpfung. Die flussabwärts liegenden Pegel Weilheim und Peissenberg haben eine bessere Anpassung der Höchstwerte. Die ebenfalls zu stark gedämpften Rückgänge sind das Ergebnis der Fehler in den flussaufwärts liegenden Teileinzugsgebieten.

Das PROMET-Modell wurde in der vorgestellten Modellstruktur nicht direkt gekoppelt, so dass seine Ergebnisse auch nicht geändert werden konnten, obwohl sie teilweise fehlerhaft sind. Das Fehlen der Möglichkeit, sämtliche Teile des Gesamtmodells gleichzeitig zu kalibrieren, ist, aus der Sicht der Modellgüte, ein klarer Nachteil des hier angewandten Modellierungsansatzes, in dem möglichst physikalisch-basierte Modelle für einzelne Teile des Wasserkreislaufes miteinander verbunden werden. Es gibt dazu zwei Bemerkungen: Erstens ist ein solcher Ansatz trotzdem sehr hilfreich, um die Grenzen der nicht kalibrierten physikalisch-basierten Modelle aufzuzeigen. Zweitens werden in Zukunft mit dem weiteren Anstieg der verfügbaren CPU-Leistung



Abbildung 4.4: Vergleich zwischen den PROMET-Ergebnissen und den gemessenen Abflussdaten im Einzugsgebiet der Ammer für vier Pegel (die Lage der Pegel ist im Abb.4.3 dargestellt).

auch solche komplizierten Modellstrukturen als Ganzes kalibrierbar sein.

Um zu vermeiden, dass sich die Fehler flussaufwärts liegender Teileinzugsgebiete durch das Routing des modellierten Abflusses in das Flussnetz fortpflanzen und die Kalibrierung der anderen Teileinzugsgebiete beeinflussen, wurde jedes Teileinzugsgebiet unabhängig kalibriert, indem als Zufluss in das Teileinzugsgebiet nicht die berechneten Ergebnisse für die flussaufwärts liegenden Gebiete, sondern die an dem Eingangspegel gemessenen Abflüsse benutzt wurden.

### 4.2.2 Das MODFLOW-Grundwassermodell für das Einzugsgebiet der Ammer

Das Grundwassermodell für das Einzugsgebiet der Ammer (Einheit E4 in Abb. 4.2) modelliert das Grundwasserströmungsfeld im quartären Flussaquifer, dessen Umrisse in Abb. 4.3 eingetragen sind. Das MODFLOW-Modell rechnet wie das Bodenwasserhaushaltsmodell auf einem Raster von 1 km  $\times$  1 km. Die Diskretisierung des Aquifers und die Parameterisierung des Modells mit den Werten der hydraulischen Durchlässigkeit und der Speicherkoeffizienten für jede Zelle wurden von Dipl.-Geol. Jens Wolf am Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart bearbeitet (WOLF 2006) und dem Autor dieser Arbeit zur Verfügung gestellt. Die in großen Teilen des Gebietes relativ zur Zellgröße geringe Aquiferbreite kombiniert mit den hohen Gradienten des Reliefs erforderten, spezielle Upscaling-Verfahren zu entwickeln und anzuwenden, um eine Modellgeometrie zu generieren, die das natürliche Strömmungsfeld akkurat abbildet. Künstlichen Engstellen (bottlenecks), hinter denen sich das Grundwasser aufstauen würde, wurden dabei vermieden, indem die horizontale und vertikale Ausdehnung des Aquifers an das DGM und an das Flussnetz angepasst wurde (WOLF 2006).

Basierend auf mehreren hydrogeologischen Untersuchungen bildete WOLF (2006) Parametersätze für das Grundwassermodell, die er anschließend durch Anpassung an die Grundwasserspiegel-Messwerte veränderte, um so die Modellergebnisse zu verbessern. In der verwendeten Version des Modells war der Mittelwert für die hydraulische Durchlässigkeit  $7.3 \cdot 10^{-3}$ m/s und für den Speicherkoeffizient 0.07. Um mit dem Rest des angewandten Modellierungsansatzes konsistent zu bleiben, wurde das MODFLOW-Modell genauso wie das PROMET-Modell nicht zusammen mit den Parametern des Sickerraumes kalibriert.

## 4.2.3 Definition des zulässigen Parameterraumes

Eine wichtige Voraussetzung für die automatische inverse Modellierung ist die Definition des zulässigen Raumes,  $\mathbb{P}^n \subset \mathbb{R}^n$  (*n* ist die Anzahl der Parameter), d.h. des Raumes, in dem der Kalibrierungsalgorithmus nach Werten für die Parameter suchen darf.  $\mathbb{P}^n$  muss zuerst durch Bedingungen eingeschränkt werden, die den physikalischen Sinn des Modells gewährleisten, sonst könnten völlig unrealistische Werte als mathematisch optimal resultieren. Um dies zu verhindern, muss a priori die Information, was für einen Parameter realistisch oder unrealistisch ist, explizit definiert werden (z.B. dass ein Parameter keine negativen Werte annehmen kann). Zusätzlich werden Plausibilitätsgrenzen gesetzt, die die vorhandene Information und das Prozessverständnis reflektieren. Ihre Aufgabe ist, "plausible Startwerte zu liefern und die Unsicherheit der Parameterintervalle zu verringern" (KOREN et al. 2003).

In der Modellstruktur aus Abb. 4.2 müssen die Parameter der konzeptionellen Einheiten (E1, E2, E3, E4 für Fall 1, E5) kalibriert werden. Dafür werden zulässige Intervalle benötigt. Weil eine lineare Speicherkaskade zwei voneinander nicht unabhängige Parameter n und k hat, wurde die Definition der Intervalle etwas differenzierter festgelegt. Zuerst wurden Grenzen, die den physikalischen Sinn und die numerische Stabilität der Simulationen gewährleisten sollen, gesetzt:  $n_i \in (0, 50), k_i \in (0, 1000)$ [d].

Die Plausibilitätsgrenzen wurden über das Produkt  $n_i \cdot k_i$  [d] festgesetzt, das die mittlere Translationszeit ausdrückt. Ihre Bestimmung erfolgte anhand der Ergebnisse der Ganglinienanalyseverfahren (zusammengefasst in Tab. 3.6 Seite 79). Für alle Einheiten wurde die untere Grenze des Intervalls auf 0.01 gesetzt. Für die obere Grenze wurden für alle Teileinzugsgebiete folgende Werte angenommen: für E1 (Oberflächenabfluss) 2 Tage, für E2 (Zwischenabfluss) 100 Tage, für E3 (vertikaler Ablauf im Sickerraum) und für E4 (Ablauf in dem Grundwasserraum) 250 Tage, für E5 (Ablauf im Gerinne) 1 Tag. Für das Einzugsgebiet 6 (Pegel Oberhausen, siehe Abb. 4.3) wurde für E1 und E5 die obere Grenze auf 10 Tage korrigiert, um den Einfluss der Seen mit zu berücksichtigen.

Für den ebenfalls zu kalibrierenden Parameter s (die Trennung zwischen Zwischenabfluss und vertikaler Sickerung) wurde das gesamte sinnvolle Intervall [0,1] als Kalibrierungsintervall zugelassen.

Ein wichtiges Ziel des hier vorgestellten Modellierungsvorhabens ist, die Möglichkeit zu untersuchen, physikalisch-interpretierbare effektive Eigenschaften des Sickerraums mittels inverser Modellierung zu bestimmen. Eine ernsthafte Analyse ist nur dann möglich, wenn die Antwort durch die Lösung des Problems erbracht wird und nicht schon in den Eingangsdaten erzwungen wird. Deshalb wurden die vorgegebenen Intervallgrenzen insbesondere für die Sickerraumparameter  $n_2 \cdot k_2$ ,  $n_3 \cdot k_3$  und *s* sehr breit angelegt und zwischen den Teileinzugsgebieten nicht differenziert.

### 4.2.4 Auswahl der Zielfunktionen für die Bewertung der Modellgüte

Für die Bewertung und Verbesserung der Modellgüte werden mathematische Zielfunktionen gebraucht, die die Güte relativ zu den Messdaten quantifizieren. Zwei gemessene Variablen (der Gesamtabfluss und der Grundwasserstand für den Fall 2) sind verfügbar, deshalb werden dementsprechend auch zwei Gruppen von Zielfunktionen entwickelt und während der inversen Modellierung eingesetzt, um automatisch zwischen guten und schlechten Parametersätzen zu unterscheiden.

Für den Abfluss müssen die Zielfunktionen die Anpassung der berechneten an die gemessenen Werte in allen Bereichen der Abflussganglinie (Niedrigwasser- und Hochwasserabflüsse, Anstiegs- und Rezessionsperiode) quantifizieren. Jede Zielfunktion sollte einen anderen Aspekt im Modell- und Gebietsverhalten ausdrücken (BOYLE et al. 2003). Basierend auf diesen Erkenntnissen wurden mehrere in der hydrologischen Modellierung übliche Funktionen getestet. Deutlich unterschiedliche Optima wurden als Beweis dafür angenommen, dass die Zielfunktionen unterschiedliche Aspekte ausdrücken (siehe Abb. 4.5). Die finale Auswahl ist der von FREER et al. (2003) ähnlich. Fünf Zielfunktionen  $O_i$ , i = [1, 5] wurden für den Abfluss ausgesucht:

 $O_1$ : die Nash-Sutcliffe Effizienz NS (NASH und SUTCLIFFE 1970) mit der Formel

$$NS = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n_t} (Q_{mes}(t_i) - Q_{sim}(t_i))^2}{\sum_{i=0}^{n_t} (Q_{mes}(t_i) - \overline{Q}_{mes})^2}, \text{ wo } \overline{Q}_{mes} = \sum_{i=0}^{n_t} Q_{mes}(t_i)$$
(4.1)

für den Vergleich zweier Zeitreihen über das Intervall  $[t_0, t_{n_t}]$ .



**Abbildung 4.5:** Auswahl der Zielfunktionen für eine Mehrziel-Analyse. Die schwarzen Punkte bezeichnen die Einziel-Optima, die grauen Punkte den Rest der Lösung (die Pareto Front). RMSE ist die Wurzel der Quadratfehlersumme. NS und  $NS_{tr}$  werden im Text erklärt.

- $O_2$ : die Nash-Sutcliffe Effizienz  $NS_{dr}$  berechnet für den ansteigenden Teil der Zeitreihen (in der englischsprachigen Literatur *driven flow*).
- $O_3$ : die Nash-Sutcliffe Effizienz  $NS_{ndr}$  berechnet für den fallenden Teil der Zeitreihen (*non driven flow*).
- $O_4$ : die Differenz zwischen Eins und der Summe der absoluten Fehler normiert mit der Summe der gemessenen Abflusswerte:

$$SAE = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n_t} |Q_{mes}(t_i) - Q_{sim}(t_i)|}{\sum_{i=0}^{n_t} (Q_{mes}(t_i))}.$$
(4.2)

 $O_5$ : die Nash-Sutcliffe Effizienz  $NS_{tr}$  berechnet nach der Anwendung einer Box-Cox-Transformation auf die beiden Zeitreihen. Die Transformation (Box und Cox 1964) ändert die Daten so, dass sie näherungsweise normalverteilt sind, und korrigiert die Tendenz, den höheren Abflusswerten mehr Gewicht zu geben:  $Q_{tr} = [(Q+1)^{\lambda} - 1]/\lambda$ , mit  $\lambda = 0.4$ .

Bei der Berechnung der Grundwasserstände auf einem 1 km × 1 km Raster für ein Gebiet mit einer steilen Topographie ist eine perfekte Anpassung an gemessene Werte, die für einen Bereich von wenigen m<sup>2</sup> um den Beobachtungsbrunnen gültig sind, nicht aussagekräftig. Deshalb wurde als Zielfunktion  $O_6$  für den Fall 2 der Pearsonsche-Korrelationswert  $K_{Gr}$ , gemittelt über alle vorhandenen Messpegel  $j, j = [1, n_{gr}]$  berechnet:

 $O_6$ :

$$K_{Gr} = \frac{1}{n_{gr}} \sum_{j=1}^{n_{gr}} \frac{\sum_{i=0}^{n_t} \left( H_{sim}^j(t_i) - \overline{H}_{sim}^j \right) \cdot \left( H_{mes}^j(t_i) - \overline{H}_{mes}^j \right)}{\sqrt{\sum_{i=0}^{n_t} \left( H_{sim}^j(t_i) - \overline{H}_{sim}^j \right)^2 \cdot \sum_{i=0}^{n_t} \left( H_{mes}^j(t_i) - \overline{H}_{mes}^j \right)^2}}$$
(4.3)

Es gibt zu wenige und zu schlecht verteilte Grundwassermesspegel, um einen  $K_{Gr}$ -Wert für jedes Teileinzugsgebiet zu berechnen (siehe Abb. 4.3). Deshalb wurde nur ein einziger Wert für das gesamte Gebiet berechnet, und für die Kalibrierung aller Teileinzugsgebiete benutzt.

Die ersten fünf Zielfunktionen nehmen Werte im Intervall  $(-\infty, 1]$ , die letzte Funktion im Intervall [-1, 1] an. Für alle sechs ist der Optimalwert 1.0, der eine perfekte Anpassung darstellt. Um ein stabiles Verhalten des Modells auf allen Zeitskalen zu sichern, wurden die sechs Zielfunktionen nicht nur auf Tagesbasis, sondern auch für die über 2, 15 und 30 Tage gemittelten Zeitreihen berechnet. Anschließend wurden die vier Gütewerte gemittelt, dabei hatte jede Zeitskala ein gleich großes Gewicht.

# 4.2.5 Anwendung der Mehrziel-Optimierung für die inverse Modellierung des hydrologischen Modellkomplexes

Die sechs im Kap. 4.2.4 definierten Zielfunktionen wurden für eine Mehrziel-Optimierung der Modellparameter für das Einzugsgebiet der Ammer benutzt. Das Downhill-Simplex - Simulated-Annealing-Verfahren (Kap. 2.1.3) optimiert nur eine Funktion, es kann aber kombiniert mit einem Wichtungssystem für eine Mehrziel-Optimierung eingesetzt werden. Für *n*-Zielfunktionen wurden alle Wichtungskombinationen  $w_i, i = [1, n]$  gebildet, mit den Nebenbedingungen  $\sum_{i=1}^{6} w_i = 1$  und  $w_i \in [0; a; 1]$ ,  $a \in (0, 0.5]$  (für  $a = 0.25, w_i \in \{0, 0.25, 0.50, 0.75, 1\}$ ). Für jede Kombination wurde ein einzelner Optimierungsschritt mit der Zielfunktion  $O^{pareto} = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot O_i$ ausgeführt. Die Summe der Einzelschritt-Lösungen bildet die Lösung des Mehrziel-Optimierungsproblems, die Pareto-Sätze.

Algorithmen, die direkt ein Mehrziel-Optimierungsproblem lösen (z.B. die Methode MOCOM-UA, YAPO et al. 1997), haben den Vorteil, dass sie rechnerisch weniger aufwendig sind. Sie haben aber den Nachteil, dass der Aufbau von perfekten Pareto-Fronten algorithmisch erzwungen wird und nicht das Ergebnis mehrerer unabhängiger Schritte ist, wie bei dem hier verwendeten Downhill-Simplex - Simulated-Annealing-Verfahren.

Für Fall 1, in dem das Grundwassermodul durch eine lineare Speicherkaskade modelliert wird, ist n = 5, weil die Grundwasserstände nicht berechnet werden. Für a = 0.125 resultieren 495 mögliche Kombinationen. Die einzelnen Teileinzugsgebiete werden unabhängig voneinander kalibriert.

Für Fall 2, in dem das Grundwassermodul durch das MODFLOW-Modell modelliert wird, ist n = 6 und a = 0.25. Der Wert von a ist größer als im Fall 1, um die Zahl der Simulationen, die jetzt wegen MODFLOW deutlich mehr CPU-Zeit brauchen, zu verringern. Zusätzlich wurde für die Wichtung der Funktion  $K_{Gr}$  die Bedingung  $w_6 \leq 0.5$  gestellt, um sicherzustellen, dass die Anpassung der Abflusswerte immer mit berücksichtigt wird. Es resultieren 120 mögliche Kombinationen. Für beide Fälle ist die Zahl der Kombinationen innerhalb [100, 500], wie GUPTA et al. (2003) vorschlägt.

### 4.2.6 Anwendung der GLUE-Analyse

Für die Anwendung der GLUE-Analyse mussten zwei Aspekte geklärt werden: das Verfahren für die Generierung einer möglichst repräsentativen Auswahl von Punkten im Parameterraum und die Likelihood-Maße zum Unterscheiden zwischen behavioural und non-behavioural Punkten.

Hydrologische Modelle haben in der Regel ein ausgeprägtes nicht-lineares Verhalten gegenüber Parameteränderungen. Eine repräsentative Stichprobe mit diesem Verhalten zu generieren, ist besonders für hochdimensionale Parameterräume ein Problem, das an die Grenzen der verfügbaren Rechenleistung stößt. Für ein Modell mit zehn Parametern bräuchte man bereits 10<sup>10</sup> Modellauswertungen, um den gesamten Parameterraum abzudecken, wenn für jeden Parameter nur zehn Werte zugelassen werden. Zahlreiche Methoden wurden dafür entwickelt, verstärkt Teile des Raumes zu untersuchen, die zu einer höheren Likelihood führen (BEVEN 2000): dichte-abhängiges Sampling wie Monte-Carlo-Markow-Ketten-Verfahren für relativ einfache Verhaltensmuster (e.g. KUCZERA und PARENT 1998), Latin-Hypercube-Sampling für Fälle, bei denen a priori Information vorhanden ist, sowie auf Regressionsbäumen basierte Techniken für sehr komplizierte Verhaltensmuster.

FREER et al. (2003) argumentieren aber, dass die meisten Modelle eine obere Grenze der Modellgüte aufweisen und dass Parametersätze, die an diese obere Grenze herankommen, sehr breit gestreut sind. Deswegen ist es ausreichend, eine "angemessene Strichprobe" dieser Streuung zu generieren, anstatt die Sampling-Methode zu verbessern, was letztendlich die Entwicklung eines neuen Optimierungsalgorithmus als Ergebnis hätte. Die Generierung einer großen Zahl von gleichmäßig verteilten Parametersätzen, auch Monte-Carlo-direkt-Sampling genannt, ist das am häufigsten verwendete Verfahren, das auch hier benutzt wurde. Bedingt durch die CPU-Leistung wurden  $10^6$  Parametersätze im zulässigen Parameterraum generiert.

Um die Vergleichbarkeit der GLUE-Analyse mit der Mehrziel-Optimierung zu gewährleisten, wurden als Likelihood-Maße die gleichen Gütekriterien,  $O_i$ , i = [1, 6] (Kap. 4.2.4), verwendet. Die Kenntnis der sechs Einziel-Optima  $O_i^{best}$  begrenzt die Subjektivität der Auswahl der Grenzwerte (*thresholds*) zur Unterscheidung zwischen behavioural und non-behavioural Parametersätzen. Eine subjektiv bestimmte Variable d gibt an, wie stark die Güte einer Lösung vom Optimum abweichen darf, um die Lösung als akzeptabel zu klassifizieren. Ein behavioural Parametersatz muss zu Werten der Zielfunktionen führen, die größer als  $O_i^{best} - d$  sind, sowohl für den Kalibrierungs- als auch für den Validierungszeitraum. Ein Wert d = 0.1 wurde angenommen; für einige Simulationen, bei denen sehr wenige Lösungen im Intervall gefunden wurden, wurde das Intervall zu d = 0.2 verlängert.

Durch diese Strategie wird die Bedeutung der Originalversion der GLUE-Analyse leicht verändert. Die behavioural Parametersätze charakterisieren nicht mehr die Modelle, die akzeptable Ergebnisse liefern, sondern die Modelle, die zu fast optimalen Ergebnissen führen. Wie gut das mathematische Optimum ist, muss separat entschieden werden.

### 4.2.7 Anwendung der Analyse der Dimensionalität des Modells

Drei Gruppen von Parametersätzen wurden mit der Dimensionalitätsanalyse untersucht: die Pareto-Gruppe mit den von der Mehrziel-Optimierung gelieferten Parameterwerten, die GLUE-Gruppe der von der GLUE-Analyse bestimmten behavioural Parametersätzen und eine Gruppe von Parametersätzen, die nach der von GAN und BIFTU (2003) beschriebenen Methode berechnet wurden (die GAN-Gruppe). Für die Berechnung der GAN-Gruppe wurde jeder gemessene Abflusswert durch einen sehr kleinen, zufälligen Term verändert. Anschließend wurde das Modell anhand einer einfachen Optimierung kalibriert. Die Summe der Lösungen von 100 solchen Modellabläufen bildet die zu analysierende Gruppe der Parametersätze.

Die Aufgabe der Dimensionalitätsanalyse ist es, Interaktionen zwischen den Modellparametern zu untersuchen und damit eine kritische Bewertung der Modellstruktur durchzuführen. Für diesen Zweck sagen die drei Gruppen von Parametersätzen nicht das Gleiche aus, sondern sie ergänzen sich: Die GAN-Gruppe ist für die Parameteränderungen im kleinen Raum um ein bestimmtes Optimum repräsentativ. Die Pareto-Gruppe drückt die Änderungen zwischen einer Stichprobe von vielen Optima aus. Die GLUE-Gruppe ist die allgemeinste, da die Sätze, die zu ihr gehören, keine Optima sondern "nur" gute Modellergebnisse liefern müssen.

Die lineare Hauptkomponentenanalyse (Kap. 2.4.3) und die fraktalen Dimensionen kamen für die Auswertung der Dimensionalität der drei Sätze zum Einsatz.

Die Hauptkomponentenanalyse kann über die Berechnung der Kovarianz- oder Korrelationsmatrix durchgeführt werden; hier wurde die zweite Variante angewandt. Die Korrelation ist die durch die Standardabweichung normalisierte Kovarianz und ist vom absoluten Wert der Parameter unabhängig. Bei der Kovarianzmatrix wird die Variabilität durch die großen Zahlen dominiert, auch wenn kleinere Zahlen, relativ gesehen, eine größere Variabilität haben. Bei der Implementierung der Hauptkomponentenanalyse wurde zuerst die symmetrische Korrelationsmatrix in eine tridiagonale Form gebracht (Householder-Tranformationsverfahren) und dann der implizite QL-Algorithmus für die effektive Berechnung der Eigenvektoren und der Eigenwerte verwendet (PRESS et al. 1991 S. 462).

Wenn man annimmt, dass die drei Gruppen von Parametersätzen verschiedene Approximationen der Modellantwort im Parameterraum (*response surface*) sind (FREER et al. 2003), ist es berechtigt, Methoden aus der Theorie der Fraktale einzusetzen. Sie bieten "einen mathematischen Rahmen für die Behandlung irregulärer vorgeblich komplizierter Formen, die gleichartige Muster oder geometrische Charakteristika über mehrere Skalen aufweisen" (RODRÍGUEZ-ITURBE und RINALDO 1997), an. Die komplizierte Struktur, die die ausgewählten Parametersätze im Parameterraum bilden, wird zu einer intrinsischen Dimension  $\mathcal{D}$  des Modells komprimiert. Die intrinsische Dimension, hier eine fraktale Dimension, soll die kleinste Anzahl von unabhängigen Variablen, die für die Beschreibung dieser Struktur notwendig ist, ausdrücken.

Zwei leicht unterschiedliche Definitionen für die fraktale Dimension der Gruppen von Parametersätzen wurden angewandt:

• die **Box-Counting**-Dimension  $\mathcal{D}_1 = \frac{\log(N)}{\log(1/r)}$ . Der zulässige Parameterraum  $\mathbb{P}^n$ wird in immer kleiner werdenden Kästen mit der Kantenlänge r geteilt, bis jeder der N Punkte in der Gruppe der Parametersätze allein in einem eigenen Kasten liegt. Die Berechnung von  $\mathcal{D}_1$  ist zwar konzeptionell sehr einfach, sie stellt aber erhebliche Anforderung an die CPU-Leistung. Für n = 10 bekommt man z.B. bei der Teilung jeder Seite des  $\mathbb{P}^{10}$  in 16 Intervalle  $16^{10} \approx 10^{12}$  Kästen. Sogar auf sehr schnellen Rechnern kann man sehr bald nicht mehr die Anzahl der Punkte zählen, die sich in jedem Kasten befinden. Ein Algorithmus wurde entwickelt, um das Problem zu lösen: Die Koordinaten der Punkte werden miteinander verglichen und so indirekt die Anzahl der notwendigen Kästen errechnet. • die Korrelation-Dimension  $\mathcal{D}_2 = \frac{\log(N)}{\log(1/r)}$ , r ist hier nicht mehr die Kantenlänge eines Kastens, sondern die größte Länge, für die es keine zwei Punkte in der Gruppe gibt, die von einem Abstand kleiner als r getrennt werden.

Zusammen mit der Hauptkomponentenanalyse werden die fraktale Dimensionen benutzt, um die Modellstruktur zu bewerten.

Die Ergebnisse der Anwendung der Hauptkomponentenanalyse und der fraktalen Dimensionen werden in Kap. 4.3.3 zusammen mit den Schussfolgerungen über die Interaktionen in der Modellstruktur aber auch über die Tauglichkeit der Methodik, die in dieser Form nach dem Wissen des Autors hier erstmals verwendet wurde, vorgestellt.

# 4.3 Vorstellung und Diskussion der Ergebnisse der Modellierungsanalyse im Einzugsgebiet der Ammer

Die Modellierungsergebnisse für die zwei vorgestellten Modellversionen (Fall 1 lineare Speicherkaskade als Grundwassermodul; Fall 2 - MODFLOW-Modell als Grundwassermodul) werden hier vorgestellt und diskutiert. Die Aufgabe dieses Kapitels ist, das entwickelte Modell der Abflusskonzentration, das den Sickerraum explizit abbildet, in allen seinen Eigenschaften zu beschreiben und kritisch zu bewerten. Die vorgestellten Ergebnisse bilden auch die Argumente für die Antwort auf die Frage, ob physikalisch interpretierbare Parameterwerte für den Sickerraum mittels inverser Modellierung gewonnen werden können.

Die Beschreibung wird in drei Teile gegliedert: Analyse der Güte der Modellergebnisse (Kap. 4.3.1), Analyse der durch inverse Modellierung bestimmten Parameterwerte (Kap. 4.3.2), Analyse der Modellstruktur anhand einer Dimensionalitätsanalyse (Kap. 4.3.3). In jedem der drei Unterkapitel werden separat die Ergebnisse der beiden Modellversionen präsentiert. Anschließend werden die Ergebnisse miteinander verglichen und die wichtigsten Erkenntnisse zusammengefasst.

#### 4.3.1 Analyse der Güte der Modellergebnisse

### Fall 1: lineare Speicherkaskade als Grundwassermodul

### Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse

Für die Bewertung des angewandten Mehrziel-Optimierungsalgorithmus stellt Abbildung 4.6 beispielhaft die Pareto-Lösung im Kriterienraum für das Teileinzugsgebiet (Tezg) 2 (Pegel Weilheim) dar: Die Beziehungen zwischen den Werten der Zielfunktionen für die Punkte der Pareto-Sätze. Die Werte wurden für die Kalibrierungsperiode bestimmt und über die vier berechneten Zeitskalen (1, 2, 15, 30 d) gemittelt. Für alle zehn Paare von Zielfunktionen sind deutliche Pareto-Fronten feststellbar; die Fronten sind auf den Punkt (1.0;1.0) gerichtet und von den Einziel-Optima abgegrenzt, was den Erfolg den Anwendung bestätigt (siehe Kap. 2.4.2 Seite 30).

Tabelle 4.1 fasst die Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse zusammen: die optimierten Werte der Zielfunktionen für die sieben Teileinzugsgebiete gemittelt über die vier verwendeten Zeitskalen für die Kalibrierungs- und Validierungsperiode. In



Abbildung 4.6: Pareto-Lösung im Kriterienraum für Fall 1 (lineare Speicherkaskade für das Grundwassermodul) für das Teileinzugsgebiet 2 (Pegel Weilheim). Die schwarzen Punkte bezeichnen die Einziel-Optima, die grauen Punkte den Rest der Lösung (die Pareto-Front). Die perfekte Anpassung entspricht bei allen Zielfunktionen dem Wert 1.0.

			ŀ	Kalibrierun	g		Validierung					
Pegel	Tezg	NS	NS <sub>dr</sub>	NS <sub>ndr</sub>	SAE	NS <sub>tr</sub>	NS	NS <sub>dr</sub>	NS <sub>ndr</sub>	SAE	NS <sub>tr</sub>	
Fischen	1	0.95	0.89	0.96	0.94	0.98	0.98	0.97	0.98	0.94	0.98	
Weilheim	2	0.95	0.92	0.92	0.93	0.96	0.97	0.95	0.96	0.92	0.97	
Peissenberg	3	0.92	0.89	0.83	0.85	0.89	0.90	0.86	0.89	0.85	0.89	
Oberammergau	4	0.76	0.77	0.61	0.73	0.69	0.62	0.50	0.59	0.73	0.67	
Unternogg	5	0.57	0.56	0.32	0.61	0.52	0.49	0.43	0.48	0.59	0.49	
Oberhausen	6	0.94	0.94	0.93	0.89	0.93	0.94	0.93	0.93	0.87	0.93	
Obernach	7	0.41	0.23	0.19	0.46	0.37	0.28	0.03	0.22	0.40	0.28	

Tabelle 4.1: Zusammenfassung der Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 1: die optimalen Werte für die fünf Zielfunktionen (Mittelwerte über vier zeitliche Auflösungen - 1, 2, 15 und 30 Tage) für die sieben Teileinzugsgebiete, jeweils für die Kalibrierungs- und Validierungsperiode. Die Teileinzugsgebiete mit zufriedenstellenden Ergebnissen wurden grau hinterlegt.

fünf der sieben Teileinzugsgebiete (Tezg) ist die Güte der Anpassung an die gemessenen Abflusswerte gut bis sehr gut (die grau hinterlegten Werte in Tab. 4.1,  $O_i > 0.50$  für alle Zielfunktionen). Die flussabwärts liegenden Tezg 1, 2, 3 und 6 weisen Werte größer als 0.80 für alle Zielfunktionen und für beide Perioden auf. Für Tezg 1 und 2 sind alle Werte größer als 0.90 mit Maxima von bis zu 0.98.

Die in Kapitel 4.2.1 erwähnten schlechteren PROMET-Ergebnisse für die flussaufwärts liegenden Gebiete (4, 5 und 7) pflanzen sich im hier entwickelten Modell für die Abflusskonzentration fort. Insbesondere für das Tezg 7 sind die Ergebnisse sehr



**Abbildung 4.7:** Modellergebnisse nach der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 1 für die Teileinzugsgebiete 5 (Pegel Unternogg) und 2 (Pegel Weilheim). Die grauen Linien sind die einzelnen Pareto-Lösungen  $Q_{sim}$ , die schwarze Linie die gemessene Ganglinie  $Q_{mes}$ .

schlecht. Wie in Abb. 4.4 zu sehen ist, ist die dort von PROMET erzeugte Dämpfung so hoch, dass eine rückwärts gerichtete Veränderung, eine "Entdämpfung" notwendig wäre, um das Signal zu korrigieren.

Die Gütewerte für den ansteigenden Teil der Ganglinie  $(NS_{dr})$  sind in der Kalibrierungsperiode für fast alle Teileinzugsgebiete größer als die Gütewerte für den absteigenden Teil  $(NS_{ndr})$ . Dieser Trend kehrt sich aber für die Validierungsperiode um und beweist, dass der Unterschied keine systematische Eigenschaft des Modells ist.

Die berechneten Abflussganglinien für eine schlechte (Tezg 5, Pegel Unternogg) und eine gute (Tezg 2, Pegel Weilheim) Anpassung werden in Abb. 4.7 dargestellt. Für den Pegel Unternogg sind die Pareto-Lösungen zu gedämpft. Die meisten Scheitelabflüsse werden unterschätzt, obwohl es auch einige überschätzte Scheitelwerte gibt. Die Rückgänge sind zu flach, so dass die Dynamik der Zeitreihe falsch nachgebildet wird. Die Zeitreihen für Pegel Weilheim hingegen bestätigen die sehr guten Werte der Güte durch eine praktisch perfekte Anpassung, bei der alle Teile der gemessenen Ganglinie gut nachgerechnet werden konnten.



Abbildung 4.8: Werte der Modellgüte bei der GLUE-Analyse für Fall 1. Die Werte wurden für das Teileinzugsgebiet 2 (Pegel Weilheim) für die Kalibrierungsperiode und auf der täglichen Skala berechnet.

### Ergebnisse der GLUE-Analyse

Für die Bestimmung der behavioural Simulationen wurden, wie in Kapitel 4.2.6 beschrieben, alle Punkte ausgesucht, die für alle fünf Zielfunktionen für die vier Zeitskalen und für die Kalibrierungs- und Validierungsperiode die Bedingung  $O_i \geq O_i^{best}-0.10$  erfüllen. Die Gruppe der ausgesuchten Punkte bilden das GLUE-Ensemble, das in Abb. 4.8 im Kriterienraum abgebildet wird.

Alle zehn Paare von Zielfunktionen zeigen relativ hohe Korrelationen, was die Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse, bei der die lokalen Optima sehr nah aneinander liegen, bestätigt. Die deutlich abgegrenzte Form des Konvergenzkegels, der das GLUE-Ensemble bildet, wurde öfter in der Literatur dokumentiert (z.B. WA-GENER et al. 2001). Die hohe Konzentration der Punkte an der Spitze des Konvergenzkegels ist eine gute Darstellung der GLUE-Grundidee: Obwohl es mathematisch ein klares Optimum gibt, ist es nicht berechtigt, diesen einzigen Punkt als einzige Lösung der Problems anzunehmen, weil in sich selbst betrachtet die Werte der Zielfunktionen für alle Punkte um das Optimum gleichwertig sind.

Die Breite des Konvergenzkegels gibt Hinweise darauf, wie unterschiedlich oder wie ähnlich die Aussagen der Zielfunktionen sind. Die hohe Korrelation zwischen den SAE- und  $NS_{tr}$ -Werten deutet auf eine ähnliche Bedeutung hin. Die Normierung des absoluten Fehlers mit  $Q_{mes}$  hat in der Tat bei SAE die gleiche Wirkung wie die Box-Cox-Transformation bei  $NS_{tr}$ : Das in der Regel größere Gewicht der höheren Abflusswerte wird korrigiert. Der entgegengesetzte Fall kann bei der Bezie-



**Abbildung 4.9:** Modellergebnisse nach der GLUE-Analyse für Fall 1 für die Teileinzugsgebiete 5 (Pegel Unternogg) und 2 (Pegel Weilheim). Die grauen Linien sind die einzelnen behavioural GLUE-Lösungen  $Q_{sim}$ , die schwarze Linie die gemessene Ganglinie  $Q_{mes}$ .

hung zwischen den  $NS_{dr}$ - und den  $NS_{ndr}$ -Werten beobachtet werden. Der niedrige Korrelationswert ist eine logische Folge der Definition der beiden Funktionen, die für unterschiedliche Teile der Abflusskurve berechnet werden. Diese Aussagen werden auch von den Pareto-Lösungen in Abb. 4.6 bestätigt.

Für die Pegel Unternogg und Weilheim bildet Abbildung 4.9 die Modellergebnisse des GLUE-Ensembles ab. Die Eigenschaften der Anpassung sind die gleichen wie bei der Pareto-Lösung, mit der Ausnahme der größeren Streuung der Werte. Die Bedingung, die ein Punkt erfüllen muss, um im GLUE-Ensemble als behavioural klassifiziert zu werden, ist per Definition schwächer als die Bedingung eines Pareto-Punktes. Es gibt viel mehr Punkte in der GLUE-Lösung, was zu einem breiteren Feld der Ergebnisse führt.

### Fall 2: Finite-Differenzen MODFLOW-Modell als Grundwassermodul

### Ergebnisse der Mehrziel-Optimierung

Tabelle 4.2 fasst die Ergebnisse des Mehrziel-Optimierungsverfahrens für Fall 2 zusammen. Im Vergleich zu Fall 1, in dem auch das Grundwassermodul kalibriert wurde, fallen die Werte der Güte leicht zurück, sie ändern sich aber nicht in ihrer Substanz. Für die drei schlechtesten Pegel Obernach, Unternogg und Oberammergau (Tezg 7,

			ł	Kalibrierun	g			Validierung					
Pegel	Tezg	NS	NS <sub>dr</sub>	NS <sub>ndr</sub>	SAE	NStr	K <sub>Gr</sub>	NS	NS <sub>dr</sub>	NS <sub>ndr</sub>	SAE	NS <sub>tr</sub>	K <sub>Gr</sub>
Fischen	1	0.94	0.88	0.93	0.91	0.96	0.64	0.95	0.92	0.94	0.90	0.95	0.62
Weilheim	2	0.93	0.91	0.89	0.89	0.92	0.64	0.93	0.95	0.92	0.88	0.91	0.62
Peissenberg	3	0.88	0.85	0.81	0.83	0.85	0.64	0.87	0.83	0.89	0.84	0.85	0.62
Oberammergau	4	0.67	0.69	0.50	0.71	0.63	0.64	0.49	0.26	0.51	0.69	0.56	0.62
Unternogg	5	0.46	0.49	0.24	0.56	0.37	0.64	0.31	0.37	0.30	0.52	0.24	0.62
Oberhausen	6	0.92	0.91	0.89	0.85	0.88	0.64	0.90	0.91	0.88	0.83	0.85	0.62
Obernach	7	0.36	0.23	0.18	0.46	0.33	0.64	0.24	-0.01	0.22	0.43	0.22	0.62

Tabelle 4.2: Zusammenfassung der Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 2 (Finite-Differenzen MODFLOW-Modell für das Grundwassermodul). Die optimalen Werte für die sechs Zielfunktionen (gemittelt über die vier Zeitskalen - 1, 2, 15 und 30 Tage) werden für die sieben Teileinzugsgebiete, für die Kalibrierungs- und Validierungsperiode dargestellt. Die Teileinzugsgebiete mit zufriedenstellenden Ergebnissen wurden auf einem grauen Hintegrund dargestellt.



**Abbildung 4.10:** Modellergebnisse nach der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 2 für die Teileinzugsgebiete 5 (Pegel Unternogg) und 2 (Pegel Weilheim). Die grauen Linien sind die einzelnen Pareto-Lösungen  $Q_{sim}$ , die schwarze Linie die gemessene Ganglinie  $Q_{mes}$ .

5 und 4) ist der Abstieg deutlicher als für die anderen.

Der Vergleich zwischen den berechneten und den gemessenen Zeitreihen (Abb. 4.10) zeigt das gleiche Muster, das bereits bei Fall 1 diskutiert wurde. Eine Ausnahme ist die leichte Überschätzung, die die berechneten Pareto-Werte für das Tezg 2 charakterisiert. Um das Problem weiter zu untersuchen, wurden die gemessenen



Abbildung 4.11: Berechnete und gemessene Dauerlinie für das Teileinzugsgebiet 2 (Pegel Weilheim) für Fall 2. Die berechneten grauen Linien  $min(Q_{sim})$  und  $max(Q_{sim})$  sind die oberen und unteren Grenzen der Pareto-Lösungen.

und berechneten Dauerlinien dargestellt (Abb. 4.11). Dabei werden zwei Phänomene aufgedeckt: Erstens hat das Modell ein grundsätzliches Massenproblem, die Abflussmenge wird überschätzt. Der Grund dafür ist die hier verfolgte Modellierungsstrategie. Wie bereits erwähnt wurden die Ergebnisse des Bodenwasserhaushaltsmodells volumenmäßig korrigiert, um den Einfluss der nicht-korrigierten Niederschlagsdaten zu kompensieren. Die Korrektur erfolgte pro Teileinzugsgebiet, sie berücksichtigt jedoch nicht die Unterströmung der Pegel durch den quartären Grundwasserleiter. Das MODFLOW-Modell setzt die Realität besser um und berechnet die Pegelunterströmung, was aber mit dem Korrekturverfahren nicht mehr konsistent ist. Die Folge ist, dass in Fall 2 die flussaufwärts liegenden Teileinzugsgebiete zu wenig Wasser, die anderen zu viel Wasser haben.

Zusätzlich merkt man bei den berechneten Dauerlinien, dass die relative Überschätzung mit sinkenden Abflusswerten steigt, d.h. dass die Rückgänge der berechneten Ganglinie zu flach sind. Das MODFLOW-Modell, verantwortlich für den langsamen Teil der Ganglinie, scheint die Abflusszeitreihe zu stark zu dämpfen. Dass das PROMET-Modell zu viel dämpft und dies erst durch die Einbindung von MOD-FLOW sichtbar wurde, ist auch eine mögliche Erklärung.

Ein Vorteil der Integration des MODFLOW-Modells im entwickelten Modellkomplex ist, dass jetzt nicht nur der Gesamtabfluss sondern auch der Grundwasserspiegel berechnet wird. Für die Auswertung der Güte der Modellierung der piezometrischen Höhen im Talaquifer wurde die lineare Korrelation verwendet. Die erzielten mittleren  $K_{Gr}$ -Werte sind 0.64 für die Kalibrierungs- und 0.62 für die Validierungsperiode (Tabelle 4.2). Die Werte sind über die 12 vorhandenen Grundwasserpegel gemittelt und an der Komplexität der Grundwassermodellierung in Gebieten mit extrem steilen Gradienten gemessen als sehr gut anzusehen. In Abb. 4.12 werden die Modellergebnisse für vier Grundwasserpegel exemplarisch dargestellt. Für zwei Pegel liegen alle Messwerte über die ganze zehnjährige modellierte Periode innerhalb der berechneten Pareto-Lösungen. Für die anderen beiden Pegel ist die Dynamik gut nachgebildet, obwohl die berechneten Werte leicht verschoben sind. Die Messwerte wurden nicht



**Abbildung 4.12:** Modellergebnisse nach der Mehrziel-Optimierungsanalyse für Fall 2 für vier ausgesuchten Grundwasserpegel. Die grauen Linien sind die einzelnen Pareto Lösungen  $H_{sim}$ , die schwarze Linie die gemessene Ganglinie  $H_{mes}$ .

vom Messort zur Mitte der Zelle, wofür der berechnete Wert gilt, interpoliert, sondern direkt mit der Berechnung verglichen, was die Verschiebung begründet.

### Ergebnisse der GLUE-Analyse

Die Lösung der GLUE-Analyse, das GLUE-Ensemble im Kriterienraum, ist in Abb. 4.13 dargestellt. Die relativ zu Fall 1 deutlich komplizierteren Beziehungen sind ein Hinweis, dass die Einführung des MODFLOW-Modells das Verhalten des Modells verändert hat. Die Beziehungen zwischen  $K_{Gr}$  und den anderen Zielfunktionen beweisen durch die praktisch nicht vorhandenen Korrelationen, dass der Gesamtmodellkomplex durch die Einbindung des MODFLOW-Modells von neuen unabhängigen Einschränkungen bestimmt ist. Solche Einschränkungen erhöhen die Qualität und die Zuverlässigkeit des Modells, wenn bewiesen ist, dass sie realitätsnah sind, was in diesem Fall durch die gute Anpassung an die gemessenen Grundwasserstände gegeben ist.

Aus den unterschiedlichen Beziehungen zwischen den Abfluss-Zielfunktionen ist die schlechte Korrelation von  $NS_{dr}$  zu den anderen Funktionen hervorzuheben.  $NS_{dr}$ wird für den ansteigenden Teil der Ganglinie berechnet, der am wenigsten vom Verhalten des Grundwassersystems beeinflusst wird. Alle anderen Funktionen werden auch durch die Grundwasserexfiltration bestimmt.

### Zusammenfassung und Vergleich zwischen Fall 1 und Fall 2

Für beide Modellversionen konnten in der Mehrheit der untersuchten Teileinzugsgebiete gute bis sehr gute Ergebnisse erzielt werden. Dabei stellt sich die Frage, wie die Einbindung des Finite-Differenzen-Grundwassermodells in die hydrologische Modellstruktur auf die Modellgüte gewirkt hat. Die Prüfung der Modellgüte beinhaltet die Bewertung der Güte der Anpassung an die Messwerte, aber auch die Bewertung der Unsicherheit der Modellvorhersage.



Abbildung 4.13: Werte der Modellgüte bei der GLUE-Analyse für Fall 2. Die Werte wurden für das Teileinzugsgebiet 2 (Pegel Weilheim) für die Kalibrierungsperiode und auf der täglichen Skala berechnet. Die Skalen wurden an die erzielten Werte der Zielfunktionen angepasst.

Zusätzlich zu den erzielten Werten der Zielfunktionen lässt sich die Güte der Anpassung auch nach der Art und Weise messen, wie die Familien von Lösungen die Messwerte umschließen. Wenn die gemessene Ganglinie komplett innerhalb des von den berechneten Ganglinien abgegrenzten Bereiches liegt, bedeutet das, dass das Modell den kompletten Reaktionsmodus des Einzugsgebietes nachbilden kann. Um diesen Aspekt zu quantifizieren, wurde der Anteil I [%] der Abflussmesswerte, die von den Pareto- oder GLUE-Lösungen umschlossen werden, berechnet.

GUPTA et al. (2003) erwähnen die Möglichkeit, die Streuung der berechneten Werte innerhalb der Pareto-Lösung als ein Maß für die Unsicherheit in der Modellvorhersage zu verwenden. BEVEN und BINLEY (1992) schlagen dafür die Streuung der GLUE-Lösung vor. Deswegen wurde in dieser Arbeit als Maß für die Quantifizierung der Unsicherheit die mittlere Breite B des Ensembles von Pareto- und GLUE-Lösungen

### 4 Modellierung der Abflusskonzentration. Fallstudie Ammer

normiert mit dem gemessenen Abflusswert angenommen:

$$\mathbf{B} = (1/n_t) \cdot \sum_{i=1}^{n_t} ((Q_{sim}^{max}(t_i) - Q_{sim}^{min}(t_i))/Q_{mes}(t_i)).$$
(4.4)

Wichtig ist, dass B ein Maß für die strukturelle Unsicherheit und **nicht** für die grundsätzliche Unsicherheit der Modellvorhersage ist.

Die Abbildungen 4.14 und 4.15 zeigen die berechneten I- und B-Werte für die beiden Methoden und für alle sieben Teileinzugsgebiete. Die größere Breite des GLUE-Ensembles hat als Folge, dass sowohl  $I_{GLUE}$  als auch  $B_{GLUE}$  fast ohne Ausnahmen größer als die entsprechenden Pareto-Werte sind. Im Fall 1 für die Teileinzugsgebiete, in denen eine gute Anpassung erzielt wurde (1, 2, 3, 4 und 6), ist  $I_{GLUE}$  nahe an 100%,  $I_{PARETO}$  ist nicht höher als 50%. Ein ähnliches Verhältnis zeigen auch die B-Werte. Damit scheint GLUE eine sowohl konservativere (höhere geschätzte Unsicherheit) als auch solidere (komplettes Einschließen der Messwerte) Lösung gegenüber der Mehrziel-Optimierungsanalyse zu bieten.

Es ist interessant zu beobachten, dass in Fall 1 die Unsicherheit  $B_{GLUE}$  und die Güte  $I_{GLUE}$  des Modells fast perfekt invers korreliert (die Korrelation ist -0.96) sind. In den Gebieten mit einer schlechteren Modellgüte versucht das Modell die falsche Dynamik der berechneten Werte durch eine größere Streuung zu kompensieren. Dort, wo die Anpassung gut ist, ist die Streuung der Werte auch kleiner. Ein besseres Ergebnis impliziert also auch ein strukturell sichereres Ergebnis.

Der Fall 2 bringt eine Verschlechterung der Ergebnisse mit sich. Die *I*-Werte sind im Vergleich zu Fall 1 niedriger: Die Mittelwerte sind  $I_{PARETO} = 0.24$  und  $I_{GLUE} = 0.60$ , in Fall 1 waren sie  $I_{PARETO} = 0.36$  und  $I_{GLUE} = 0.73$ . Die Maße der Unsicherheit dagegen steigen:  $B_{PARETO} = 0.30$  und  $B_{GLUE} = 0.94$ , in Fall 1 waren sie  $B_{PARETO} = 0.28$  und  $B_{GLUE} = 0.83$  (bei der Mittelung wurde das Tezg 7 nicht berücksichtigt). Vor allem aber ist die Korrelation zwischen Güte und Unsicherheit jetzt positiv und gleich 0.61. Um die systematischen Abweichungen von den gemessenen Ganglinien zu kompensieren, wird das Lösungs-Ensemble breiter, so dass eine gute Anpassung jetzt mit dem Preis einer steigenden Unsicherheit bezahlt wird.

Die Verschlechterung der Ergebnisse in Fall 2 sollte nicht auf die neue Modellstruktur zurückgeführt werden. Das Darcy-Gesetz ist eine akkuratere Beschreibung der Grundwasserströmung als die Gleichung einer linearen Speicherkaskade unabhängig von der räumlichen oder zeitlichen Skala des Problems. Vielmehr wurden die strukturellen Verbesserungen durch die Tatsache, dass das MODFLOW-Modells als Teil des integrativen Modellkomplexes nicht mitkalibriert wurde, negativ kompensiert. Sowohl das PROMET- als auch das MODFLOW-Modell wurden sektoral für das Gebiet der Ammer erfolgreich kalibriert, hinzu kommt, dass ihre Parameter auf direkten Feldmessungen beruhen. Trotzdem haben sie zu systematischen Abweichungen in den Ergebnissen des Gesamtmodells geführt. Das Ergebnis zeigt mit welchem Vorbehalten die effektiven Parameterwerte eines kalibrierten Modells betrachtet werden müssen. Diese effektiven Werte sind nur im Kontext gültig, in dem sie berechnet wurden.

Auf der anderen Seite wird die Reduzierung der Güte durch die Hinzufügung des Grundwasserspiegels und des Grundwasserströmungsfeldes zur Liste der Modellergebnisse positiv kompensiert. Das Modell bietet damit eine umfangreichere



Abbildung 4.14: Quantifizierung der Unsicherheit der Modellprognose für Fall 1.



**Abbildung 4.15:** Quantifizierung der Unsicherheit der Modellprognose für Fall 2. Der  $B_{GLUE}$ -Wert für das Teileinzugsgebiet 7 ist 26.42 und damit außerhalb der dargestellten Spannweite.

Abbildung der hydrologischen Prozesse, der Preis dafür sind weniger gute punktuelle Ergebnisse bei der Anpassung des Gesamtabflusses. Welches der beiden Modelle vorzuziehen ist, hängt von den gestellten Aufgaben ab. Für die vorliegende Arbeit, die als Ziel die Entwicklung eines möglichst physikalisch-basierten, global change-tauglichen Modells hat, ist der hydrologische Modellkomplex mit integrierten MODFLOW-Modell als besser einzuschätzen. Der Vergleich der beiden angewandten Verfahren fällt weniger eindeutig aus. Die Mehrziel-Optimierungsanalyse ist für die Bestimmung der oberen Grenze der Modellgüte besser geeignet. Die GLUE-Analyse hat aber einen größeren Beitrag für das Verständnis des Modell-Reaktionsmodus geleistet. Für die Quantifizierung der strukturellen Modellunsicherheit scheint ebenfalls die konservativere GLUE-Lösung zuverlässiger zu sein als die Pareto-Lösung, da die GLUE-Stichprobe repräsentativer für die Modellantwort im Parameterraum als die Pareto-Stichprobe ist. Auf der anderen Seite bringt die Auswahl des *d*-Wertes für die Trennung zwischen behavioural und non-behavioural eine subjektive Komponente in die Anwendung der GLUE-Methode.

### 4.3.2 Analyse der Modellparameter und ihrer Bestimmbarkeit

Sowohl die Analyse der Mehrziel-Optimierung als auch die GLUE-Analyse sind Ansätze der inversen Modellierung. Sie haben als Ergebnis nicht nur Schätzungen der Abflüsse oder der Grundwasserstände, sondern auch die Parameterwerte, die zu diesen Schätzungen geführt haben. Das Ziel dieses Kapitels ist, die Parameterwerte, vor allem aber die Unsicherheit ihrer Bestimmung, zu untersuchen. Über die mögliche physikalische Interpretation der Werte wird später im Kapitel 4.5, zusammen mit dem Vergleich mit den anderen Verfahren und Ergebnissen, berichtet. Wie im vorherigen Kapitel ist die Präsentation in zwei Teile, Fall 1 und Fall 2, aufgeteilt, gefolgt von einem Vergleich zwischen den beiden Modellversionen.

### Fall 1: lineare Speicherkaskade als Grundwassermodul

### Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse

Abb. 4.16 stellt die 495 Pareto-Parametersätze für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg) dar. Die Parameterwerte wurden mit der Größe des vordefinierten zulässigen Parameterraumes (Kap. 4.2.3) normiert, so dass der Wert 0 dem kleinstund der Wert 1 dem größtmöglichen Wert entspricht. Tezg 3 hat zwei stromaufwärts liegende Teileinzugsgebiete (4 und 5), es gibt also zwei Flussmodule (5-1 und 5-2) mit jeweils zwei Parametern.

Die Werte der Parameter  $n_i$  und  $k_i$  sind alle am unteren Teil des in der Kalibrierung zugelassenen Intervalls konzentriert. Die Erklärung dafür ist, dass die einzelnen Obergrenzen der Intervalle sehr hoch festgesetzt wurden. Die Wirkung der eigentlichen Begrenzung über das Produkt  $n_i \cdot k_i$  wird in Abb. 4.17 anhand des Beispiels der Beziehungen zwischen  $n_3$  und  $k_3$ , bzw.  $n_4$  und  $k_4$ , verdeutlicht.

Abb. 4.18 zeigt die gleichen Parametersätze, nur werden jetzt die Produkte  $n_i \cdot k_i$ , normiert mit der Länge ihres zugelassenen Intervalls, dargestellt. Für manche Parameter, z.B. *s* oder  $n_{5-1} \cdot k_{5-1}$ , konzentrieren sich die Linien vorwiegend in einem bestimmten Teil des Intervalls, was ein Zeichen für einen gut bestimmten optimalen Bereich ist. Für  $n_2 \cdot k_2$  gibt es trotz einer eindeutigen Konzentration im unteren Wertebereich wenige Werte, die an der oberen Grenze liegen. Interessant ist, dass diese hohen  $n_2 \cdot k_2$  Werte immer mit sehr niedrigen  $n_3 \cdot k_3$  einhergehen, was eine erste Andeutung für vorhandene Wechselbeziehungen in der Modellstruktur ist: Ein langsamer Zwischenabfluss wird anscheinend durch eine schnelle vertikale Perkolation



Abbildung 4.16: Pareto-Lösung im Parameterraum für Fall 1 (lineare Speicherkaskade für das Grundwassermodul) für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg). Die Werte aller Modellparameter wurden mit der Länge des zulässigen Intervalls normiert. Jede Linie stellt einen Punkt in der Pareto-Lösung dar.



Abbildung 4.17: Beziehung in der Pareto-Lösung zwischen den beiden Parametern einer linearen Speicherkaskade. Die Werte wurden für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg) berechnet.

kompensiert. Die Werte für  $n_1 \cdot k_1$  sind in einem größeren Bereich verteilt, für  $n_{5-2} \cdot k_{5-2}$  belegen sie das gesamte Intervall.

Die optimieren Werte in Abb. 4.18 bilden eine Wahrscheinlichkeitsverteilung für jeden der Modellparameter. Ein Parameter wird als gut bestimmbar oder mit einer kleinen Unsicherheit behaftet klassifiziert, wenn die empirische Funktion der Wahrscheinlichkeitsverteilung eine kleine Breite aufweist. Als Quantifizierungsmaß wurde der Unterschied  $UB = norm(F_{75} - F_{25})$ , zwischen den 25%- und 75%-Quantilen der Funktion ausgewählt. Falls die normierten Werte perfekt unbestimmt und gleichmäßig über das [0; 1]-Intervall verteilt sind, ist UB gleich 0.5.

Tabelle 4.19 fasst die UB-Werte für alle Parameter der sieben modellierten Teileinzugsgebiete im Gebiet der Ammer zusammen. Die Grenze zwischen gut und schlecht bestimmten Parametern wurde bei UB = 0.25 festgesetzt. Aus 41 Parametern sind 25 nach diesem Kriterium gut bestimmt mit einem Gesamtmittelwert von 0.25. Die li-



Abbildung 4.18: Zusammengefasste Pareto-Lösung im Parameterraum für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg). Die Werte aller Modellparameter wurden mit der Länge des zulässigen Intervalls normiert. Jede Linie stellt einen Punkt in der Pareto-Lösung dar.

$norm(F_{75}-F_{25})$	Tezg. 1	Tezg. 2	Tezg. 3	Tezg. 4	Tezg. 5	Tezg. 6	Tezg. 7
S	0.26	0.56	0.09	0.77	0.08	0.31	0.10
n <sub>1</sub> • k <sub>1</sub>	0.16	0.24	0.19	0.31	0.20	0.09	0.13
n <sub>2</sub> •k <sub>2</sub>	0.03	0.00	0.00	0.36	0.00	0.06	0.00
n <sub>3</sub> •k <sub>3</sub>	0.86	0.52	0.09	0.01	0.14	0.44	0.30
n <sub>4</sub> •k <sub>4</sub>	0.94	0.51	0.08	0.29	0.18	0.33	0.40
n <sub>5-1</sub> • k <sub>5-1</sub>	0.24	0.10	0.09			0.06	
n <sub>5-2</sub> • k <sub>5-2</sub>		0.09	0.67				-

**Abbildung 4.19:** Bestimmbarkeit UB der Parameter innerhalb der Pareto-Lösung für Fall 1. Die Funktion  $UB = norm(F_{75} - F_{25})$  ist die Breite des normierten Intervalls, in dem die mittleren 50% Werte liegen. Die Werte kleiner als 0.25, die eine gute Bestimmbarkeit zeigen, wurden auf grauem Hintergrund dargestellt.

neare Speicherkaskade des Grundwasserraumes (E4), des vertikalen Flusses im Sickerraum (E3) und der Separationsbeiwert s sind die Parameter, die am schlechtesten abschneiden, mit fünf bzw. vier Teileinzugsgebieten, in denen sie schlecht bestimmt sind. Auf der anderen Seite sind die Parameter der schnellen Komponenten E1 (Oberflächenabfluss) und E5 (Fließen im Gerinne) am besten bestimmt. Diese Erkenntnis deutet darauf hin, dass sich die langsamen Komponenten E4 und E3 gesteuert vom Separationsparameter s gegenseitig kompensieren,.

Von den Teileinzugsgebieten haben 3 und 5 die besseren und 1, 6, 7 und vor allem 4 die schlechteren Ergebnisse. In beiden Kategorien befinden sich Vorlandund Gebirgs-Teileinzugsgebiete, geomorphologisch ist also kein Trend zu erkennen. Vier UB-Werte sind sehr hoch, bis zu 0.94 für  $n_4 \cdot k_4$  für das Tezg 1, viel höher als die 0.5 der Gleichverteilung. Das ist ein Zeichen für eine bimodale Verteilung, in der die Werte sich in zwei großen Gruppen konzentrieren. In diesem Fall liegen die beiden Gruppen an den beiden Enden des Intervalls.
#### Ergebnisse der GLUE-Analyse

Die GLUE-Analyse hat als Ergebnis eine Gruppe von Parametersätzen, die alle zu fast optimalen Ergebnissen führen. Die Analyse der Verteilung der Werte innerhalb dieser Parametersätze ist, wie bei der Mehrziel-Optimierungsanalyse, eine Möglichkeit, die Unsicherheit zu quantifizieren. Die Sensitivität der Parameter gegenüber der Modellgüte wird in Abb. 4.20 für Tezg 3 (Pegel Peissenberg) beispielhaft dargestellt. Jeder Punkt entspricht einem behavioural Parametersatz. Für alle sechs Parameter zeigen die Werte ein sehr unsensitives Verhalten: Werte von einem Ende des Intervalls zum anderen erzielen eine gleich gute Modellgüte, hier über die NS-Funktion gemessen. Es ist wichtig, zwischen unsensitiven Einzelnparametern und unsensitiven Parametersätzen (UHLENBROOK et al. 1999) zu unterscheiden. Abb. 4.20 ist ein Beweis für den zweiten Fall, was wiederum eine starke Kompensierung zwischen den einzelnen Parametern impliziert.

Die kumulativen Verteilungen der behavioural Punkte werden gegenüber dem Verteilung der non-behavioural Punkte in Abb. 4.21 dargestellt. Über die Abweichungen zwischen den beiden Kurven lässt sich die Bestimmbarkeit oder die Unbestimmbarkeit der Parameter quantifizieren. Je unterschiedlicher die beiden Verteilungen sind, desto bestimmter sind die Parameter. Für die Quantifizierung der Parameterbestimmbarkeit wird in der GLUE-Methode oft der statistische Kolmogoroff-Smirnov-Test durchgeführt (BEVEN und BINLEY 1992).

Der Kolmogoroff-Smirnov-Test wird benutzt, um das Niveau  $\alpha_{KS}$  zu bestimmen, zu dem die Hypothese  $H_0$  verworfen werden kann. Die Hypothese  $H_0$  sagt aus, dass es keinen Unterschied zwischen den beiden Sätzen gibt. Ein niedriger  $\alpha_{KS}$ -Wert bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit eines Fehlers 1. Art gering ist. Ein hoher Wert bedeutet hingegen, dass diese Wahrscheinlichkeit groß ist. Bei einem hohen  $\alpha_{KS}$ -Wert ist es also wahrscheinlich, dass die beiden Verteilungen zur gleichen Stichprobe gehören, was letztendlich bedeutet, dass die Unsicherheit in der Parameterbestimmung groß ist. Die Berechnung von  $\alpha_{KS}$  basiert auf dem größten absoluten Unterschied  $D_{KS}$ zwischen den beiden Verteilungen.

Eine Zusammenfassung aller  $\alpha_{KS}$ -Werte für die sieben Teileinzugsgebiete wird in Tab. 4.3 gegeben. Nur zehn aus 41 Parametern sind signifikant zu einem Niveau kleiner als 0.50. Die meisten sind signifikant zum Niveau 1.0, sie sind also perfekt unbestimmt. Es ist kein richtiger Trend zu erkennen: Die gut bestimmten Parameter scheinen isolierte Einzelfälle zu sein.

Wie bei der Berechnung der Unsicherheit in der Modellvorhersage (Kap. 4.3.1) ist die Erklärung für den Unterschied zwischen den Ergebnissen der Mehrziel-Optimierungsanalyse und der GLUE-Analyse die Tatsache, dass die Mehrziel-Optimierungsanalyse für einen kleineren Anteil des Parameterraumes repräsentativ ist. Die GLUE-Analyse prüft (mindestens theoretisch) den ganzen Raum und hat deutlich schwächere Akzeptanzkriterien für die Parametersätze.

#### Fall 2: MODFLOW-Modell als Grundwassermodul

In der Modellversion mit integriertem MODFLOW-Grundwassermodell wurden weniger Parameter als für Fall 1 bei der inversen Modellierung angepasst. Das Ziel ist, sich allein auf die Sickerraumparameter zu konzentrieren. Deshalb wurden für die Parameter der Einheiten E1 und E5 die Medianwerte der Pareto-Sätze aus Fall 1



Abbildung 4.20: Sensitivität der Parameter nach der GLUE-Analyse für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg). Die Punkte entsprechen den behavioural Parametersätzen.



Abbildung 4.21: Parameterverteilungen (behavioural und non-behavioural) nach der GLUE-Analyse für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg).  $D_{KS}$  und  $\alpha_{KS}$  sind die Ergebnisse des Kolmogoroff-Smirnov-Tests zwischen den dargestellten Verteilungen.

$\alpha_{\rm KS}$	Tezg. 1	Tezg. 2	Tezg. 3	Tezg. 4	Tezg. 5	Tezg. 6	Tezg. 7
S	1.00	1.00	0.72	0.72	0.01	0.23	0.00
n , • k ,	1.00	1.00	1.00	0.00	0.53	1.00	0.98
$n_2 \cdot k_2$	1.00	1.00	0.53	0.36	0.36	0.53	0.00
n 3 • k 3	1.00	1.00	1.00	0.53	1.00	1.00	0.72
$n_4 \cdot k_4$	1.00	1.00	0.98	0.72	1.00	0.98	1.00
n <sub>5-1</sub> • k <sub>5-1</sub>	0.00	0.53	1.00			0.00	
n 5-2 • k 5-2		0.14	0.98				

**Tabelle 4.3:** Zusammenfassung der Ergebnisse des Kolmogoroff-Smirnov-Tests nach der<br/>GLUE-Analyse für Fall 1. Die Werte des Signifkanzniveaus  $\alpha_{KS} < 0.50$ , die ei-<br/>ne höhere Bestimmbarkeit der behavioural Punkte zeigen, wurden auf grauem<br/>Hintergrund dargestellt.

festgesetzt. Das MODFLOW-Modell (E4) wurde ebenfalls nicht mit kalibriert. Bleiben dementsprechend die Parameter der Sickerraum-Modelleinheiten E2 und E3 und der Separationsparameter *s* für die Kalibrierung. Durch die Reduzierung der Anzahl der kalibrierten Parameter wird auch die Anzahl der Freiheitsgrade verringert, was zu einer kleineren Parameterunsicherheit führen sollte. Indem alle anderen Parameter im Modell festgesetzt wurden, wird die untere Grenze in der Unsicherheit der Sickerraumparametrisierung geprüft.

# Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse

Für Tezg 3 (Pegel Peissenberg) werden die Ergebnisse der Mehrziel-Optimierung, die Pareto-Sätze im Parameterraum dargestellt. Im Vergleich zu den Werten in Fall 1 bleiben die Pareto-Lösungen im gleichen Bereich des zulässigen Intervalls, sie wirken weniger gestreut. Bevor diese kleinere Streuung als eine größere Bestimmtheit bewertet wird, muss man noch sagen, dass die Pareto-Lösungen in Fall 1 495 und in Fall 2 120 einzelne Parametersätze beinhalten. Der Unterschied wurde von der in Fall 2 bedeutend höheren benötigten CPU-Leistung erzwungen. Die höher konzentrierte Verteilung der Werte könnte auch durch eine kleinere Repräsentativität der Lösung in Fall 2 erklärt werden. Auf der anderen Seite wurde das Wichtungssystem für die Mehrziel-Optimierungsanalyse in beiden Fällen nach dem gleichen Prinzip aufgebaut, das Wichtungsraster war zwar feiner in Fall 1, seine Eckpunkte waren aber die Gleichen. Dazu kommt, dass in Fall 2 eine zusätzliche Zielfunktion ( $K_{Gr}$ ) hinzugefügt wurde, die ein deutlich anderes Verhalten zeigt (Kap. 4.3.1), was Fall 2 ein Plus an Repräsentativität gibt.

Die Bestimmtheit der Parameter wird in Tab. 4.4 zusammengefasst. Nur fünf aus 21 UB-Werten (24%) sind größer als 0.25, im Vergleich mit 16 aus 41 (39%) in Fall 1. Der UB-Mittelwert 0.15 ist auch signifikant kleiner als in Fall 1 (0.25), was auf eine allgemein kleinere Parameterunsicherheit hindeutet. Die Reduzierung der Anzahl der optimierten Parameter hat also in der Tat auch eine Reduzierung der Unsicherheit verursacht.

# Die GLUE-Analyse

Wie in Fall 1 werden in Abb. 4.23 und 4.24 beispielhaft die Ergebnisse der GLUE-Analyse für Tezg 3 vorgestellt. Von den drei Parametern zeigt nur der Speicherpara-



Abbildung 4.22: Zusammengefasste Pareto-Lösung im Parameterraum für Fall 2 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg). Die Werte aller Modellparameter wurden mit der Länge des zulässigen Intervalls normiert. Jede Linie stellt einen Punkt in der Pareto-Lösung dar.

$norm(F_{75}-F_{25})$	Tezg 1	Tezg 2	Tezg 3	Tezg 4	Tezg 5	Tezg 6	Tezg 7
S	0.53	0.28	0.16	0.45	0.06	0.07	0.12
n2•k2	0.11	0.01	0.00	0.23	0.00	0.04	0.00
n <sub>3</sub> •k <sub>3</sub>	0.30	0.43	0.06	0.02	0.06	0.16	0.13

**Tabelle 4.4:** Bestimmbarkeit UB der Parameter innerhalb der Pareto-Lösung für Fall 2. Die Funktion  $UB = norm(F_{75} - F_{25})$  ist die Breite des normierten Intervalls, in dem die mittleren 50% Werte liegen. Die Werte kleiner als 0.25, die eine gute Bestimmbarkeit zeigen, wurden auf grauem Hintergrund dargestellt.

meter s ein klar sensitives Verhalten und dadurch deutlich bestimmte Parameterwerte, die anhand des Kolmogoroff-Smirnov-Tests zu einem Niveau von 0.01 signifikant sind. Für  $n_2 \cdot k_2$  ist das Signifikanzniveau von 0.15 eine deutliche Verbesserung relativ zu 0.53 in Fall 1.  $n_3 \cdot k_3$  hingegen zeigt wie in Fall 1 perfekt unbestimmte Verteilungen.

Die Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungsanalyse deuten darauf hin, dass ein großer Teil der Unsicherheit, die von der gegenseitigen Kompensierung in der Modellstruktur verursacht wird, durch die Integration des MODFLOW-Modells und die reduzierte Anzahl der frei variierten Parameter aufgehoben wird. Die GLUE-Ergebnisse scheinen dieser Aussage zu widersprechen. Um diesen Aspekt zu klären, wurden die einzelnen Sensitivitäten der Parameter berechnet (Abb. 4.25). Für die Berechnung wurde jeweils nur ein einziger Parameter verändert und die Änderungen der Zielfunktionen, die NS-Funktion berechnet mit einer täglichen und monatlichen Auflösung, dargestellt. In Abb. 4.25 werden auch die unteren Grenzwerte für die Zielfunktionen, die in der GLUE-Analyse für die Auswahl der behavioural Punkte benutzt wurden, mit angezeigt.

Von der drei Parametern bewirkt nur die Änderung von *s* Änderungen in den Werten der Zielfunktionen, die weit unter die GLUE-Grenze reichen. Dies erklärt auch das sehr gute Signifikanzniveau in der GLUE-Analyse. Für die anderen beiden Parameter ist die Spannweite der Änderungen in den Zielfunktionen nicht vernachlässigbar, aber kleiner als der Abstand zur GLUE-Grenze. Die Parameter sind



Abbildung 4.23: Sensitivität der Parameter nach der GLUE-Analyse für Fall 2 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg). Die Punkte entsprechen den behavioural Parametersätzen.



Abbildung 4.24: Parameterverteilungen (behavioural und non-behavioural) nach der GLUE-Analyse in Fall 2 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg).  $D_{KS}$  und  $\alpha_{KS}$  sind die Ergebnisse des Kolmogoroff-Smirnov-Tests zwischen den dargestellten Verteilungen.



Abbildung 4.25: Sensitivitätsanalyse der einzelnen Modellparameter in Fall 2 für das Teileinzugsgebiet 3 (Pegel Peissenberg).

nicht grundsätzlich unsensitiv, sondern verhalten sich so gegenüber der ausgewählten GLUE-Grenze. Wenn die Grenze höher gesetzt würde, würden sich auch die berechneten Signifikanzniveaus verbessern. Im extremsten Fall, bei dem die Grenze an das Niveau des globalen Optimums gesetzt würde, wäre die Unsicherheit gleich Null, weil nur ein Punkt als Ergebnis der GLUE-Analyse resultieren würde.

$\alpha_{\rm KS}$	Tezg 1	Tezg 2	Tezg 3	Tezg 4	Tezg 5	Tezg 6	Tezg 7
S	1.00	0.95	0.01	0.95	0.00	0.00	0.00
n <sub>2</sub> •k <sub>2</sub>	1.00	1.00	0.15	0.10	0.95	0.15	0.51
n <sub>3</sub> •k <sub>3</sub>	1.00	1.00	1.00	0.68	1.00	1.00	1.00

**Tabelle 4.5:** Zusammenfassung der Ergebnisse des Kolmogoroff-Smirnov-Tests nach der GLUE-Analyse für Fall 2. Die Werte des Signifikanzniveaus  $\alpha_{KS} < 0.5$ , die eine höhere Bestimmbarkeit der behavioural Punkte zeigen, wurden auf grauem Hintergrund dargestellt.

In Tab. 4.5 sind die Signfikanzniveaus für alle sieben Teileinzugsgebiete eingetragen. Der Anteil der Parameter, deren Signifikanzniveau kleiner als 0.50 ist, ist im Vergleich zu Fall 1 zwar von 24% auf 33% gestiegen, absolut gesehen bleibt er aber sehr klein.

# Zusammenfassung und Vergleich zwischen Fall 1 und Fall 2 bezüglich der Bestimmbarkeit der Modellparameter

Die beiden Diagramme, Abb. 4.26 und 4.27 zeigen die Verteilungen der Sickerraumparameter für die sieben Teileinzugsgebiete in den beiden untersuchten Modellversionen (Fall 1 und Fall 2), die aus der Mehrziel-Optimierungsanalyse, bzw. der GLUE-Analyse, resultieren. Die beiden Diagramme ergeben ein komplettes Bild der Ergebnisse und der Unterschiede zwischen den beiden Fällen.

Die Integration des MODFLOW-Modells in Fall 2 hat bei den Ergebnissen der Mehrziel-Optimierungsanalyse vor allem zu einer kleineren Unsicherheit des E3-Parameters, der die Schnelligkeit der vertikalen Strömung im Sickerraum darstellt, geführt. In der Modellstruktur Fall 1 sind E3 und E4 seriell geschaltete Systeme, die sich gegenseitig kompensieren. Die Festsetzung eines Teiles führt automatisch zu einer besseren Bestimmung des anderen Teiles. Ein anderer Effekt ist die Erhöhung des berechneten *s*-Wertes für die flussaufwärts liegenden Teileinzugsgebiete (3, 5, 6 und 7). Durch die Grundwasserunterströmung der Pegel verlieren diese Gebiete Wasser. Das wird durch größere Zwischenabflussmengen kompensiert. Das steilste Teileinzugsgebiet 4 (Pegel Oberammergau), in dem auch der Höhengradient in dem Talgrundwasserleiter am höchsten ist, hat ein spezielles Verhalten: Zuerst ist der  $n_3 \cdot k_3$ -Wert sehr niedrig, was die sehr schnellen Fließprozesse durch das steile Gebirge widerspiegelt. Eine weitere Folge ist, dass der Zwischenabfluss und der Basisabfluss praktisch gleich schnell sind. Dies führt zu einer größeren Unsicherheit von *s* und  $n_2 \cdot k_2$ .

Bei der GLUE-Analyse sind die Parameter in beiden Fällen über das gesamte Intervall gleichverteilt, was einer perfekten Unbestimmbarkeit einzelner Parameterwerte äquivalent ist. Die Ausnahme ist der Parameter s, der insbesondere in Fall 2 für die flussaufwärts liegenden Einzugsgebiete eine systematische Neigung für den oberen Teil des Intervalls aufweist.

Literaturstudien, die sich mit der Analyse der generalisierten Sensitivität befassen, dokumentieren häufig solche Ergebnisse, bei denen sehr schlecht bestimmte Parameter ausgewiesen werden: z.B. HARLIN und KUNG (1992), KUCZERA und MROCZ-KOWSKI (1998), UHLENBROOK et al. (1999), BEVEN (2000), WAGENER et al. (2001). Dafür gibt es zwei Erklärungen:



Abbildung 4.26: Vergleich zwischen Fall 1 und Fall 2 bezüglich der Bestimmbarkeit der Sickerraumparameter nach der Mehrziel-Optimierungsanalyse.

- Die Ergebnisse der Analyse sind von den Auswahlkriterien der behavioural Punkte stark abhängig, wenn die einzelnen Parameter eine niedrige Sensitivität haben. Zu niedrig gesetzte Akzeptanzgrenzen führen zur Auswahl zahlreicher Punkte aus dem gesamten Parameterraum, also zu Unbestimmbarkeit. Zu hoch gesetzte Grenzen können aber als Folge nicht repräsentative Stichproben haben. Die Ergebnisse werden also von der subjektiven Entscheidung der Auswahl der Akzeptanzgrenze wesentlich beeinflusst.
- Die Wechselbeziehungen zwischen den Modellparametern sind der Grund, warum einzelne Parameterwerte nicht eindeutig bestimmbar sind. Auch Modelle mit relativ wenigen Parametern können solche Kompensierungen nicht vermeiden, wie die Ergebnisse in Fall 2 beweisen. Wie solche



Abbildung 4.27: Vergleich zwischen Fall 1 und Fall 2 bezüglich der Bestimmbarkeit der Sickerraumparameter nach der GLUE-Analyse.

Wechselbeziehungen funktionieren, wurde für den  $n_i \cdot k_i$ -Fall in Abb. 4.17 beispielhaft gezeigt. Perfekt unsichere  $n_i$ - und  $k_i$ -Werte "verstecken" ein relativ gut bestimmtes  $n_i \cdot k_i$ -Produkt.

Weitere Untersuchungen sollten sich nicht auf den (vergeblichen) Versuch konzentrieren, eindeutig definierte einzelne Parameterwerte zu finden. Vielmehr ist die Aufstellung der strukturellen Beziehungen zwischen den Parametern wichtig, da nur diese Beziehungen tatsächlich bestimmbar sind. Ihre Analyse kann als Grundlage für die Bewertung der Modellstruktur dienen. Zusätzlich kann damit die Information präzise physikalisch interpretiert werden, die von den Daten und dem Modell unterstützt wird. Mit dieser Aufgabe befasst sich das nächste Kapitel 4.3.3.

Einzugsgebiet 1	, Pegel Fischen -	Mehrziel-Optimierung-	-Ergebnisse
-----------------	-------------------	-----------------------	-------------

Korrelationsmatrix K	S	n <sub>1</sub>	k 1	n <sub>2</sub>	k <sub>2</sub>	n <sub>3</sub>	k <sub>3</sub>	n <sub>4</sub>	k <sub>4</sub>	n <sub>5-1</sub>	k 5-1
s	1.000										
n 1	-0.113	1.000									
K 1	0.061	-0.227	1.000								
n 2	0.176	-0.030	0.074	1.000							
k <sub>2</sub>	-0.095	-0.057	0.109	-0.334	1.000						
n <sub>3</sub>	-0.275	0.092	0.171	0.023	0.036	1.000					
k <sub>3</sub>	0.051	0.066	-0.021	-0.039	0.039	-0.255	1.000				
n <sub>4</sub>	0.336	-0.031	0.072	0.098	0.034	-0.076	0.039	1.000			
k <sub>4</sub>	-0.018	-0.085	0.089	-0.016	0.038	0.113	-0.056	-0.371	1.000		
n <sub>5-1</sub>	0.247	-0.058	0.123	-0.030	0.063	0.082	0.043	0.077	-0.012	1.000	
к <sub>5-1</sub>	-0.216	0.105	-0.108	-0.051	-0.013	-0.046	-0.017	-0.038	-0.021	-0.622	1.000

Abbildung 4.28: Korrelationsmatrix in dem Pareto-Parameterraum für Fall 1 (lineare Speicherkaskade für das Grundwassermodul) für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen). Die Werte kleiner als -0.1 oder größer als 0.1 wurden grau hinterlegt.

# 4.3.3 Anwendung der Dimensionalitätsanalyse für die Bewertung der Modellstruktur

Die Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse für die Aufstellung der linearen Wechselbeziehungen zwischen den Modellparametern werden in diesem Kapitel vorgestellt. Als Schätzung für die intrinsische Dimensionalität des Modells kommen neben der Hauptkomponentenanalyse auch die fraktalen Dimensionen zum Einsatz.

#### Fall 1: lineare Speicherkaskade als Grundwassermodul

Die symmetrische Korrelationsmatrix  $K_n$ , berechnet für Tezg 1, Pegel Fischen, ist in Abb. 4.28 dargestellt. Sie weist ein deutliches multi-kolineares Verhalten auf: Jeder Parameter steht in kleinerem oder größerem Maße in Beziehung mit allen anderen. Die Anzahl der Parameter und die Komplexität der Matrix machen es schwer, auf Grund der visuellen Überprüfung der Werte, Schlüsse über die Modellstruktur zu ziehen. Dies kann aber durch die Berechnung der Eigenwerte  $\lambda_i$  und der Eigenvektoren  $\vec{v}_i$  der Korrelationsmatrix geschehen.

In Abb. 4.29 werden alle Eigenvektoren und Eigenwerte für den Pareto-Satz für Tezg 1 dargestellt. Die Berechnung erfolgt für drei unterschiedliche Parametersätze: die Ergebnisse der Mehrziel-Optimierungs-, der GLUE- und der GAN-Analyse. Für jeden Vektor  $\vec{v}_i$  werden die Beiwerte  $b_{ij}, j = 1, n$  der linearen Kombination, die den Vektor mit den Modellparametern verbindet, abgebildet. Die hohen Werte bezeichnen die wichtigsten Parameter für die Bestimmung des Vektors. Jeder Eigenvektor  $\vec{v}_i$ erklärt einen gewissen Anteil  $eV_i$  der Gesamtvarianz des Parameterfeldes, und zwar denjenigen Anteil, der vom relativen Eigenwert  $\lambda_i / \sum_{j=1}^n \lambda_j$  quantifiziert wird. Die Eigenvektoren sind absteigend nach ihren Eigenwerten angeordnet. So erklärt  $\vec{v}_1$  den größten Anteil der Gesamtvarianz,  $\vec{v}_n$  den kleinsten Anteil.

Die Mehrziel-Optimierungsanalyse- und die GAN-Sätze von Beiwerten  $b_{ij}$  haben einen relativ ähnlichen Aufbau, bei dem sich fast alle Parameter an der Konstruktion der ersten (und wichtigsten) Eigenvektoren beteiligen. Es ist ein Hinweis, dass sich in dem kleinen Raum um ein Optimum (GAN) aber auch um mehrere Optima

	-										
Eigenvektoren v <sub>i</sub>	V 1	V <sub>2</sub>	V <sub>3</sub>	V <sub>4</sub>	V <sub>5</sub>	V <sub>6</sub>	V <sub>7</sub>	V <sub>8</sub>	V <sub>9</sub>	V <sub>10</sub>	V 11
s	-0.48	-0.24	0.07	-0.02	0.21	-0.21	0.51	-0.15	-0.06	0.53	-0.22
n 1	0.20	-0.15	-0.05	0.44	-0.47	0.26	0.54	-0.17	0.34	-0.11	-0.03
k 1	-0.21	0.31	0.11	-0.51	0.10	0.50	0.06	-0.44	0.36	-0.06	-0.01
n 2	-0.16	-0.19	0.63	0.01	0.04	0.27	0.01	0.62	0.27	0.02	0.12
k2	0.02	0.25	-0.58	-0.31	-0.03	-0.02	0.28	0.57	0.28	0.12	-0.03
n 3	0.11	0.45	0.25	-0.11	-0.50	0.19	0.09	0.10	-0.51	0.35	-0.17
k <sub>3</sub>	-0.08	-0.23	-0.36	0.23	0.28	0.72	-0.10	0.10	-0.34	0.11	-0.07
n <sub>4</sub>	-0.33	-0.36	-0.07	-0.40	-0.33	0.00	0.22	0.06	-0.38	-0.53	0.10
k <sub>4</sub>	0.12	0.41	0.16	0.18	0.50	-0.02	0.52	0.07	-0.27	-0.39	0.11
n <sub>5-1</sub>	-0.51	0.29	-0.12	0.30	-0.17	-0.02	-0.07	-0.04	0.00	0.11	0.71
k 5-1	0.51	-0.29	0.04	-0.33	0.10	0.05	0.19	-0.10	-0.10	0.32	0.62
Eigenwerte (λ <sub>i</sub> )	1.94	1.63	1.36	1.20	1.18	0.91	0.79	0.62	0.58	0.43	0.36
norm. λ <sub>i</sub>	0.18	0.15	0.12	0.11	0.11	0.08	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03
kum. $eV_i$	0.18	0.32	0.45	0.56	0.67	0.75	0.82	0.88	0.93	0.97	1.00
Einzugsgebiet 1, Peg	gel Fische	en - GLl	JE-Ergeb	nisse							
Eigenvektoren v <sub>i</sub>	V 1	V2	V <sub>3</sub>	V <sub>4</sub>	V <sub>5</sub>	V <sub>6</sub>	V 7	V <sub>8</sub>	V <sub>9</sub>	V 10	V 11
s	0.00	0.00	0.02	-0.04	-0.07	-1.00	-0.02	0.02	0.01	-0.01	0.00
n 1	-0.01	0.00	-0.01	0.67	-0.21	-0.01	-0.43	-0.56	0.00	-0.01	0.00
k 1	0.00	0.00	0.00	-0.67	0.22	0.01	-0.42	-0.57	0.00	-0.01	0.00
n 2	-0.04	0.00	-0.70	-0.03	-0.05	0.00	0.01	0.00	0.71	-0.01	0.00
k <sub>2</sub>	0.04	0.00	0.70	0.02	0.05	0.02	-0.03	0.02	0.71	-0.01	0.01
n <sub>3</sub>	-0.39	-0.59	0.02	-0.01	-0.02	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.55	-0.45
k <sub>3</sub>	0.39	0.59	-0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.01	-0.01	-0.54	-0.45
n <sub>4</sub>	0.59	-0.39	-0.03	-0.01	-0.05	0.00	0.01	-0.01	0.01	0.45	-0.54
k <sub>4</sub>	-0.59	0.38	0.03	0.01	0.04	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.45	-0.54
n <sub>5-1</sub>	-0.03	0.05	0.08	-0.21	-0.67	0.04	0.56	-0.43	0.01	-0.01	0.00
k 5-1	0.01	-0.04	-0.04	0.22	0.67	-0.07	0.57	-0.42	0.02	-0.01	0.00
Eigenwerte (λ <sub>i</sub> )	1.42	1.42	1.36	1.22	1.21	1.00	0.79	0.78	0.64	0.58	0.58
norm. λ <sub>i</sub>	0.13	0.13	0.12	0.11	0.11	0.09	0.07	0.07	0.06	0.05	0.05
kum. $eV_i$	0.13	0.26	0.38	0.49	0.60	0.69	0.77	0.84	0.89	0.95	1.00
Einzugsgebiet 1, Peg	gel Fische	en - GAN	N-Ergebr	nisse							
Eigenvektoren v <sub>i</sub>	V 1	V <sub>2</sub>	V <sub>3</sub>	V4	V <sub>5</sub>	V <sub>6</sub>	V7	V <sub>8</sub>	V <sub>9</sub>	V <sub>10</sub>	V 11
s	-0.31	0.14	-0.40	0.05	0.26	-0.71	-0.11	-0.23	0.16	0.26	0.02
n 1	0.02	0.53	0.35	0.14	0.32	-0.02	0.18	0.15	0.57	-0.29	0.02
k 1	-0.21	-0.37	0.42	0.36	-0.03	-0.20	-0.31	-0.41	-0.01	-0.46	-0.01
n 2	-0.33	-0.02	0.17	-0.53	0.13	0.27	0.30	-0.61	0.12	0.11	-0.01
k2	0.19	0.05	-0.52	0.48	-0.06	0.43	0.01	-0.44	0.29	-0.02	-0.02
n 3	-0.32	-0.28	-0.27	-0.30	0.19	0.27	-0.50	0.32	0.40	-0.19	-0.06
k <sub>3</sub>	-0.16	0.21	0.02	-0.13	-0.88	-0.14	-0.08	-0.01	0.34	-0.01	-0.02
n 4	-0.35	-0.22	0.32	0.41	-0.01	0.18	0.06	0.19	0.21	0.66	-0.01
<i>k</i> <sub>4</sub>	0.34	0.32	0.27	-0.13	0.08	0.09	-0.70	-0.24	-0.03	0.36	-0.07
n <sub>5-1</sub>	-0.41	0.37	-0.06	0.14	0.00	0.15	-0.04	0.04	-0.35	-0.11	-0.71
k 5-1	0.42	-0.37	0.06	-0.12	0.01	-0.22	0.16	-0.03	0.32	0.08	-0.70
Eigenwerte (λ <sub>i</sub> )	3.69	2.11	1.50	1.26	0.98	0.55	0.39	0.26	0.17	0.08	0.01
norm. λ <sub>i</sub>	0.34	0.19	0.14	0.11	0.09	0.05	0.04	0.02	0.02	0.01	0.00
kum. eV <sub>i</sub>	0.34	0.53	0.66	0.78	0.87	0.92	0.95	0.98	0.99	1.00	1.00

Einzugsgebiet 1, Pegel Fischen - Mehrziel-Optimierung-Ergebnisse

Abbildung 4.29: Eigenvektoren und Eigenwerte im Parameterraum für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen).

(Mehrziel-Optimierung) fast alle Parameter gegenseitig kompensieren. Der GLUE-Satz weist hingegen ein klares Muster auf und erlaubt eine detailliertere Analyse, was für die größere Repräsentativität der GLUE-Analyse für das strukturelle Verhalten des Modells spricht. Die GLUE-Beiwerte zeigen eine symmetrische Struktur, in der zwei Tendenzen sichtbar werden. Erstens treten die beiden Parameter einer linearen Speicherkaskade immer gemeinsam auf, was noch einmal die enge Beziehung und die damit verbundene Wechselbeziehung zwischen  $n_i$  und  $k_i$  beweist. Zweitens lassen sich die einzelnen Modelleinheiten nach ihrem Anteil an der Gesamtvarianz anordnen. Die Einheiten  $E_3$  (vertikale Perkolation durch den Sickerraum) und  $E_4$  (Grundwasserströmung) sind eng miteinander verbunden und machen die ersten beiden und die letzten beiden Eigenvektoren aus. Die Änderung der Vorzeichen der Beiwerte (siehe die grau hinterlegten Werte in der GLUE-Tabelle in Abb. 4.29) zeigt, dass sich die beiden Einheiten wie zwei seriell geschaltete Module verhalten: Obwohl ihr Gesamtverhalten  $(v_{10}^{-1} \text{ und } v_{11}^{-1})$  gut bestimmt ist und eine kleinere Variabilität hat, variieren die einzelnen Werte  $(v_1^{-1} \text{ und } v_{21}^{-1})$  sehr stark und lassen sich nicht voneinander trennen.

Mit einer kleineren Variabilität, aber in der gleichen Art verbunden sind die Einheiten  $E_1$  (Oberflächenabfluss) und  $E_5$  (Flussrouting). s ist hingegen der einzige Modellparameter, der selbstständig eine unabhängige Hauptkomponente bestimmt, was wiederum dafür spricht, dass s der Parameter mit der größte Bestimmbarkeit ist.

Die resultierende Anordnung der Einheiten ( $E_3$  und  $E_4$ ,  $E_2$ ,  $E_1$  und  $E_5$ ) lässt sich auch mittels der spezifischen Geschwindigkeiten der modellierten Prozesse interpretieren. Das entspricht der Aufteilung in den drei Komponenten (Grundwasserabfluss, Zwischenabfluss und Direktabfluss). Zwischen Parametern von Modelleinheiten, deren abgebildete Prozesse ähnliche Geschwindigkeiten haben, bestehen Wechselbeziehungen. Die Wechselbeziehungen zwischen den langsameren Einheiten  $E_3$  und  $E_4$ sind stärker als zwischen den schnelleren  $E_1$  und  $E_5$ .

Nach der Berechnung der linearen Kombination zwischen den Modellparametern und den Eigenvektoren lassen sich die Werte der Eigenvektoren berechnen. In Abb. 4.30 und 4.31 werden die Pareto- und GLUE-Sätze nach ihrer Transformation in den normierten Hauptkomponenten dargestellt. Die Werte haben keine direkte physikalische Bedeutung, so dass ihr absoluter Wert nicht von Interesse ist. Durch ihre sehr gute Bestimmbarkeit beweisen sie aber, dass die in Kapitel 4.3.2 nachgewiesene Unsicherheit in der Bestimmung der Parameterwerte hauptsächlich die Kompensierung im Parameterraum als Ursache hatte. Schon die Entfernung der linearen Abhängigkeiten hat den größten Anteil dieser Unsicherheit eliminiert. Ihre Darstellung im Parameterraum (Abb. 4.32) bestätigt diese Ergebnisse.

Der nächste Schritt in der Analyse ist die Berechnung der intrinsischen Modelldimensionalität. Die Frage ist, wie viele unabhängige Parameter in der geprüften Modellstruktur notwendig sind, um die benutzten Messdaten zu beschreiben. In dem Kontext der Hauptkomponentenanalyse wird diese Frage beantwortet, indem man die Anzahl der notwendigen Hauptkomponenten bestimmt, die gemeinsam einen großen Teil (80% oder 90% sind übliche Werte, siehe JOLLIFFE 1986) der Gesamtvarianz erklären. Abb. 4.33 stellt die Methodik der Berechnung graphisch dar.

Tab. 4.6 fasst die Berechnungen von allen Teileinzugsgebieten für die drei Parametersätze für die Niveaus 80% und 90% zusammen. Zusätzlich zu den Ergebnissen der Hauptkomponentenanalyse wurden auch die zwei fraktalen Dimensionen (eine minimale und maximale Dimension werden angegeben, da der Algorithmus keine eindeutige Zahl liefert) eingetragen.

Von den Ergebnissen der Hauptkomponentenanalyse liefern die Pareto- und die GLUE-Sätze ähnlich hohe, die GAN-Sätze deutlich niedrigere Werte. So deuten die







Abbildung 4.31: Sensitivität der GLUE-Eigenvektoren für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen).



Abbildung 4.32: Darstellung der GLUE-Eigenvektoren für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen).

Mehrziel-Optimierungs- und die GLUE-Analyse auf eine Überparametrisierung von bis zu 2-3 zusätzlichen Parametern, die GAN-Analyse von bis zu 5-6 zusätzlichen Parametern hin. Der GAN-Parametersatz entspricht der kleinen Variation um ein lokales Optimum, deshalb ist es logisch, dass er eine kleinere Dimensionalität hat. Es ist allerdings interessant, dass die gemusterte allgemeinere GLUE-Variabilität zur gleichen Dimensionalität wie die nicht gemusterte lokale Pareto-Variabilität führt.



Abbildung 4.33: Bestimmung der Modelldimensionalität für Fall 1 für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen).

Toza	Anzahl	D <sub>GLUE</sub>		D <sub>Mehrziel-Optim.</sub>		D <sub>GAN</sub>		D <sub>Fraktal-Box-Count.</sub>		D <sub>Fraktal-Korrelation</sub>	
Tezy	Modellparam.	eV=80%	eV=90%	eV=80%	eV=90%	eV=80%	eV=90%	D <sub>min</sub>	D <sub>max</sub>	D <sub>min</sub>	D <sub>max</sub>
1	11	7.43	9.17	6.75	8.40	4.22	5.60	2.55	3.58	3.97	5.10
2	13	9.00	10.80	8.50	10.20	5.71	7.40	2.76	3.86	4.28	5.50
3	13	9.00	10.80	8.00	9.80	6.00	7.75	2.60	3.64	4.04	5.19
4	11	5.14	6.57	5.00	6.29	2.69	3.86	2.61	2.61	3.72	5.21
5	9	6.13	7.43	5.75	7.14	3.64	4.75	2.24	2.61	3.47	4.47
6	11	6.86	8.60	6.16	7.83	3.50	4.80	3.20	3.20	5.10	8.48
7	9	5.63	7.17	5.88	7.16	3.57	4.30	1.65	2.20	4.39	4.39

Tabelle 4.6: Zusammenfassung aller Schätzungen der Modelldimensionalität für Fall 1.

Die fraktalen Dimensionen sind deutlich niedriger als die linearen Schätzungen. Dies ist zuerst eine Bestätigung der hier aufgestellten Hypothese, dass sie als Maß für die intrinsische Dimensionalität des Modells dienen können. Die Box-Counting-Dimension  $\mathcal{D}_1$  ist systematisch niedriger als die Korrelation-Dimension  $\mathcal{D}_2$ , was ein direktes Ergebnis der Methodik der Berechnung ist. Sie deuten darauf hin, dass das Modell nur ca. 4 ( $\mathcal{D}_2$ ) oder 2-3 ( $\mathcal{D}_1$ ) unabhängige und perfekt bestimmte Parameter braucht, bzw. dass aus der Anpassung an die Messdaten nur so viele Parameter eindeutig bestimmt werden können.

# Fall 2: MODFLOW-Modell als Grundwassermodul

Die Festsetzung mehrerer Teile des Modells während der inversen Modellierung für Fall 2 sollte als Ergebnis eine kleinere Unsicherheit der Parameter haben. Dies wurde teilweise von der Analyse in Kap. 4.3.2 bestätigt. Eine weitere Bestätigung wird hier mit der Dimensionalitätsanalyse gesucht. Durch die Reduzierung der Anzahl der Freiheitsgrade sollte die Überparametrisierung des Modells sinken, d.h. das Verhältnis zwischen der Dimensionalität und der Parameteranzahl sollte größer werden.

Für Tezg 1, Pegel Fischen, wurden alle Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse für Fall 2 in Abb. 4.34 dokumentiert. Die Ergebnisse folgen den gleichen Muster wie im Fall 1. An der Korrelationsmatrix sind nur die hohen direkten Korrelationen zwischen  $n_i$  und  $k_i$  für jede Speicherkaskade zu bemerken. Die Eigenvektoren weisen ebenfalls nur für die GLUE-Analyse eine interpretierbare Struktur nach.

	999						
Korrelationsmatrix K	$s$ $n_2$ $k_2$ $n_3$ $k_3$	Eigenvektoren v <sub>i</sub>	V 1	V <sub>2</sub>	V <sub>3</sub>	V4	V <sub>5</sub>
s	1.000	s	-0.13	-0.51	0.81	0.14	0.20
n 2	-0.101 1.000	n <sub>2</sub>	0.62	0.34	0.14	0.01	0.69
k2	-0.001 -0.319 1.000	k2	-0.63	-0.11	-0.34	-0.02	0.69
n <sub>3</sub>	-0.003 -0.053 0.087 1.000	n <sub>3</sub>	-0.32	0.52	0.40	-0.68	-0.04
k 3	0.028 0.042 -0.091 -0.134 1.000	k <sub>3</sub>	0.31	-0.58	-0.22	-0.72	0.07
		Eigenwerte ( $\lambda_i$ )	1.40	1.10	0.97	0.86	0.66
		norm. λ <sub>i</sub>	0.28	0.22	0.19	0.17	0.13
		kum. eV,	0.28	0.50	0.69	0.87	1.00
Einzugsgebiet 1, Peg	gel Fischen - GLUE-Ergebnisse						
Korrelationsmatrix K	s $n_2$ $k_2$ $n_3$ $k_3$	Eigenvektoren v <sub>i</sub>	V <sub>1</sub>	V <sub>2</sub>	V <sub>3</sub>	V <sub>4</sub>	$V_5$
s	1.000	s	0.18	-0.03	-0.98	-0.03	-0.03
n 2	0.040 1.000	n 2	0.41	0.57	0.04	0.70	-0.12
k2	-0.030 -0.370 1.000	k2	-0.41	-0.57	-0.07	0.70	-0.10
n <sub>3</sub>	-0.050 -0.040 0.050 1.000	n <sub>3</sub>	-0.55	0.42	-0.14	0.11	0.70
k <sub>3</sub>	0.070 0.060 -0.050 -0.430 1.000	k <sub>3</sub>	0.57	-0.41	0.10	0.11	0.70
		Eigenwerte ( $\lambda_i$ )	1.52	1.30	0.98	0.63	0.57
		norm. λ <sub>i</sub>	0.30	0.26	0.20	0.13	0.11
		kum. eV,	0.30	0.56	0.76	0.89	1.00
Einzugsgebiet 1, Peg	gel Fischen - GAN-Ergebnisse						
Korrelationsmatrix K	$s$ $n_2$ $k_2$ $n_3$ $k_3$	Eigenvektoren v <sub>i</sub>	V 1	V <sub>2</sub>	V <sub>3</sub>	V <sub>4</sub>	$V_5$
s	1.000	s	0.57	-0.36	0.16	-0.54	0.47
n 2	-0.120 1.000	n 2	-0.11	0.61	-0.40	-0.67	-0.04
k2	-0.004 -0.070 1.000	k2	-0.28	0.02	0.79	-0.39	-0.37
n 3	0.331 -0.022 -0.207 1.000	n <sub>3</sub>	0.72	0.16	-0.03	0.08	-0.67
k <sub>3</sub>	0.045 -0.076 -0.112 -0.233 1.000	k <sub>3</sub>	-0.24	-0.68	-0.43	-0.31	-0.44
		Eigenwerte (λ <sub>i</sub> )	1.42	1.15	1.10	0.83	0.50
		norm. λ <sub>i</sub>	0.28	0.23	0.22	0.17	0.10
		kum. eV,	0.28	0.51	0.73	0.90	1.00
			-			-	

Einzugsgebiet 1, Pegel Fischen - Mehrziel-Optimierung-Ergebnisse

Abbildung 4.34: Eigenvektoren und Eigenwerte im Parameterraum für Fall 2 für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen). Die Berechnung erfolgte für drei Sätze von Parametern: das Ergebnis der Mehrziel-Optimierung, das Ergebnis der GLUE-Analyse, das Ergebnis der GAN-Analyse.

Die Struktur der hohen Beiwerte in der Beschreibung der GLUE-Eigenwerte ist bis auf einen Punkt mit der Struktur aus Fall 1 ähnlich. Auch hier ist eine gewisse Symmetrie zu sehen. s ist ebenfalls der einzige unabhängige Modellparameter. Die ersten zwei und die letzten zwei Hauptkomponenten werden von den Speicherkaskaden bestimmt. Der Unterschied ist, dass die letzten beiden Hauptkomponenten  $\vec{v_4}$ und  $\vec{v_5}$  von  $E_2$  und  $E_3$  allein bestimmt werden. Wie bereits erwähnt, haben die letzten Eigenvektoren den kleinsten Anteil an der Gesamtvarianz. Dass die Beziehungen  $0.70n_2 + 0.70k_2$  und  $0.70n_3 + 0.70k_3$  (Abb. 4.34), wenn sie nicht konstant ist, mindestens eine niedrige Variabilität zeigen, kann als ein Hinweis auf eine größere Bestimmbarkeit der Parameter angesehen werden. Die ersten Eigenvektoren  $\vec{v_1}$ und  $\vec{v_2}$  werden allerdings von den Parametern beider Einheiten bestimmt, was die Aussagekraft dieser Interpretation abschwächt.

Die Zusammenfassung der Berechnung der Modelldimensionalität wird in Tab. 4.7 dargestellt. Wie für Fall 1 liefern die Mehrziel-Optimierungs- und die GLUE-Analyse ähnlich große Zahlen, der Unterschied ist, dass jetzt auch die GAN-Analyse ähnliche Ergebnisse liefert. Im Fall 1 waren sie noch deutlich kleiner. Die Überparametrisierung, gemessen an dem 90%-Niveau, entspricht für alle drei Verfahren und alle sieben Teileinzugsgebiete etwa einem Parameter. Die fraktalen Dimensionen sind deutlich niedriger als die anderen Werte (2-3 zusätzliche Parameter).

Teza	Tezg Anzahl		D <sub>GLUE</sub>		D <sub>Mehrziel-Optim.</sub>		D <sub>GAN</sub>		Box-Count.	D <sub>Fraktal-Korrelation</sub>	
rezy	Modellparam.	eV=80%	eV=90%	eV=80%	eV=90%	eV=80%	eV=90%	D <sub>min</sub>	D <sub>max</sub>	D <sub>min</sub>	D <sub>max</sub>
1	5	3.08	4.09	3.58	4.23	3.39	4.00	1.50	1.80	3.59	3.59
2	5	3.08	4.09	3.57	4.09	3.11	3.97	1.50	1.80	2.00	3.59
3	5	3.43	4.17	3.44	4.09	3.66	4.25	1.50	1.80	2.57	3.59
4	5	3.08	4.09	3.15	3.92	3.67	3.97	1.50	1.80	2.57	3.59
5	5	3.46	4.09	3.75	4.38	3.73	4.35	1.50	1.80	2.57	3.59
6	5	3.08	4.09	3.31	4.09	3.03	3.68	1.50	1.80	2.57	3.59
7	5	3.50	4.17	3.41	4.00	3.24	3.93	1.50	1.80	2.57	3.59

Tabelle 4.7: Zusammenfassung aller Schätzungen der Modelldimensionalität für Fall 2.



Mehrziel-Optim. eV=0.9 \* GLUE eV=0.9 Gan eV=0.9 Fraktal Box-Count. v Fraktal Korrel.

Abbildung 4.35: Zusammenfassung aller Schätzungen der Modelldimensionalität für Fall 1 und Fall 2. D ist die Modelldimensionalität; n ist die Anzahl der Modellparameter. Die Werte sind für jedes Teileinzugsgebiet berechnet; die Linien dienen der Lesbarkeit.

# Zusammenfassung und Vergleich zwischen Fall 1 und Fall 2 bezüglich ihrer Dimensionalität

Um die gestellte Frage zu beantworten, ob die Einbindung des MODFLOW-Modells und die Reduzierung der Freiheitsgrade zu einer geringeren Überparametrisierung und damit zu besser bestimmten Modellparametern geführt hat, wurden in Abb. 4.35 die bereits tabellarisch vorgestellten Ergebnisse in graphischer Form dargestellt. Die Dimensionalitätswerte wurden mit der Anzahl der Parameter normiert, so dass jetzt die Überparametrisierung als Prozent von der Gesamtanzahl ausgedrückt wird.

Für die Mehrziel-Optimierung-, GLUE- und GAN-Verfahren wurde das Referenzniveau 90% benutzt, um die Dimensionalität des Modells zu berechnen. Wenn alle Modellparameter perfekt unabhängig wären, würde jeder von ihnen einen Anteil von 1/n an der Gesamtvarianz erklären, das heißt der Dimensionalitätswert wäre auch 0.9 (allerdings nur wenn man das Rauschen der Daten vernachlässigt). Deswegen wurde in Abb. 4.35 die 0.9-Referenzlinie gezeichnet.

Der wichtigste Unterschied zwischen den beiden Fällen ist in den GAN-Ergebnissen zu sehen. Das Verfahren, dass die Wechselbeziehungen zwischen Modellparametern im kleinen Raum um ein einziges Optimum misst, zeigt eine deutliche Verbesserung (eine Annährung der berechneten Werte an der 0.9-Referenzlinie) für Fall 2 im Vergleich zu Fall 1. Die direkteste gegenseitige Kompensierung der Parameterwerte, die in Fall 1 noch sehr aktiv ist, ist in Fall 2 eliminiert.

Obwohl weniger eindrucksvoll zeigen auch die GLUE- und Mehrziel-Optimierungs-Ergebnisse eine Verbesserung von Fall 1 zu Fall 2. Die Werte bleiben für alle Teileinzugsgebiete konstant über 0.8, für Tezg 5 sind sie sogar mit  $D_{GLUE} = 0.87$  sehr nah an dem perfekten 0.9-Wert. Das Problem des Tezg 4, das in Fall 1 hohe Überparametrisierungswerte zeigt, ist in Fall 2 gelöst. Von den fraktalen Dimensionalitätszahlen zeigt die Korrelation-Dimension  $\mathcal{D}_2$  eine Verbesserung, die Box-Counting-Dimension  $\mathcal{D}_1$  bleibt praktisch unverändert.

In Fall 1 hatte das Modell für Tezg 1 elf variierende Parameter und die Analyse hat einen Dimensionalitätswert zwischen 5.7 und 9.0 (Hauptkomponentenanalyse  $kum \ eV = 0.9$ ). In Fall 2 hat das Modell nur noch fünf variierende Parameter, eine direkte Übertragung der Ergebnisse von Fall 1 würde implizieren, dass es keine Überparametrisierung mehr geben darf. Trotzdem zeigt die gleiche Analyse Dimensionalitätswerte zwischen 4.0 und 4.2. Die Anzahl der variierenden Parameter wurde zwar reduziert, aber die Übriggebliebenen sind nicht die linear unabhängigen Hauptkomponenten, die von der Analyse verlangt werden, so dass die Überparametrisierung nicht vollständig eliminiert wurde.

Um die Bestimmbarkeit der Parameter zu verbessern, reicht es nicht aus, zufällig ausgewählte Parameter festzulegen. Man muss gezielt die Parameter bestimmen, die eine wichtige Rolle in den ersten Hauptkomponenten spielen. Ein Beispiel für das Funktionieren dieses Schemas ist die bessere Bestimmung der E3-Parameter nach der Festlegung der E4-Parameter durch die Integration des MODFLOW-Modells. Die Wechselbeziehungen zwischen E3 und E4 hatten in Fall 1 die ersten beiden Eigenvektoren dominiert.

Die Berechnung der fraktalen Dimensionen als Maß der intrinsischen Dimensionalität konnte den Aufwand nicht rechtfertigen. Der Algorithmus verlangt extrem viele Punkte, um zu einem stabilen Verhalten zu kommen. Man muss so viele Stichpunkte im Parameterraum erproben bis die Lücken innerhalb der *response surface* deutlich kleiner als die gesuchte signifikante Länge sind.

Neben der Berechnung eines Dimensionalitätswertes hat sich die Analyse der Beziehungen zwischen den Hauptkomponenten und den Modellparametern als ein wertvolles Werkzeug für das Verständnis der Wechselbeziehungen, die die Unsicherheit der Parameter bestimmen, bestätigt. Vor allem die beobachtete Trennung der Modellparameter nach der spezifischen Geschwindigkeit der Prozesse und die Tatsache, dass die Kompensierung zwischen Modelleinheiten mit der gleichen Geschwindigkeit stattfindet, können das Streben nach einer kleineren Unsicherheit in der Bestimmung der Parameterwerte unterstützen. Ein Verfahren wie die GLUE-Analyse, die eine repräsentativere Stichprobe des Parameterraumes liefert, ist dafür geeigneter als die Mehrziel-Optimierungs- oder die GAN-Analyse.

Man müsste die lineare Hauptkomponentenanalyse erweitern, um auch die nichtlinearen Wechselbeziehungen bestimmen zu können. Eine solche Analyse wäre mathematisch deutlich komplizierter, potentielle Verfahren sind allerdings vorhanden (RAIKO 2001). Ihre Anwendung hätte jedoch den Rahmen dieser Arbeit gesprengt.

# 4.4 Vergleich mit dem Niederschlag-Abfluss-Modell HBV

Das HBV-Modell (BERGSTRÖM 1995) wurde im Jahre 1972 vom Swedisch Meteorological and Hydrological Institute entwickelt. Es hat zahlreiche Anwendungen in den letzten dreißig Jahren gefunden und ist damit zu einem der klassischen Modelle der Hydrologie geworden (SINGH 1995). Die beiden erwähnten Literaturquellen beinhalten eine detaillierte Vorstellung des Modells, die Beschreibung wird hier nicht wiederholt. Am Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart wurde die Weiterentwicklung HBV-IWS konzipiert (EHRET 2003), die auch in dieser Arbeit für die Modellierung des Ammergebietes zum Einsatz kam.

Um die Vergleichbarkeit mit den übrigen Ergebnissen zu gewährleisten, sind die meisten Modellierungsdetails für das HBV-Modell gleichgeblieben: die Einteilung der Teileinzugsgebiete, die betrachtete Zeitperiode, die zulässigen Parameterintervalle, die Abfluss- und die Niederschlagsdaten. Nur die Temperaturdaten wurden neu generiert und mittels External Drift Kriging (EDK) von den Messstationen auf die Fläche interpoliert. EDK hat den Vorteil, dass es den Einfluss von zeitinvarianten Variablen als Zusatzinformation in die Interpolation einbeziehen kann. Das Verfahren wird daher oft angewandt (BÁRDOSSY et al. 2001). Die geodätische Höhe wurde hier als zeitinvariante Hilfsvariable verwendet.

Der Aufbau des HBV-Modells für das Ammergebiet wurde von GARZÓN (2005) realisiert und in dieser Arbeit weiterentwickelt. Das Modell hat eine partiell räumlichverteilte Struktur: Die Teileinzugsgebiete wurden in mehrere Zonen unterteilt, jede Zone entspricht einem bestimmten Höhenintervall. Die Berechnung der Abflussbildung (die Akkumulation und das Schmelzen der Schneeschicht, die Berechnung der Verdunstung, die Infiltration in den Boden) findet auf der Basis dieser Zonen statt. Die Abflusskonzentration (Abb. 4.36a.) wird dann aggregiert auf dem Teileinzugsgebiet berechnet.

Die Tabelle 4.8 fasst die Ergebnisse der Anwendung zusammen. Die Werte der Zielfunktionen sind etwas schlechter als bei dem gekoppelten Modellkomplex in Kap. 4.3. Vor allem die genauere räumliche Berechnung der Abflussbildung mit dem PROMET-Modell ist wahrscheinlich für die besseren Ergebnisse verantwortlich. Das Muster der Gütewerte bleibt aber gleich: Die Modellierung der flussaufwärts liegenden Gebiete erweist sich als deutlich schwieriger.

In Abb. 4.36b. werden die optimierten Werte für die Parameter der Abflusskonzentration abgebildet. Hohe K-Werte (mit der Einheit Zeit) deuten auf langsame Prozesse, kleine K-Werte auf schnelle Prozesse hin. Da Tezg 3, 4, 5 und 7 deutlich bergiger als Tezg 1, 2 und 6 sind, sollten die Werte auch erkennbar kleiner sein. Das ist teilweise für den Parameter  $K_0$  der Fall, für die andere Parameter lässt sich aber keine klare Aussage machen. Eine weitere physikalische Interpretation der Werte ist dementsprechend schwierig.

Um zu prüfen, ob eine solche physikalische Interpretation einzelner Werte zulässig ist, wurde die GLUE-Analyse durchgeführt. Für Tezg 1 wurden die ca. 10.000 ausgewählten behavioural Punkte (aus einer 200.000 großen Stichprobe) in Abb. 4.37 dargestellt. Die Abbildungen ähneln denen in Fall 1 und Fall 2. Mit einer Ausnahme  $(K_{perk}$  steuert den Fluss von dem ersten in den tiefen zweiten Speicher) belegen die Werte die gesamte Länge zulässiger Intervalle. Die Parameter des HBV-Modells verhalten sich also ähnlich unsensitiv wie bei dem in dieser Arbeit entwickelten Modell.

			۲	Kalibrierun	g		Validierung					
Pegel	Tezg	NS	NS <sub>dr</sub>	NS <sub>ndr</sub>	SAE	NS <sub>tr</sub>	NS	NS <sub>dr</sub>	NS <sub>ndr</sub>	SAE	NStr	
Fischen	1	0.90	0.71	0.94	0.92	0.97	0.98	0.97	0.97	0.93	0.97	
Weilheim	2	0.95	0.93	0.91	0.91	0.95	0.97	0.96	0.96	0.92	0.96	
Peissenberg	3	0.91	0.91	0.81	0.85	0.87	0.88	0.88	0.82	0.84	0.84	
Oberammergau	4	0.63	0.63	0.33	0.70	0.55	0.23	-0.19	0.30	0.62	0.28	
Unternogg	5	0.48	0.34	0.37	0.63	0.53	0.38	0.29	0.14	0.57	0.42	
Oberhausen*	6	0.65	0.48	0.54	0.76	0.63	0.78	0.63	0.70	0.78	0.76	
Obernach	7	0.73	0.67	0.60	0.60	0.69	0.41	0.32	0.48	0.49	0.37	

\* Für Tezg 6 wurde in der Kalibrationsperiode nur die Periode 01.11.1993-01.12.1997 betrachtet (Erklärung im Text).

Tabelle 4.8: Zusammenfassung der Ergebnisse des HBV-Modells: die optimalen Werte für die fünf Zielfunktionen (Mittelwerte über vier zeitliche Auflösungen - 1, 2, 15 und 30 Tage) für die sieben Teileinzugsgebiete, für die Kalibrierungs- und Validierungsperiode. Die Teileinzugsgebiete mit zufriedenstellenden Ergebnissen wurden auf einem grauen Hintegrund dargestellt.



$$Q_{sim} = g(t,m) \cdot (Q_0 + Q_1 + Q_2)$$

Abbildung 4.36: a. Struktur der Abflusskonzentration im HBV-IWS-Modell:  $K_0$ ,  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_{perk}$ ,  $S_1$ ,  $S_2$ , L, m sind kalibrierbare Modellparameter, A ist die Fläche des Teileinzugsgebietes. b. Die Werte der wichtigsten Parameter der Abflusskonzentration nach der Kalibrierung.

Die GLUE-Sätze wurden dann mit der Hauptkomponentenanalyse bewertet. In Abb. 4.38 wurden die Korrelationsmatrix, die Eigenvektoren und die Eigenwerte für Tezg 1 abgebildet. Das Verhältnis zwischen dem ersten und dem letzten Eigenwert ist ca. 3, ähnlich wie in Fall 1 und Fall 2, was auf einen ähnlichen Dimensionalitätswert hindeutet. Die Analyse der Beiwerte, die die Eigenvektoren mit den Modellparametern verbindet, zeigt allerdings Unterschiede zu den vorher vorgestellten Modellen.

In Fall 1 und Fall 2 ist ein klares Muster zu erkennen: Die Modellparameter sind nach der spezifischen Eigenschaften der Komponenten gruppiert. Die wichtigsten linearen Wechselbeziehungen fanden zwischen den ähnlich schnellen Komponenten statt. Ein solches Muster ist hier nicht mehr feststellbar. Wechselbeziehungen zwischen den langsamen  $K_2$  und  $K_{perk}$  und den schnellen  $K_{Musk}$  und  $K_0$  sind bei fast allen Eigenvektoren zu beobachten. Die Struktur der Abflusskonzentration in HBV ist der Struktur in Fall 1 und Fall 2 ähnlich: Drei parallel geschaltete Abflusskomponenten mit einer vertikale Verbindung ( $Q_{perk}$ ) zwischen dem Zwischenabfluss ( $Q_1$ ) und dem Basisabfluss ( $Q_2$ ).  $Q_0$ ,  $Q_1$  und  $Q_{perk}$  sind aber durch den ersten Speicher  $S_1$ 



Abbildung 4.37: Sensitivität der Parameter nach der GLUE-Analyse für das HBV-Modell für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen).

Korrelationsmatrix K	κ.	K.	κ.	K.	K	X	Figenvektoren v.	ν.	V-	V -	ν.	V -	V -
K	1 000	1.1	112	n perk	Musk	Musk	K	-0.30	-0.28	-0.73	0.21	0.01	-0.44
K <sub>0</sub>	1.000							-0.39	-0.20	-0.75	0.21	0.01	-0.44
K <sub>1</sub>	-0.049	1.000					K 1	0.39	0.14	-0.26	0.71	0.39	0.33
K <sub>2</sub>	-0.014	-0.004	1.000				K <sub>2</sub>	0.01	-0.82	0.45	0.33	0.06	-0.08
K <sub>perk</sub>	0.335	-0.294	0.031	1.000			K <sub>perk</sub>	-0.64	-0.12	-0.07	-0.01	0.03	0.76
K <sub>Musk</sub>	0.046	-0.099	-0.028	0.293	1.000		K <sub>Musk</sub>	-0.42	0.27	0.33	0.03	0.74	-0.31
X <sub>Musk</sub>	-0.045	0.058	0.026	-0.207	-0.119	1.000	X <sub>Musk</sub>	0.33	-0.38	-0.29	-0.59	0.54	0.17
							Eigenwerte (λ <sub>i</sub> )	1.68	1.02	0.98	0.93	0.87	0.51
							norm. λ <sub>i</sub>	0.28	0.17	0.16	0.16	0.15	0.08
							kum, eV,	0.28	0.45	0.61	0.77	0.92	1.00

Abbildung 4.38: Eigenvektoren und Eigenwerte im Parameterraum für das HBV-Modell für das Teileinzugsgebiet 1 (Pegel Fischen).



Abbildung 4.39: Schätzung der Modell-Dimensionalität: Vergleich Fall 1 - Fall 2 - HBV. Die Werte sind das Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse auf den GLUE-Parametersätzen mit einer erklärten Varianz von 90%.

miteinander verbunden. Die Art dieser Verbindung unterscheidet sich in der Funktionsweise vom PROMET-Sickermodell-MODFLOW-Komplex und ist wahrscheinlich für den Unterschied in der Struktur der Wechselbeziehungen verantwortlich.

Abb. 4.39 fasst die Werte der Modell-Dimensionalität nach der GLUE-Analyse für die drei untersuchten Modelle, Fall 1, Fall 2 und HBV, zusammen. Mit einer Ausnahme (Tezg 4 in Fall 1) sind sich die drei Gruppen von den Ergebnissen sehr ähnlich, obwohl die drei Modelle unterschiedliche Komponenten, Strukturen und Modellierungsstrategien haben. Die Interpretation des Dimensionalitätswertes, berechnet nach der Anwendung der Hauptkomponentenanalyse auf den GLUE-Parametersätzen, als ein Vergleichsindikator für das Verhalten des Modells und für seine Überparametrisierung konnte also ihren Nutzen für die Modellbewertung nicht bestätigen.

# 4.5 Zusammenfassung der Modellierungsergebnisse im Gebiet der Ammer

Die Antworten auf die Fragen, die am Anfang des Kapitels 4 gestellt wurden, werden hier zusammengefasst. Der Abschnitt folgt der Struktur, die für den Aufbau des Kapitels benutzt wurde: die Entwicklung des Modellkonzeptes und der Modellierungsstrategie, die Güte der Modellergebnisse, Analyse der Modellparameter. Ein Vergleich zwischen den Ergebnissen der Modellierung und der Ganglinienanalyse beendet das Kapitel.

### Entwicklung eines Modellkonzeptes und einer Modellierungsstrategie

Die erste Aufgabe in diesem Kapitel war die Entwicklung, Implementierung und Anwendung eines Modellkonzeptes, das die Modellierungslücke zwischen dem Bodenwasserhaushalts- und Grundwassermodell durch die explizite Betrachtung des Sickerraumes in einem eigenen Modul schließt. Die entwickelte Modellstruktur wird in Abb. 4.2 (Seite 86) dargestellt. Die Implementierung beachtet insbesondere die Modularität der Modellstruktur und des numerischen Programms, die mit dem Prinzip eines gekoppelten hydrologischen Modellkomplexes konsistent ist. Das gibt dem Modell eine hohe Anpassungsfähigkeit, so dass Änderungen und Erweiterungen problemlos möglich sind.

Das numerische Programm enthält Werkzeuge, die dem Stand der Technik entsprechen und eine ausführliche Bewertung der Modellergebnisse und der Modellparameter ermöglichen. Dazu gehören ein Mehrziel-Optimierungsalgorithmus, die GLUE-Methode und die lineare Hauptkomponentenanalyse. Sowohl das Modell als auch die implementierte Methodik konnten mit einem vertretbaren Verbrauch von CPU-Leistung erfolgreich auf das Gebiet der Ammer angewandt werden.

Zwei Modellversionen wurden benutzt: Fall 1, mit einer linearen Speicherkaskade als Grundwassermodul und Fall 2, mit dem MODFLOW-Modell als Grundwassermodul. Zusätzlich wurde ein HBV-Modell für das Gebiet der Ammer aufgebaut. Die drei Modelle sind durch verschiedene Grade der Konzeptualisierung charakterisiert und erlauben die Ermittlung der Vor- und Nachteile eines möglichst physikalischbasierten Ansatzes in der hydrologischen Modellierung.

### Güte der Modellergebnisse und Schätzung ihrer strukturellen Unsicherheit

In beiden Modellversionen waren die Ergebnisse in der Mehrheit der Teileinzugsgebiete gut bis sehr gut. Die Modelle konnen alle Teile der Abflussganglinien erfolgreich nachbilden. Die Version Fall 2 berechnet zusätzlich den Grundwasserspiegel und erzielt eine gute Anpassung an die gemessenen Grundwasserstände.

Die Modellierung der alpinen flussaufwärts liegenden Teileinzugsgebiete ist teilweise von fehlerhaften Ergebnissen des PROMET-Modells negativ beeinflusst. Durch die Integration des MODFLOW-Modells mit festgesetzten Parametern wurde ebenfalls eine leichte Verschlechterung der Ergebnisse beobachtet. Die Behandlung der physikalischen Prozesse in PROMET und MODFLOW entspricht sicherlich mehr der Realität als bei den einfachen Ansätzen eines rein konzeptionellen Modells. Die Parametrisierung beider Modelle basiert auf Feldmessungen und wurde dann durch eine sektorale Kalibrierung verbessert, so dass sie als stand-alone Modelle die gestellten Anforderungen erfüllen konnten. Trotzdem führte ihre Kopplung in einem integrativen Komplex zu systematischen Abweichungen in der Nachbildung der Messdaten. Zwei Erkenntnisse lassen sich davon ableiten:

- Kalibrierte Parameter können als effektive Werte nur im Kontext ihrer Bestimmung gültig sein. Sobald sie aus diesem Kontext genommen werden, ist ihre Validität nicht mehr gewährleistet. Die validierte Berechnung einer bestimmten Variable kann also nur begrenzt als Argument für die Bewertung der Güte anderer nicht validierter berechneter Variablen benutzt werden.
- Ein hydrologischer Modellkomplex muss integrativ kalibriert werden. Die Einschränkung auf Anfangswerte, die auf Feldmessungen basieren und anschließend durch sektorale Kalibrierung verbessert werden, führt zu nicht optimalen Ergebnissen des Gesamtmodells.

Die Mehrziel-Optimierungs- und die GLUE-Analyse liefern einen Satz von Modellergebnissen, die durch eine gleich gute Modellgüte (relativ zu den Messdaten) charakterisiert sind. Die Variation der Werte innerhalb dieses Satzes ist ein Maß für die strukturelle Unsicherheit des Modells. Die Ergebnisse der getesteten Modelle haben gezeigt, dass eine Verschlechterung der Modell-Güte zu einer größeren Streuung der berechneten Werte führt:

• Eine Verschlechterung in der Modellgüte führt in der Regel auch zu einer Steigerung der strukturellen Unsicherheit der Modellergebnisse.

#### Analyse der Modellparameter und ihrer Bestimmbarkeit

Die Verteilung der Parameterwerte innerhalb der Mehrziel-Optimierungs- und GLUE-Sätze gab Aufschluss über die Unsicherheit der Bestimmung dieser Parameter. Die weitere Analyse der Sätze mittels Verfahren wie der Hauptkomponentenanalyse erklärte die Gründe der Unsicherheit und beantwortete die Frage, ob physikalischinterpretierbare Parameterwerte durch Verfahren der inversen Kalibrierung eindeutig bestimmt werden können.

Die Mehrziel-Optimierungsanalyse zeigt in Fall 1 noch relativ schlecht definierte Parameterwerte. Durch die Integrierung des MODFLOW-Modells und die Reduzierung der Anzahl der angepassten Parameter konnte diese Unsicherheit signifikant reduziert werden. Insbesondere die Parameter der Modelleinheit E3 (vertikale Strömung durch den Sickerraum) profitieren am meisten von der MODFLOW-Integration. Die berechneten E2-Parameter (Zwischenabfluss) deuten in beiden Fällen auf die sehr schnellen Fließvorgänge im Ammergebiet hin. Der Separationsparameter s zwischen E2 und E3 zeigt einen räumlichen Trend: der Anteil des Zwischenabflusses ist in den alpinen Teileinzugsgebieten deutlich größer. Die Erklärung dafür scheint aber in der Art und Weise zu liegen, wie die Unterströmung der Pegel durch den Flussaquifer in den beiden Modellversionen betrachtet wurde.

Die GLUE-Analyse weist aber auf perfekt unbestimmte einzelne Parameterwerte hin. Innerhalb der zahlreichen Punkte, die zu den GLUE-Sätzen gehören, befinden sich für jeden Parameter Werte, die über die gesamte Länge der zulässigen Intervalle gleichverteilt sind. Die Integration des MODFLOW-Modells und die Einschränkung des Modells durch zusätzliche Messdaten (Grundwasserspiegelwerte) konnten dieses Verhalten nicht wesentlich ändern. Obwohl von den subjektiv ausgesuchten Akzeptanzgrenzen für die Parametersätze abhängig, zeigt die GLUE-Analyse, dass das Modell in beiden Versionen von einer großen strukturellen Unsicherheit behaftet ist. Der Vergleich mit dem HBV-Modell zeigt, dass dies eine allgemeine Eigenschaft hydrologischer Modelle ist:

• Die Bestimmung einzelner Parameterwerte der hydrologischen Modelle anhand inverser Modellierung ist von einer sehr großen Unsicherheit behaftet und führt dazu, dass eine physikalische Interpretation dieser Werte nicht begründet werden kann. Diese Aussage gilt für hydrologische Modelle, unabhängig ihres Grades an Konzeptionalisierung. Ob das Modell mehr oder weniger physikalischbasiert ist, spielt für diese Frage nur dann eine Rolle, wenn neue gemessene Daten in der Kalibrierung benutzt werden können.

Durch die Anwendung der Hauptkomponentenanalyse ließen sich Korrelationen und Abhängigkeiten in der Variation der Werte innerhalb der unterschiedlichen Gruppen von Parametersätzen identifizieren. Darauf basierend bestimmte man die linear unabhängigen Hauptkomponenten, die mathematisch die Wechselbeziehungen zwischen den Modellparametern erläutern. Die Werte der Hauptkomponenten haben eine kleine Unsicherheit. Dies zeigt:

- Die Ursache für die Unbestimmbarkeit einzelner Parameterwerte liegt in den strukturspezifischen Wechselbeziehungen zwischen den Modellparametern. Die Analyse dieser Beziehungen führt zwar nicht zu einem besseren Verständnis der physikalischen Prozessen, aber zu einem besseren Verständnis des Modellverhaltens.
- Auch in Modellen mit wenigen Parametern kompensieren sich Parameterwerte gegenseitig. Das Muster der Kompensierung ist von der Modellstruktur vorgegeben, so dass es zwischen verschiedenen Modellen stark variiert.

Für die Untersuchung der Wechselbeziehungen und der strukturellen Unsicherheit der Parameter ist eine generalisierte Sensitivitätsanalyse wie GLUE deutlich besser



Abbildung 4.40: Vergleich zwischen Modellierung- und Ganglinienanalyse-Ergebnissen in der Bestimmung der Grundwasser- und Sickerwasseranteile.

geeignet als andere Verfahren, die eine kleinere Parameterraum-Stichprobe prüfen. Man muss aber dabei die Subjektivität der Auswahl der Akzeptanzgrenzen für die getesteten Parametersätze beachten:

• Die Akzeptanzgrenze in der GLUE-Analyse sollte an die Sensitivität einzelner Parameter angepasst werden, sonst droht die Gefahr einer niedrigen Repräsentativität der Stichprobe und einer Unter- oder Überschätzung der strukturellen Unsicherheit.

# Bestimmung des Grundwasserabfluss- und Zwischenabflussanteiles: Vergleich mit den Ergebnissen der Ganglinienanalyse

Abb. 4.40 stellt die Zusammenfassung der unterschiedlichen Schätzungen der Grundwasser- und Sickerwasseranteile in den sieben Teileinzugsgebieten des Ammergebietes dar. Dafür wurden die Ergebnisse der Ganglinienanalyseverfahren und der drei Modelle (Fall 1, Fall 2 und HBV) miteinander verglichen. Für jedes Modell wurden die 25%- und die 75%-Quantile der GLUE-Lösung benutzt.

Die Ergebnisse des HBV-Modells schätzen einen deutlich größeren Zwischenabfluss als die anderen beiden Modellversionen: im Mittel zwischen 50% und 75%, verglichen mit 18% bis 41% für Fall 1 und 16% bis 36% für Fall 2. Für den Grundwasserabfluss sind die Zahlen: 15% bis 38% für HBV, 51% bis 75% für Fall 1, 56% bis 76% für Fall 2. Zwischen Fall 1 und Fall 2 lässt sich kein systematischer Unterschied feststellen: die Unsicherheit innerhalb der Lösung ist vergleichbar oder sogar größer als der Unterschied zwischen den Lösungen. Die Ergebnisse der Ganglinienseparation liegen mit einer Ausnahme (Tezg 7) im gleichen Bereich wie die Modell-Lösungen. Die Hauptaussage ist aber:

• Auf Grund der strukturellen Unsicherheit der Modelle und der fehlenden direkten Messdaten lassen sich interne Modellergebnisse, wie die Separation zwischen Grundwasser- und Zwischenabfluss, nicht durch inverse Modellierung eindeutig bestimmen. Unterschiedliche Modellstrukturen führen zu unterschiedlichen Ergebnissen, deren Validität ohne zusätzliche Informationen nicht bewertet werden kann.