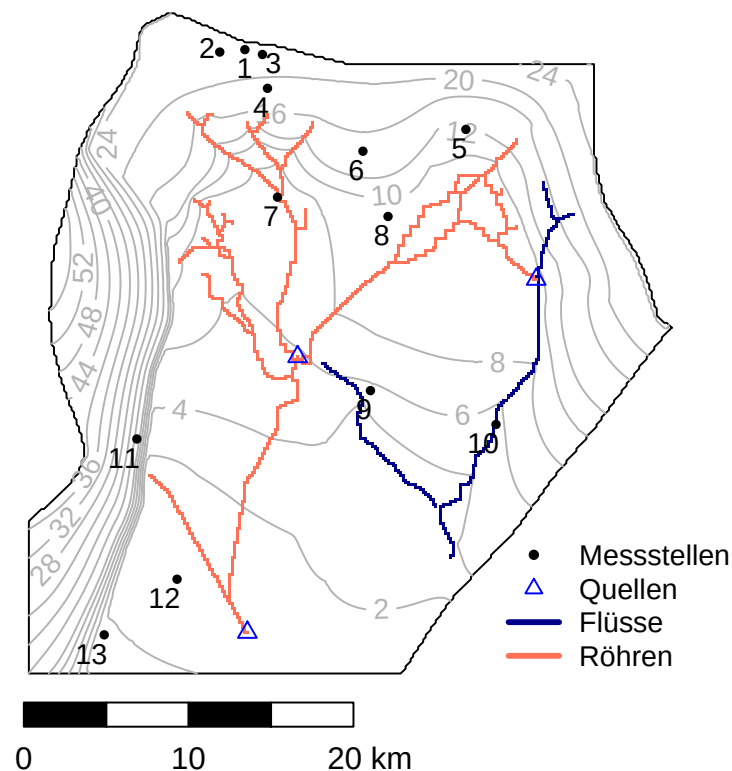


Benjamin Schima

Räumlich verteilte Modellierung eines Karstaquifers in Florida zur Abschätzung der Grundwasserressourcen



Masterarbeit unter Leitung von Dr. Andreas Hartmann
Freiburg, 22. September 2017

Professur für Hydrologie
der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i. Br.

Benjamin Schima
Matrikelnummer: 3501015

**Räumlich verteilte Modellierung eines
Karstaquifers in Florida zur
Abschätzung der
Grundwasserressourcen**

Referent: Dr. Andreas Hartmann

Korreferent: apl. Prof. Dr. Jens Lange

Masterarbeit unter Leitung von Dr. Andreas Hartmann
Freiburg, 22. September 2017

Vorwort

Ich bin sehr dankbar für die wertvolle Unterstützung, die mir bei der Anfertigung dieser Arbeit zuteil wurde. An erster Stelle möchte ich meinem Betreuer Dr. Andreas Hartmann für seinen unermüdlichen Rat danken. In vielen Diskussionen hat er mich immer wieder motiviert und in die richtige Richtung gelenkt. Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. Thomas Reimann für die wertvolle Unterstützung bei der Bedienung des Modells und das hilfreiche Feedback. Herrn Prof. Dr. Jens Lange möchte ich meinen herzlichen Dank für die freundliche Übernahme der Zweitkorrektur aussprechen.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis	V
Zusammenfassung	1
1 Einleitung	2
1.1 Hintergrund	2
1.2 Karsthydrogeologie	2
1.2.1 Chemische Verwitterungsprozesse und typische Landformen	3
1.2.2 Hydrogeologische Eigenschaften	4
1.2.3 Erforschung der Wasserressourcen in Karstgebieten	6
1.3 Hydrologische Modellierung von Karstsystemen	7
1.3.1 Modellarten	7
1.3.2 Sensitivitätsanalyse in der Modellierung	12
1.3.3 Sensitivitätsanalyse mit dem räumlich verteilten Modell MODFLOW- CFP (Modus 1)	14
1.4 Forschungslücke	15
2 Zielsetzung der Arbeit	16
3 Methoden und Vorgehensweise	17
3.1 Untersuchungsgebiet	17
3.1.1 Geographie und Morphologie	17
3.1.2 Hydrogeologie	17
3.2 Verwendetes Modell: MODFLOW-CFP Modus 1	19
3.3 Parametrisierung des Modells und Datengrundlage	22
3.3.1 Allgemeine Anmerkungen	22
3.3.2 Räumliche Diskretisierung des Gebiets	23

3.3.3	Zelleigenschaften	23
3.3.4	Randbedingungen	24
3.3.5	Röhrennetzwerk	25
3.3.6	Lösungsalgorithmus	25
3.3.7	Vergleich mit dem Original-Modell	26
3.4	Sensitivitätsanalyse	27
3.4.1	Methodenbeschreibung	27
3.4.2	Räumlich einheitliche Parametervariation	33
3.4.3	Räumlich verteilte Parametervariation	35
4	Ergebnisse	37
4.1	Parametrisierung des Modells	37
4.2	Sensitivitätsanalyse	39
4.2.1	Räumlich einheitliche Parametervariation	39
4.2.2	Räumlich verteilte Parametervariation	47
5	Diskussion	55
5.1	Parametrisierung des Modells	55
5.2	Sensitivitätsanalyse mit räumlich einheitlicher Parametervariation	56
5.2.1	Unsicherheit	56
5.2.2	Interpretation der Ergebnisse	58
5.2.3	Folgerungen	62
5.3	Sensitivitätsanalyse mit räumlich verteilter Parametervariation	63
5.3.1	Unsicherheit	63
5.3.2	Interpretation der Ergebnisse	64
5.3.3	Folgerungen	67
6	Schlussfolgerungen und Ausblick	68
	Literaturverzeichnis	70
	Anhang	77
	Zusätzliches Material	78
	Ehrenwörtliche Erklärung	81

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Darstellung verschiedener Bereiche und Prozesse in Karstgebieten	4
1.2	Konzepte zur Modellierung von Grundwasser in Karstgebieten	10
1.3	Konzeptmodell Varkarst	11
1.4	Grundlegendes Schema einer Sensitivitätsanalyse	13
3.1	Karte des Modellgebiets (aus Davis et al., 2010)	18
3.2	Konzept der Röhreneinbindung in MODFLOW-CFP	20
3.3	Beispielabbildung <i>Name file</i>	22
3.4	Arbeitsablauf der Sensitivitätsanalyse	28
3.5	Stichprobendesign	28
3.6	Modellgüte vs. K_f in einem Probelauf	34
3.7	Aufteilung des Modellgebiets in Bereiche	36
4.1	Vergleich der Standrohrspiegelhöhen mit dem Originalmodell	38
4.2	Übersichtskarte: Vergleich der Simulation mit Beobachtungswerten	38
4.3	Häufigkeitsverteilung der gültigen Parameter	40
4.4	Streudiagramme der Modellgüte abhängig von den Parameterwerten	41
4.5	Sensitivitätsindizes bezogen auf verschiedene Zielgrößen	42
4.6	Standardabweichung/Varianzkoeffizient der Elementary Effects	43
4.7	Konvergenz der Sensitivitätsindizes	45
4.8	Konvergenz der Parameter-Rangfolge	45
4.9	Einfluss einzelner Quellen	46
4.10	Einfluss einzelner Messpunkte	47
4.11	Räumlich verteilt: Häufigkeitsverteilung der gültigen Parameter	48
4.12	Räumlich verteilt: Sensitivitätsindizes bezogen auf verschiedene Zielgrößen	48
4.13	Übersichtskarte: Sensitivitätsindizes von K_f und RCH	50

4.14	Räumlich verteilt: Standardabweichung/Varianzkoeffizient der Elementary Effects	51
4.15	Räumlich verteilt: Konvergenz der Parameter-Rangfolge	52
4.16	Räumlich verteilt: Einfluss einzelner Messpunkte	53
4.17	Räumlich verteilt: Einfluss einzelner Quellen	54
4.18	Zusammenhang zwischen Sensitivitätsindex und Bereichsgröße	54
A1	Anhang: Histogramm der ungültigen Läufe der räumlich verteilten Analyse für die restlichen Parameter	78
A2	Anhang: Streudiagramme räumlich für K_f und RCH	79

Tabellenverzeichnis

3.1	Parameter des Lösungsalgorithmus beim der anfänglichen Parametrisierung	26
3.2	Parameter des Lösungsalgorithmus bei der Sensitivitätsanalyse	30
3.3	Konvergenzkriterien der Sensitivitätsanalyse	30
3.4	Parameterübersicht Sensitivitätsanalyse	35
4.1	Vergleich Quellabflüsse Schima-Gallegos	37

Zusammenfassung

Grundwasser ist eine wichtige Ressource für die Trinkwasserversorgung und landwirtschaftliche Bewässerung. An vielen Orten weltweit stammt es aus Karstaquiferen, die durch ihre starke Lösungsverwitterung besondere hydrologische Eigenschaften aufweisen. In räumlich verteilten Grundwassermodellen wird dies durch die Modellierung von Röhrensystemen neben der porösen Gesteinsmatrix berücksichtigt.

Einige Studien haben bereits die Eignung von MODFLOW-CFP für die Modellierung von Karstsystemen gezeigt. Lokale Sensitivitätsanalysen haben ergeben, dass der Röhrendurchmesser und der Austauschparameter zwischen Röhren und Matrix einflussreiche Parameter sind. Die Woodville Karst Plain in Florida (USA) war bereits Gegenstand eingehender Untersuchungen, und ein kalibriertes Grundwassermodell der Gegend ist verfügbar. Das Ziel dieser Studie ist es, eine globale Sensitivitätsanalyse mit räumlich aufgeteilten Parametern durchzuführen, um eine Rangfolge der sensitivsten Parameter aufzustellen.

Ohne räumliche Aufteilung ist die Gesamt-Modellgüte am sensitivsten auf die hydraulische Leitfähigkeit und die Grundwasserneubildung. Bei der Aufteilung dieser Parameter in vier Bereiche sind deutliche räumliche Unterschiede zu erkennen. Drei Bereiche der hydraulischen Leitfähigkeit sind die sensitivsten Faktoren, es folgen Randbedingungen zur Repräsentation eines Flusses und die Standrohrspiegelhöhen an den Modellrändern. Erst auf den folgenden Plätzen reihen sich die spezifischen Parameter der Karströhren ein. Die räumlichen Bereiche der Grundwasserneubildung sind deutlich weniger einflussreich als bei der Untersuchung ohne Aufteilung. Weiterhin bestehen bei den meisten Parametern große Unterschiede zwischen den Sensitivitäten von Standrohrspiegelhöhen und Quellabflüssen.

Die Untersuchung zeigt, dass eine ausführliche Sensitivitätsanalyse, die räumliche Muster der Eingangsparameter berücksichtigt, ein präziseres Bild über die Parameteridentifizierbarkeit liefern kann als eine räumlich einheitliche Analyse. Das Vorgehen ermöglicht es, die Aussagekraft der kalibrierten Parameter zu bewerten und so die Modelloptimierung effizienter voranzutreiben.

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Hintergrund

Grundwasser ist eine wichtige Ressource für die Trinkwasserversorgung und landwirtschaftliche Bewässerung. Weltweit wird auf 39 % der bewässerten Fläche Grundwasser genutzt, und sowohl der Anteil als auch die absolute Menge des entnommenen Grundwassers steigen (Siebert et al., 2010). In vielen Aquiferen übersteigt die Entnahme die Neubildungsrate (Gleeson et al., 2012). Ein nicht unerheblicher Teil des genutzten Grundwassers stammt aus Karstgebieten, bis zu ein Viertel der Weltbevölkerung ist davon abhängig (Ford und Williams, 2007). Für ein erfolgreiches Wassermanagement ist es daher wichtig, die ablaufenden Prozesse zu verstehen, damit genaue Aussagen über die nutzbaren Wassermengen getroffen werden können. Die numerischen Modelle, mit denen die Prozesse im Untergrund simuliert werden, werden ständig verbessert. Ein Ansatz, um herauszufinden, wo Verbesserungspotential besteht, ist die Sensitivitätsanalyse und wird in dieser Arbeit angewandt.

1.2 Karsthydrogeologie

Der Begriff „Karst“ wurde ursprünglich aus der slowenischen Sprache abgeleitet und bezeichnet eine spezielle Landform, die sich in Gegenden mit - neben anderen Eigenschaften - besonders löslichen Gesteinsarten wie Kalkstein oder Gips bildet (Ford und Williams, 2007). Die chemischen Grundlagen dazu werden in Kapitel 1.2.1 näher erläutert. Durch Verkarstung entstehen die typischen Formen wie Höhlen, Schlucklöcher oder große Quellen (ebenfalls in Kapitel 1.2.1). Der Treiber dieses Prozesses ist der unterirdische Teil des hydrologischen Kreislaufs, welcher umgekehrt stark von Karstphänomenen beein-

flusst wird und spezielle Eigenschaften aufweist (Ford und Williams, 2007), dazu mehr in Kapitel 1.2.2. Kapitel 1.2.3 beschreibt die besondere Erforschung von Karstgebieten.

1.2.1 Chemische Verwitterungsprozesse und typische Landformen

Die Morphologie von Karbonatgesteinen unterscheidet sich durch Lösungsprozesse deutlich von anderen Gesteinen. Die Kohlensäureverwitterung bedingt ein Auflösen des Gesteins im Wasser. Damit dieser Prozess stattfindet, muss sich in der Luft oder im Boden vorhandenes Kohlendioxid (CO_2) im Wasser lösen. Zusammen mit den Wassermolekülen (H_2O) verbindet sich ein Teil des Kohlendioxids zu Kohlensäure (H_2CO_3), welche teilweise zu H^+ und HCO_3^- dissoziiert. Calcit-Mineralen (CaCO_3), welche zum Beispiel in Kalkstein vorkommen, werden dann durch die Kohlensäure in folgender Reaktion gelöst (Zepp, 2014, S.94):



Dadurch können sich in Gebieten mit Karbonatgesteinen große unterirdische Hohlräume und auch oberirdisch spezielle Landschaftsformen ausbilden (Zepp, 2014). Hydrogeologen bezeichnen so entstandene Hohlformen oder Röhren als tertiäre Porosität. Andere Hohlräume im Gestein werden meist der Matrix zugeordnet und entstehen vor der Verkarstung, entweder (primär) während der Gesteinsentstehung oder nachträglich (sekundär) durch tektonische Prozesse in Form von Rissen oder Frakturen (Ford und Williams, 2007; Hartmann et al., 2014). Neben vielen weiteren Klassifizierungen können Karstformen in Exokarst (an der Erdoberfläche), Epikarst (direkt unter der Oberfläche) und Endokarst (im tieferen Untergrund) eingeteilt werden. Der Epikarst ist dabei die oberste Schicht von Karstgestein, die eine wichtige Rolle als Wasserspeicher und bei der weiteren Verteilung des Wasser spielt. Die Durchlässigkeit ist höher und die Hohlräume sind gleichmäßiger verteilt als im darunter liegenden Bereich des Endokarst (Goldscheider und Andreo, 2007). Ein Konzeptmodell mit verschiedenen Prozessen zeigt Abbildung 1.1.

Einige Beispiele für Karst-Landformen sind Karren, Dolinen und Poljen. Karren sind kleinräumige, konkave Lösungsformen, die auf hohe Grundwasserneubildung und ausgeprägten Epikarst hindeuten. Dolinen sind mittelgroße, rundliche Vertiefungen, die beispielsweise durch Einsturz oder Lösung entstehen. Größere Mulden werden Poljen genannt, die Dimensionen eines Tales annehmen können und oft durch größere geologische Strukturen bedingt sind (Goldscheider und Andreo, 2007). Anhand der oberflächlich auftretenden Karstmerkmale können viele Informationen über das gesamte System gewonnen werden, jedoch kann nicht pauschal auf Eigenschaften der unterirdischen Bereiche

geschlossen werden, da sich die Karstentwicklung oftmals zeitlich verändert und zudem durch andere Prozesse überprägt wird. Die verlässlichsten Indikatoren für aktive Karstsysteme sind Formen, durch die der Abfluss gebündelt wird, wie Dolinen oder große Quellen ([Goldscheider und Andreo, 2007](#)).

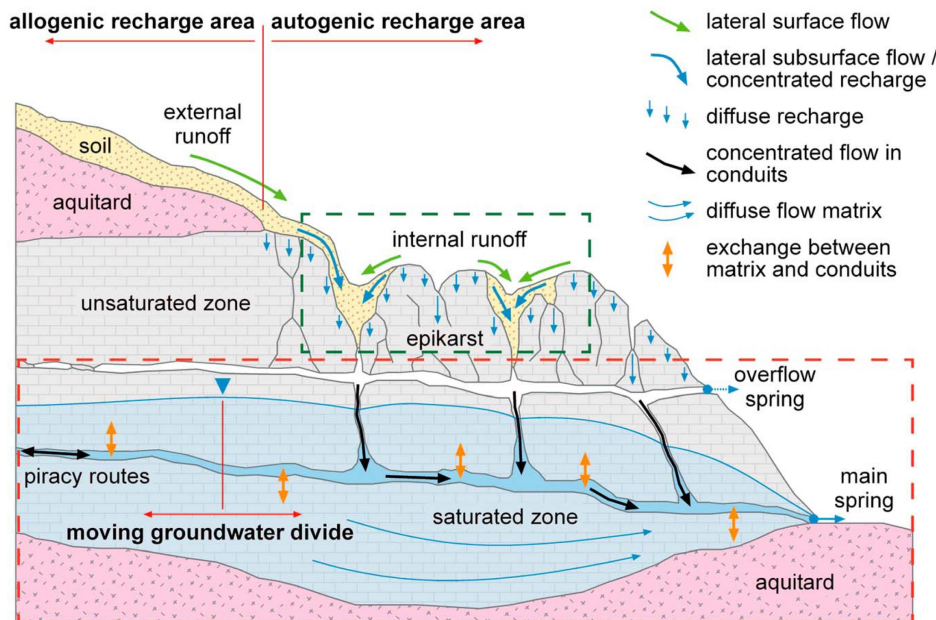


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung verschiedener Bereiche und Prozesse in Karstgebieten. Dunkelgrün umrandet: Exo- und Epikarst, rot umrandet: Endokarst (aus [Hartmann et al., 2014](#)).

1.2.2 Hydrogeologische Eigenschaften

Die Morphologie von Karstaquiferen hat einen erheblichen Einfluss auf die hydrologischen Prozesse und die menschliche Wassernutzung. Ein Merkmal ist, dass das Wasser durch meist flachgründige Böden und punktuelle Infiltration schnell in den Untergrund gelangen kann. Dort fließt es durch die großen Röhren schnell weiter. Somit können im Oberflächen- oder Niederschlagswasser vorhandene Schadstoffe nur schlecht abgebaut werden, erreichen das Grundwasser und können anschließend an Quellen wieder an die Oberfläche treten (z. B. [Ford und Williams, 2007](#); [Doerfliger et al., 1999](#)). Neben schnellen gibt es in Karstsystemen aber auch langsame Abflusskomponenten, deren Prozesse in der Gesteinsmatrix außerhalb der großen Röhren stattfinden. Diese duale Aufteilung in zwei Kompartimente betrifft mehrere Prozesse ([Kiraly, 1998](#)): (a) die Infiltration, die entweder diffus und langsam in der Matrix oder punktuell und schnell in Schlucklöchern stattfindet, (b) den Grundwasserfluss mit niedrigen beziehungsweise hohen Fließgeschwindigkeiten in Matrix und Röhrennetzwerk, und (c) den Abfluss an der

Quelle, der sich aus der gleichmäßigen Matrix- und der variablen Röhrenkomponente zusammensetzt.

Die genauere Erforschung eines größeren Gebietes ist auf Grund der Heterogenität und Anisotropie sehr aufwändig, daher sind meist nur wenige Informationen über die Beschaffenheit des Gesteins vorhanden, und Rückschlüsse aus anderen Gebieten können nicht gezogen werden, da Karst viele verschiedene Ausprägungen besitzen kann (Ford und Williams, 2007). Ford und Williams heben ebenfalls hervor, dass die Matrix den mit Abstand wichtigsten Speicherraum darstellt. Sie zeigen vier Karstsysteme in unterschiedlichen Gesteinsarten, in denen jeweils mindestens 96 % des Porenraums in der Matrix vorkommt, selbst dort, wo große Höhlensysteme existieren. Für den Grundwasserfluss können die Röhren jedoch, abhängig von der Gesteinsart, unterschiedliche Bedeutungen haben. Die Bandbreite reicht von meist alten Gesteinen mit geringer primärer Porosität, die überwiegend von den Röhren entwässert werden, bis zu Gesteinen mit einer hohen Matrixporosität, bei denen die Matrix gleich viel oder mehr Wasser als die Röhren transportieren kann (Groves, 2007).

Es wurden bereits einige Versuche unternommen, Karststrukturen zu charakterisieren und systematisieren, so beispielsweise nach dem Anteil an körnigen (Matrix-), Riss- oder Röhrenhöhlräumen oder nach der Art von Grundwasserneubildung, Speicherung und Transport. Ebenso wurde versucht, aus der Abflussreaktion auf Niederschläge den Grad der Verkarstung zu bestimmen. Heutige Computermodelle unterscheiden bis zu drei Arten von Hohlräumen mit unterschiedlichen Eigenschaften: Matrix, Risse und Röhren. Am Besten können Karstsysteme mit Berücksichtigung aller drei Arten abgebildet werden, dies ist jedoch aufgrund der unzureichenden Kenntnis des Untergrunds und der nötigen Rechnerkapazität im Moment nicht praktikabel (Ford und Williams, 2007).

Die Beschreibung des Grundwasserflusses ist ebenso kompliziert wie die der unterirdischen Hohlräume. Die Grundeinheit einer jeden hydrologischen Beschreibung, das Einzugsgebiet, lässt sich bei Karstaquifern, anders als in rein porösen Medien, oftmals nicht eindeutig bestimmen. Im Untergrund kann Wasser über die oberirdischen Wasserscheiden hinweg fließen und die Einzugsgebietsgrenzen können sich zeitlich, je nach Füllstand des Aquifers, verändern (Groves, 2007). Der Eintritt des Wassers in den Untergrund kann entweder *autogen* als Infiltration über dem Karstgestein oder *allogen* aus Gebieten mit nicht verkarstungsfähigen Gesteinen passieren. Bei allogener Grundwasserneubildung versickert oft ein ganzer Fluss nach dem Erreichen des Karstgesteins in den Untergrund, was entweder punktuell durch Schlucklöcher oder flächenhaft in einem Bereich des Flussbettes geschieht (Groves, 2007).

1.2.3 Erforschung der Wasserressourcen in Karstgebieten

Durch die besonderen Eigenschaften von Karstgebieten unterscheiden sich die Methoden zur Erforschung ebenfalls von anderen Aquiferen. Karstaquifere ermöglichen es, unterirdische Fließwege durch Speläologen zu erforschen. Dies bietet viele Vorteile und ist auch notwendig, um Karstsysteme zu verstehen, da in den Röhren sehr viel Wasser fließen kann und sie oftmals eine größere Bedeutung als die umgebende Matrix haben. Durch den direkten Zugang zu unterirdischen Fließwegen können mehr Informationen als durch Beobachtungsbrunnen oder Abflussmessungen an Quellen gewonnen werden: Die Fließrichtung des Wassers kann direkt beobachtet, einzelne Zuflüsse zu Quellen können erfasst und Einzugsgebiete abgegrenzt werden. So können ungewöhnliche Situationen besser erklärt werden. Weiterhin können die Höhlenmorphologie und eventuelle Hochwassermarken beobachtet sowie Sedimente datiert werden, wodurch auch historische Erkenntnisse möglich sind (Jeannin et al., 2007).

Die Verwendung von Tracern ist als Methode zur generellen Grundwassererforschung auch für Karstgebiete von Bedeutung (Groves, 2007). Bei der Verwendung von Tracern unterscheidet man künstliche und natürlich vorkommende Stoffe. Künstliche Tracer werden dem Wasser zugegeben und sind geeignet für kurze Verweilzeiten im Untergrund. Sie werden in Karstgebieten eingesetzt, um unterirdische Höhlennetzwerke näher zu bestimmen, zum Beispiel um Verbindungen zu erkennen oder Einzugsgebiete abzugrenzen. Über die Tracerdurchgangskurve können Fließgeschwindigkeiten, Abflussmengen und Röhrendurchmesser abgeschätzt werden. Gut geeignet sind Fluoreszenztracer, da sie sich annähernd wie Wasser verhalten, ungiftig sind und sich in geringen Konzentrationen nachweisen lassen (Hartmann et al., 2014). Natürliche Tracer sind Stoffe, die von Natur aus im Wasser vorkommen. Sie enthalten integrierte Informationen aus dem gesamten System und die verschiedenen Herkünfte, Mischungsverhältnisse und Verweilzeiten des Wassers können daraus abgeleitet werden. Als natürlicher Tracer kann theoretisch jeder im Wasser vorkommende Stoff oder auch Eigenschaften des Wassers verwendet werden. In der Praxis werden beispielsweise Ionen, Spurenelemente, gelöster organischer Kohlenstoff (DOC), Wasserisotope oder auch die elektrische Leitfähigkeit, Trübung oder Temperatur verwendet. Wasserisotope sind besonders geeignet, weil sie Bestandteile des Wassers sind und somit keine besonderen chemischen und physikalischen Eigenschaften aufweisen, die man beachten müsste (Hartmann et al., 2014). Werden die Eigenschaften oder Inhaltstoffe kontinuierlich gemessen, ist eine hohe zeitliche Auflösung wichtig, da die Größen in Karstsystemen, insbesondere der Wasserstand, sehr dynamisch sein können. Anstelle eines Netzes mit mehreren Messstellen wird im Karst oft nur die Quelle beprobt. Zur

Auswertung der Ergebnisse ist die Kenntnis der Eingangsdaten notwendig, daher sollten zusätzlich der Niederschlag oder an Schlucklöchern versinkendes Wasser gemessen werden. Die Auswertung der Daten kann Informationen über die Herkunft des Wassers liefern, beispielsweise können eine veränderte Leitfähigkeit oder Temperatur die Anwesenheit von Regenwasser anzeigen, oder über die Stoffzusammensetzung können durch unvollständig abgelaufene Reaktionen Verweilzeiten hergeleitet werden (Hartmann et al., 2014).

Weitere Informationen über Karstsysteme bringen geophysikalische Methoden. Mit Pumpversuchen werden hydraulische Informationen über die Umgebung eines Bohrloches gewonnen. Hierbei kann das Verhalten des Grundwasserspiegels die hydraulische Leitfähigkeit und auch die Anwesenheit von Frakturen oder Röhrensystemen anzeigen. Andere geophysikalische Methoden sind die Seismik zur Abgrenzung des Aquifers gegenüber anderen Gesteinsarten, Mikrogravitation zur Entdeckung von Hohlräumen, außerdem elektromagnetische Methoden, die Messung des Eigenpotentials (englisch *spontaneous potential*) und Georadar (Hartmann et al., 2014).

1.3 Hydrologische Modellierung von Karstsystemen

Durch den globalen Wandel (Klimawandel, Bevölkerungswachstum, Wirtschaftswachstum usw.) wird der Druck auf die Wasserressourcen in Karstgebieten weiter zunehmen, daher sind aussagekräftige hydrologische Karstmodelle von großer Bedeutung (Hartmann et al., 2014). Es gibt verschiedene Ansätze, wie Grundwasser modelliert werden kann. Einen Überblick über speziell in verkarsteten Gebieten angewandte Modellkonzepte soll dieses Kapitel geben. Ein wichtiges Werkzeug zum Verständnis von Modellen sind Sensitivitätsanalysen. Methoden dazu werden im zweiten Teil dieses Kapitels behandelt. Die Erkenntnisse aus solchen Analysen können die Stärken und Schwächen des Modells offenlegen und eine Basis für eine Modellverbesserung sein.

1.3.1 Modellarten

Grundsätzlich gibt es viele Kriterien, nach denen Modelle unterschieden werden können. Eine Möglichkeit ist die Einteilung nach der Abbildung der Prozesse. Kuniansky (2014) unterscheidet zwischen (a) räumlich verteilten Parametermodellen, (b) konzentrierten, sogenannten *lumped parameter models* und (c) statistischen Modellen. Rein statistische Ansätze (c), auch als *black box* bezeichnet, basieren auf Beobachtungen aus der Vergangenheit. Sie sind bei veränderten Zuständen des Systems, beispielsweise Klima- und

Landnutzungsänderungen, nicht auf die Zukunft übertragbar (Ford und Williams, 2007) und werden deshalb im Folgenden nicht weiter betrachtet.

Räumlich verteilte Modelle

Räumlich verteilte Parametermodelle (a) werden in der Grundwassermodellierung häufig eingesetzt (Kuniansky, 2014; 2016b). Sie bilden den zu modellierenden Raum als diskretes zwei- oder dreidimensionales Netzwerk ab und bieten durch ihren physikalischen und möglichst realitätsnahen Ansatz ein gutes Prozessverständnis. Dieses ist für längerfristige Vorhersagen elementar, weil zukünftige Klima- oder Landnutzungsveränderungen den Wasserhaushalt beeinflussen werden. Eine möglichst genaue Beschreibung der Prozesse ermöglicht Vorhersagen auch für veränderte Randbedingungen. Eine Herausforderung bei räumlich verteilten Modellen ist die Datenverfügbarkeit. Meist sind die Beobachtungsdaten, zum Beispiel von Standrohrspiegelhöhen, räumlich geringer aufgelöst als nötig, was zu einer schlechten Kalibrierung und falschen Modellergebnissen an Stellen ohne Messwerte führen kann (Hartmann et al., 2014).

Verschiedene Modellansätze für die speziellen Eigenschaften von Karstgrundwasserleitern werden in Kuniansky (2016b) beschrieben (siehe Abbildung 1.2). Ein Basismodell, das in vielen Gesteinsarten angewendet werden kann, ist das Ein-Kontinuum-Porenmodell (Single-Continuum Porous-Equivalent in Abbildung 1.2). Es beschreibt eine Gesteins- oder Sedimentmatrix, in deren Poren das Wasser fließt. Jede Zelle des Modells wird als homogene Einheit angenommen, die als „Durchschnittswert“ alle Heterogenitäten in der Zelle beschreiben kann (Kuniansky, 2016b; Hartmann et al., 2014). Bei der mathematischen Beschreibung des Grundwasserflusses in porösen Medien wird das Gesetz von Darcy verwendet (verändert nach Gl. 5.4 aus Ford und Williams, 2007, S.109):

$$\frac{Q}{a} = -K_f \frac{dh}{dl} \quad (1.2)$$

mit Q als Abflussmenge, a als Querschnittsfläche des Aquifers, K_f als hydraulische Leitfähigkeit und $\frac{dh}{dl}$ als hydraulischer Gradient bzw. als Standrohrspiegelhöhenänderung pro Längeneinheit.

Ein-Kontinuum-Porenmodelle wurden bisher oft erfolgreich zur Abschätzung von Grundwasserressourcen und Wasserbilanzen auf regionaler Ebene verwendet. Für kleinskalige Transportprobleme mit fortgeschrittener Verkarstung sind sie allerdings weniger geeignet, da sie nur eine geringe Variabilität des Grundwasserleiters annehmen, was für Karstsysteme nicht gilt (Kuniansky, 2016b; Hartmann et al., 2014; Sauter et al., 2006). Zudem sind die Hohlräume in Karstgesteinen nicht zufällig, sondern hierarchisch verteilt, und K_f

ist stark abhängig vom betrachteten Teil des Aquifers. Hinzu kommt, dass das Darcy-Gesetz nur für laminares Fließen gilt. Ab einer gewissen Fließgeschwindigkeit, die bei großen Poren bzw. Röhren leicht überschritten werden kann, wird das Fließen turbulent und somit der Zusammenhang zwischen hydraulischem Gradienten und Abflussmenge nicht mehr linear. Auch falls die Bereiche mit Röhren nur einen geringen Teil der Porosität ausmachen und die Darcy-Annahme in den meisten Bereichen (lokal, z.B. für einzelne Brunnen) gilt, fließt doch ein Großteil des Wassers durch die Röhren und muss entsprechend berücksichtigt werden (Ford und Williams, 2007).

Computerprogramme zur Grundwassermodellierung entstanden seit den 1970er-Jahren. Ein weit verbreitetes Beispiel ist das Modell MODFLOW, dessen erste Version ab 1981 vom United States Geological Survey (USGS) entwickelt wurde und Anfang der 1990er-Jahre weit verbreitet war (McDonald und Harbaugh, 2003). Durch den modularen Aufbau können Funktionen hinzugenommen oder weggelassen werden. Neben Erweiterungen beispielsweise zur Implementierung von Randbedingungen (WEL, DRN, etc.) gibt es die Erweiterung MODFLOW-CFP (Modus 2) von Shoemaker et al. (2008b), die neben laminarem auch turbulentes Fließen berücksichtigt und damit bessere Ergebnisse in verkarsteten Systemen erreicht (Shoemaker et al., 2008a; Kuniansky et al., 2008; 2011; Kuniansky, 2016b).

Ist der Untergrund heterogen, wenn es beispielsweise schnelle und langsame Abflusskomponenten gibt, kann ein zweites Kontinuum für jede Modellzelle mit anderen Eigenschaften angenommen werden (Dual-Continuum Porous-Equivalent in Abbildung 1.2). Vorteile des Ansatzes sind, dass er sowohl schnelle als auch langsame Abflusskomponenten simulieren kann und trotzdem mit wenigen Eingangsdaten, ohne dass eine Röhrengeometrie bekannt sein muss, auskommt (Kuniansky, 2016b). Eine neuere Studie mit diesem Ansatz ist zum Beispiel Kordilla et al. (2012).

Wenn große Röhren im Untergrund existieren, stößt das Konzept der Porenstruktur an seine Grenzen, da das Wasser dort von laminarem in turbulentes Fließen wechseln kann und somit die Annahmen der Darcy-Gleichung nicht mehr gelten (Kuniansky, 2016b). In solchen Fällen kann der Hagen-Poiseuille-Ansatz für laminares und die Darcy-Weisbach-Gleichung für turbulentes Fließen in Röhren angewandt werden (z. B. Ford und Williams, 2007; Shoemaker et al., 2008b). Modelle, die ein Röhrennetzwerk abbilden können, werden Hybridmodelle genannt (Hybrid model in Abb. 1.2) und bisher vor allem in der Forschung oder in gut erforschten Röhrensystemen angewandt (Kuniansky, 2016b). Sie können das schnelle Auslaufverhalten des Aquifers nach starken Niederschlägen, das langsame Auslaufen in Trockenzeiten und auch den wichtigen Austausch zwischen Röhren

und Matrix gut darstellen (Sauter et al., 2006). Ein Beispiel ist der „Conduit Flow Process“, der in der Version MODFLOW-CFP (Shoemaker et al., 2008b) implementiert ist und speziell für Karstsysteme entwickelt wurde. Er ermöglicht es, in der Modellstruktur diskrete Röhrengeometrien einzufügen. Mit MODFLOW-CFP können Karstsysteme somit realistischer als mit Ein-Kontinuum-Modellen beschrieben werden, wie beispielsweise Reimann und Hill (2009) zeigen.

Das Modell wurde bisher mehrmals angewendet, zum Beispiel von Hill (2008) und Hill et al. (2010) in Zentral-Florida, Gallegos (2011), Gallegos et al. (2013), Xu et al. (2015b) und Xu et al. (2015a) in Nord-Florida, Saller et al. (2013) in South Dakota, Karay und Hajnal (2015 und 2016) in Ungarn, Reimann et al. (2014) und Giese et al. (2017) in Frankreich, Filippini et al. (2016) in einem Tunnel in Italien sowie Reimann et al. (2011) und Chang et al. (2015) jeweils in einem künstlichen Gebiet.

Spielt das Röhrensystem eine dominante Rolle, kann die Modellierung der Matrix weggelassen werden. Es sind die Abbildung von einzelnen oder mehreren Röhrensystemen denkbar (Discrete Single Fracture Set bzw. Discrete Multiple Fracture Set, Abb. 1.2). Falls die Röhrengeometrien nicht bekannt sind, können sie stochastisch ermittelt werden. Anwendungen sind in der Hydrogeologie bisher nicht bekannt (Kuniansky, 2016b).

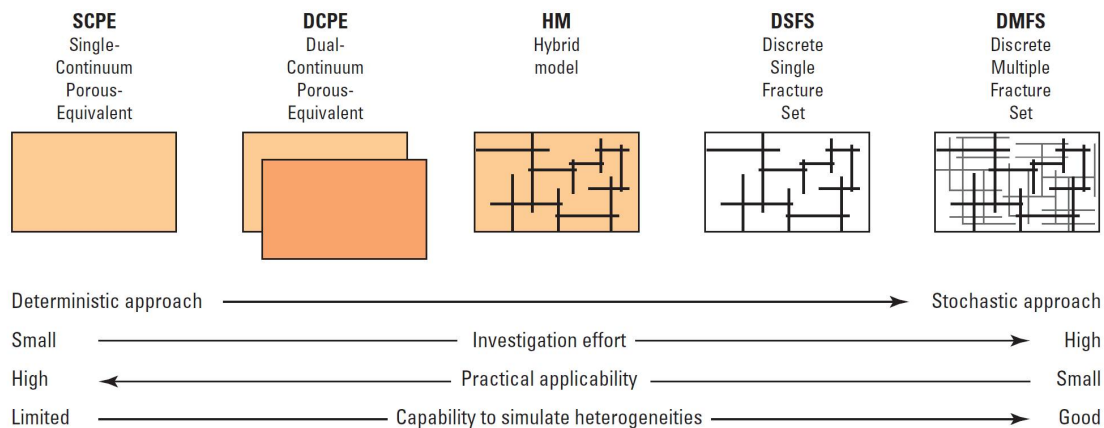


Abbildung 1.2: Verschiedene Konzepte zur Modellierung von Grundwasser in Karstgebieten (übernommen aus Kuniansky (2016b), ursprünglich verändert aus Deutsch und Sauter (1998)).

Räumlich konzentrierte Modelle (*lumped parameter*-Modelle)

In sogenannten *Lumped parameter*-Modellen wird das betrachtete System ohne explizite räumliche Unterteilung modelliert. Es gibt viele verschiedene Modelle, denen unterschiedliche Konzeptvorstellungen zugrunde liegen. Meist basieren sie jedoch auf linearen oder

nichtlinearen Beziehungen zwischen Speicherinhalt und Abflussmenge. Die Parameter, mit denen diese beschrieben werden, sind effektive Werte, die keine physikalische Entsprechung haben und somit nicht messbar sind. Daher müssen sie mit im Feld gemessenen Größen (zum Beispiel der Abflussmenge) kalibriert werden (Hartmann et al., 2014).

Hartmann et al. (2014) unterscheiden zwischen mehreren Prozessen, die in *lumped parameter*-Modellen beschrieben werden. Beginnend an der Oberfläche wird eine Boden- und/oder eine Epikarst-Schicht modelliert. Überschüssiges Wasser, das von diesen Bereichen nicht aufgenommen werden kann, wird als Oberflächenabfluss behandelt. Allogener Abfluss (aus externen Gebieten) wird von den meisten Modellen nicht betrachtet. In der Epikarst-Schicht wird das Wasser anschließend nach gewissen Regeln auf die Matrix und das Röhrensystem aufgeteilt. Die nächste Schicht ist das eigentliche Karstsystem. Dort gibt es verschiedene Konzepte, wie das Wasser zwischen Matrix und Röhren interagiert und wohin das Sickerwasser aus der Matrix fließt. An der Quelle verlässt das Wasser schließlich das System. Auch hier gibt es unterschiedliche Ansätze. Manche Modelle beinhalten temporäre Quellen, die bei gewissen Kriterien zu schütten beginnen. Weitere Prozesse sind variable Neubildungsflächen und unterirdische Abflüsse in andere Einzugsgebiete, die von manchen Modellen berücksichtigt werden (Hartmann et al., 2014).

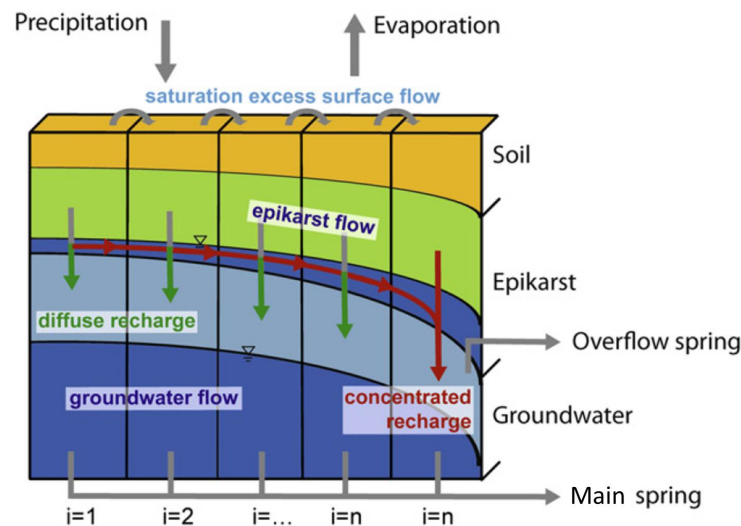


Abbildung 1.3: Konzeptmodell des Modells Varkarst, verändert aus Hartmann et al. (2013)

Bei *lumped parameter*-Modellen spielt die Anzahl der Parameter eine besondere Rolle. Zu viele Parameter können dazu führen, dass es mehrere Parameterkombinationen gibt, die akzeptable Ergebnisse liefern. Einzelne Parameter sind dann nicht mehr aussagekräftig und die Modellunsicherheit erhöht sich. Bei einfachen Modellstrukturen mit

wenigen Parametern besteht jedoch die Gefahr, dass die Prozesse nicht adäquat abgebildet werden können (Hartmann et al., 2014). Letztendlich muss sorgfältig überlegt werden, welche Parameter wichtig für das Prozessverständnis und welche verzichtbar sind, um die Struktur einfach und die Parameteranzahl gering zu halten. Ein Beispiel für ein *lumped parameter*-Modell ist Varkarst (Hartmann et al., 2013), dessen Struktur in Abbildung 1.3 dargestellt ist.

1.3.2 Sensitivitätsanalyse in der Modellierung

Die in umweltwissenschaftliche Modelle eingehenden Daten wie Modellparameter, Anfangs- und Randbedingungen, sind oft unbekannt oder weisen große Unsicherheiten auf. Auch die zeitlich-räumliche Diskretisierung kann bei falscher Wahl Fehler verursachen. Über die Auswirkungen dieser Unsicherheiten, also den Einfluss variabler Modell-Eingangsdaten auf die berechneten Ausgangsgrößen, gibt eine Sensitivitätsanalyse Aufschluss. Die Fragestellungen können dabei zum Beispiel sein, welche Eingangsparameter den größten Einfluss auf die Ausgangsgrößen haben oder ob es Parameter mit nur wenig Einfluss gibt. Daneben dient die Sensitivitätsanalyse als Werkzeug für viele weitere Schritte einer Modellierung. In Unsicherheitsanalysen trägt sie zur Abschätzung der Bandbreite möglicher Modellergebnisse bei, und ebenso kann sie ein Teil der Kalibrierung sein. In Modellevaluierungen wird durch sie die Konsistenz bzw. Plausibilität des Modellverhaltens überprüft, und schließlich kann sie zur Einschätzung der Robustheit von Ergebnissen gegenüber Parameterunsicherheiten verwendet werden und damit Management-Entscheidungen unterstützen (Pianosi et al., 2016). Dieses vielfältig anwendbare Werkzeug sollte daher ein Teil jeder Modelluntersuchung sein.

Es gibt viele verschiedene Methoden für Sensitivitätsanalysen, die in Pianosi et al. (2016) systematisch in Gruppen eingeteilt werden. Die grundlegende Vorgehensweise ist jedoch oftmals ähnlich. Zunächst werden nach einem bestimmten Muster, zum Beispiel durch eine Stichprobenziehung, die Eingangsparameter verändert, darauf folgt die Modellausführung und die Auswertung der Ergebnisse (Abbildung 1.4). Die Wahl der Methode richtet sich vor allem nach der verfügbaren Rechenkapazität und dem Zweck der Sensitivitätsanalyse. Die Autoren unterscheiden, angelehnt an Saltelli et al. (2008), zwischen dem Einordnen des Einflusses der einzelnen Eingangsparameter (*ranking*), der Bestimmung von Parametern mit vernachlässigbarem Einfluss (*screening*) und des Parameterbereichs mit einem bestimmten (beispielsweise maximalen) Ergebniswert (*mapping*). Für diese Studie, in der das rechenintensive Modell MODFLOW-CFP verwendet werden soll, eignen sich die Methodengruppen *perturbation* & *derivatives* oder *Multiple*

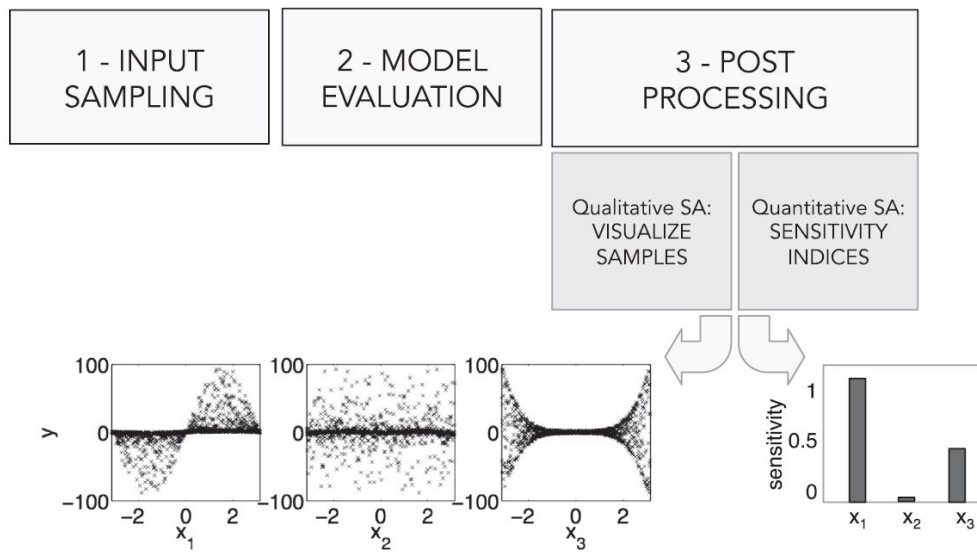


Abbildung 1.4: Grundlegendes Schema einer stichprobenbasierten Sensitivitätsanalyse (aus Pianosi et al., 2016)

starts perturbation am Besten. Beide sind für *ranking* und *screening* geeignet und werden in den folgenden beiden Absätzen nach Pianosi et al. (2016) kurz beschrieben:

Mit *perturbation* & *derivatives* wird eine one-at-a-time-Analyse durchgeführt, was bedeutet, dass in jedem neuen Modelllauf nur ein Parameter von einem gewählten initialen Parametersatz abweicht, während alle anderen gleich bleiben. Die Veränderungen in der Ausgangsgröße können entweder visuell oder mit weiteren Analysen systematisch beurteilt werden. Für Letzteres ist eine skalare Ausgangsgröße nötig. Diese wird partiell nach dem veränderten Parameter abgeleitet und bei Bedarf mit einem Faktor normiert, so dass man einen Sensitivitätswert für jeden Parameter erhält. Der Vorteil dieser Methode ist der geringe Rechenaufwand, es sind nur $m + 1$ Modellläufe (mit m als Anzahl der veränderlichen Parameter) notwendig. Ein Nachteil ist, dass die Sensitivität nur an der Stelle im Parameterraum bestimmt wird, an der sich die initialen Werte befinden. Für andere Parameterkombinationen können die Sensitivitäten gänzlich verschiedene sein.

Multiple-starts perturbation ist eine aufwändigere Methode. Hier werden die Berechnungen aus *perturbation* & *derivatives* für mehrere initiale Parametersätze durchgeführt. So erhält man für jeden Parameter mehrere lokale Sensitivitätsindizes, aus denen auf verschiedene Arten ein globaler Index berechnet werden kann. Die Standardabweichung der Sensitivitätsindizes gibt an, wie groß deren Variabilität im Parameterraum ist. Dies kann auf Interaktionen mit anderen Parametern oder ein unterschiedliches Verhalten abhängig von dem Parameterwert selbst hindeuten. Für die Wahl der Punkte gibt es viele Methoden, die in Pianosi et al. (2016) und der darin zitierten Literatur nachzulesen sind. Bei der *Multiple-starts perturbation*-Methode sind $r \cdot (m + 1)$ Modellläufe durchzuführen, mit

r als Anzahl der initialen Punkte und m als Anzahl der veränderlichen Parameter.

1.3.3 Sensitivitätsanalyse mit dem räumlich verteilten Modell MODFLOW-CFP (Modus 1)

Sensitivitätsanalysen mit dem Modell MODFLOW-CFP Modus 1 (CFPM1) sind bereits in mehreren Studien durchgeführt worden. Bereits kurz nach der Veröffentlichung der Modellerweiterung verglich [Hill \(2008\)](#) zwei Ein-Kontinuum-Modelle mit dem Hybridmodell CFPM1 in einem Karstaquifer nahe Weeki Wachee (Florida, USA) und zeigte die wichtige Bedeutung der Röhrenmodellierung. Den größten Einfluss auf die Verbesserung des Modellergebnisses durch CFPM1 hatten dabei die hydraulische Leitfähigkeit und der Austauschparameter zwischen der Matrix und den Röhren (vgl. auch [Hill et al., 2010](#)). [Saller et al. \(2013\)](#) modellierten einen Teil des Madison-Aquifers (South Dakota, USA). Sie konnten zeigen, dass die Standrohrspiegelhöhen sensitiv auf den Röhrendurchmesser und den Austauschparameter (zwischen Matrix und Röhren) reagieren. In der Molnár János-Höhle in Budapest (Ungarn) wurde CFPM1 verwendet und die Sensitivität auf die Wassertemperatur, die kritischen Reynolds-Zahlen und die Röhrenrauigkeit untersucht ([Karay und Hajnal, 2016](#)). Die Autoren fanden keinen signifikanten Einfluss der genannten Parameter auf den Abfluss und die maximale Fließgeschwindigkeit in den Röhren. Lediglich die Anzahl der turbulent fließenden Röhren wurde durch die veränderten Parameter beeinflusst. Ebenfalls [Karay und Hajnal \(2015; 2016\)](#) stellten ein bereits früher durchgeführtes Laborexperiment mit CFPM1 nach. In diesem Modell mit 8 mm Röhrendurchmesser war die Standrohrspiegelhöhe gegenüber einer großen Veränderung der Röhrenrauigkeit (Faktor 10) und dem Durchmesser einer bestimmten Röhre sensitiv. In der Woodville Karst-Ebene (Florida, USA), die auch Gegenstand dieser Arbeit sein soll, wurden ebenfalls Sensitivitätsanalysen mit CFPM1 durchgeführt. In den Studien von [Gallegos \(2011\)](#) und [Gallegos et al. \(2013\)](#) wurden die Sensitivitäten der Standrohrspiegelhöhen, Quellschüttungen und Röhrenverweilzeiten untersucht. Der einflussreichste Parameter war der Röhrendurchmesser, auf die horizontale hydraulische Leitfähigkeit, den Röhren-Matrix-Austauschparameter und die Tortuosität waren nur manche Zielgrößen sensitiv, und am wenigsten Einfluss hatten die vertikale hydraulische Leitfähigkeit und die Röhrenrauigkeit. [Xu et al. \(2015a\)](#) modellierten den Stofftransport im Aquifer der Woodville Karst-Ebene und wählten als Zielgröße die Stickstoffkonzentration an der Wakulla springs-Quelle. Diese reagierte sensitiv auf die effektive Porosität, jedoch nicht auf den Dispersionskoeffizienten der Transportgleichung. Die hier beschriebenen Studien hatten meist das Ziel, die generelle Anwendbarkeit des Modells

zu überprüfen oder verschiedene Modelle zu vergleichen. Eine speziell auf die Sensitivitätsanalyse fokussierte Untersuchung mit allen relevanten Parametern ist bisher nicht bekannt.

1.4 Forschungslücke

Das Modell MODFLOW-CFP wurde bisher mehrmals in der Woodville-Karstebene (Florida, USA) angewandt (z.B. Gallegos et al., 2013; Xu et al., 2015a; Kuniansky, 2016b). Beim Vergleich mit konventionellen Ein-Kontinuum-Modellen erwies sich das Modellkonzept mit diskreten Röhren bei stark verkarstetem Gestein als vorteilhaft (Kuniansky, 2016b; Hill et al., 2010). Sensitivitätsanalysen zeigen, dass die röhrenspezifischen Parameter Durchmesser und Austausch mit der Matrix sensitive Parameter sind (Hill, 2008; Gallegos et al., 2013; Saller et al., 2013). Andere wiederum, wie die Röhrenrauhigkeit oder kritische Reynoldszahlen, zeigen nur geringe oder keine Sensitivität (Gallegos et al., 2013; Karay und Hajnal, 2016). Die durchgeführten Sensitivitätsanalysen waren meist Teil einer übergeordneten Fragestellung und die Ergebnisse wurden keiner erweiterten Auswertung unterzogen. Beispielsweise ist eine räumlich differenzierte Betrachtung der Parameter bisher nicht bekannt. Eine systematische Sensitivitätsanalyse, die den Einfluss möglichst vieler Parameter auf verschiedene Ausgangsgrößen quantifiziert und dabei räumliche Muster darstellt, ist notwendig. Dies kann zum besseren Prozessverständnis, einer effizienteren Parameterkalibrierung und möglicherweise zu einer Vereinfachung des Modelldesigns beitragen.

Kapitel 2

Zielsetzung der Arbeit

Die Zielsetzung der Arbeit ist es, ein Grundwassermodell der Woodville Karst Plain zu erstellen und im Anschluss eine Sensitivitätsanalyse an diesem durchzuführen. Dadurch soll der Einfluss einzelner Parameter auf verschiedene Ausgangsgrößen mit einem geeigneten Maß quantifiziert und eine Rangliste aufgestellt werden. Ein weiterer Fokus soll auf die Unterschiede zwischen verschiedenen räumlichen Bereichen der Eingangsparameter gelegt werden.

Der Zweck der Untersuchung ist es, die Bedeutung einzelner Prozesse in Karstaquifereen besser zu verstehen. Eine Rangfolge einflussreicher Parameter liefert Hinweise dafür. Die räumliche Aufteilung der Parameter soll ein noch genaueres Bild liefern. So können beispielsweise Feldkampagnen gezielt an einflussreichen Orten geplant werden und zur effektiven Verbesserung der Modellergebnisse beitragen.

Folgende Ergebnisse werden erwartet: Wichtige Parameter dürften diejenigen sein, die einen direkten Einfluss auf die Wassermengen im System haben und solche, die das Fließen dominieren (vgl. Gleichung 1.2), also die Grundwasserneubildung, die Randbedingung an den äußeren Grenzen und die hydraulische Leitfähigkeit. Ebenso dürften Größen, die über mehrere Größenordnungen schwanken können, einen Einfluss haben. Dies ist neben der hydraulischen Leitfähigkeit der Austauschfaktor zwischen Röhren und Matrix. Bei der räumlich differenzierten Betrachtung dürften sich ebenfalls unterschiedliche Sensitivitäten zeigen. Gebiete, in denen viel Wasser umgesetzt wird, beispielsweise in der Umgebung von großen Röhren, dürften zumindest auf die Abflüsse einen hohen Einfluss haben. Gebiete mit geringem Wasserumsatz könnten die Standrohrspiegelhöhen verstärkt beeinflussen. Durch die Größe und Heterogenität des Gebiets sind Prognosen jedoch schwierig.

Kapitel 3

Methoden und Vorgehensweise

3.1 Untersuchungsgebiet

Das Grundwassermodell wird in der Woodville-Karstebene (Florida, USA) aufgestellt. Das Gebiet ist ca. 1166 km^2 groß und enthält mehrere große Karstquellen (Kuniansky, 2016b). Intensive Höhlenforschung durch das Woodville Karst Plain Project (WKPP; www.wkpp.org) und mehrere Studien mit dem Modell MODFLOW (z.B. Davis, 1996; Davis und Katz, 2007; Davis et al., 2010; Gallegos et al., 2013; Xu et al., 2015a) bieten eine gute Datengrundlage.

3.1.1 Geographie und Morphologie

Die Morphologie des Gebiets ist geprägt von sanften Hügeln, die im nördlichen Modellgebiet 60 m über Meereshöhe erreichen, jedoch südlich der Steilstufe *Cody Scarp* 15 m nicht überschreiten. Das Klima ist humid-subtropisch mit einer jährlichen Durchschnittstemperatur von $19,5 \text{ }^{\circ}\text{C}$ und einem Jahresniederschlag von 1676 mm (Werte für Tallahassee, Davis et al., 2010). Einen Überblick gibt Abbildung 3.1.

3.1.2 Hydrogeologie

Im Modellgebiet besteht der Untergrund aus tertiärem und quartärem Sedimentgestein verschiedener Zusammensetzung. Die beiden Modellschichten bilden den *Upper Floridan Aquifer* ab, der aus zwischen Eozän und Miozän abgelagerten Sedimenten besteht und meist eine gute Durchlässigkeit hat. Im äußersten Norden des Gebiets wird der Aquifer von den undurchlässigen Schichten *Hawthorn Group* und *Miccosukee Formation* bedeckt, welche keine eigene Schicht im Modell darstellen. Ebenfalls nicht repräsentiert

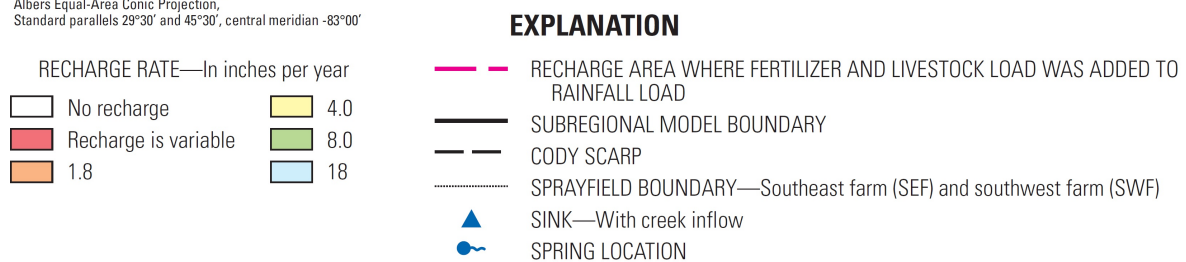
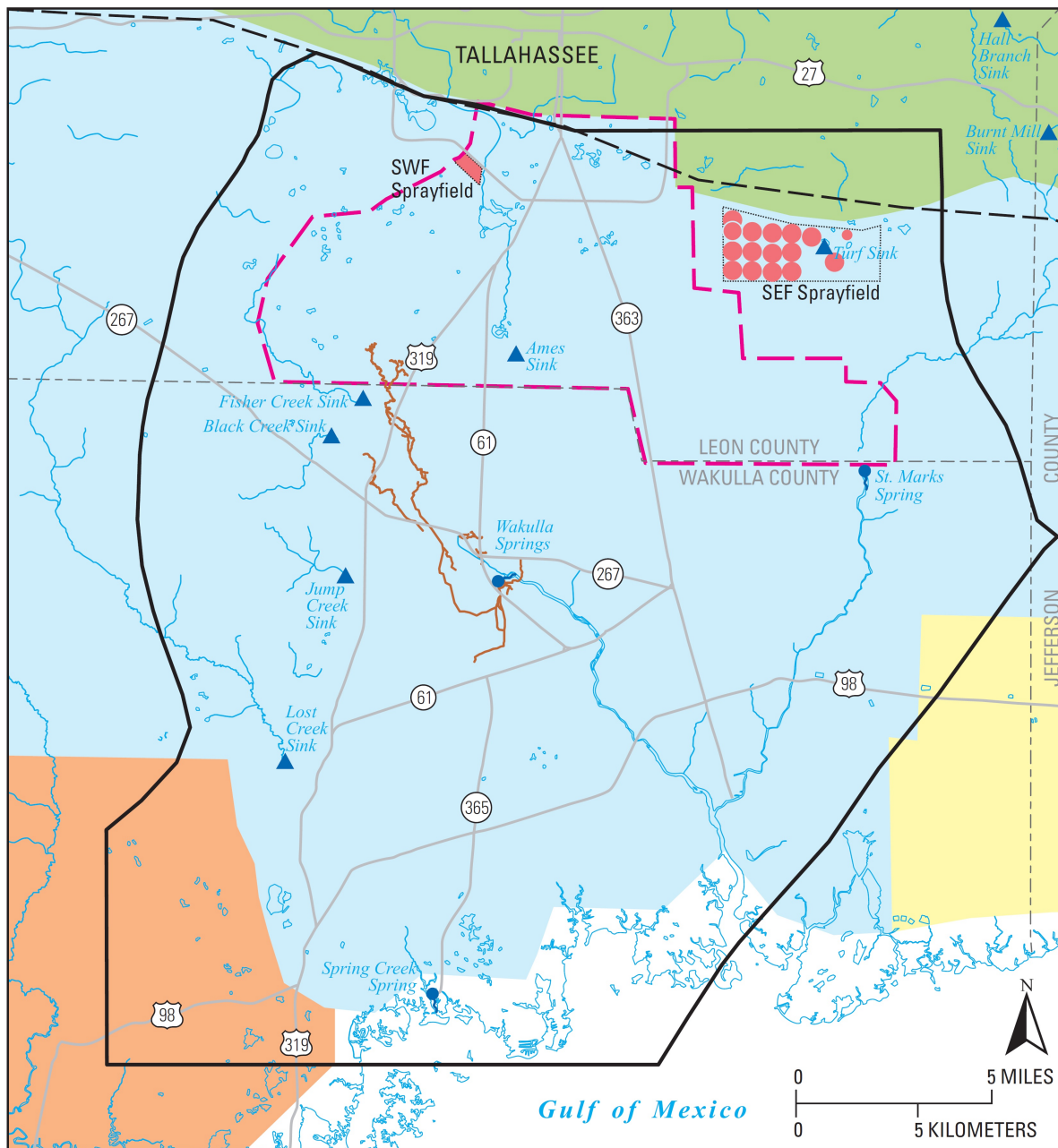


Abbildung 3.1: Karte des Modellgebiets (aus Davis et al., 2010)

sind pleistozäne Sande in der Nähe von Flüssen, Ästuaren und Lagunen. Unterhalb des *Upper Floridan Aquifer* bedindet sich massiver mariner, undurchlässiger Ton aus dem Paläozän (Davis et al., 2010; Miller, 1986).

Der Großteil des abfließenden Wassers wird von den Karstquellen Spring Creek, Wakulla und St. Marks abgeführt. Die Quellen besitzen durch ihre unterirdische Verbindung ein gemeinsames Einzugsgebiet, das nördlich über das Modellgebiet hinaus bis nach Georgia reicht. Die langjährige Abflussmenge der Wakulla-Quelle beträgt $559 \text{ ft}^3/\text{s}$ (1929-2008; entspricht $15,83 \text{ m}^3/\text{s}$), diejenige am Pegel unterhalb der St. Marks-Quelle $697 \text{ ft}^3/\text{s}$ (1956-2008; $19,74 \text{ m}^3/\text{s}$; Davis et al. (2010)). An der Spring Creek-Quelle ist keine kontinuierliche Messreihe vorhanden, da sie direkt ins Meer mündet und zur Messung ein voller Gezeitenzyklus (13 Stunden) abgedeckt werden muss. Weiterhin kann sich dort die Fließrichtung ändern, sodass Wasser vom Meer in das Karstsystem fließt (Davis et al., 2010).

3.2 Verwendetes Modell: MODFLOW-CFP Modus 1

MODFLOW-CFP (Shoemaker et al., 2008b) ist eine Weiterentwicklung des Modells MODFLOW-2005 (Harbaugh, 2005). Zusätzlich zu den ursprünglichen Funktionen von MODFLOW wurden speziell für Karstgesteine geeignete Konzepte implementiert. Das erste Konzept ermöglicht die diskrete Modellierung von Röhren innerhalb des Modellgebiets und entspricht Modus 1 des Modells. Das zweite Konzept ermöglicht im Modus 2 die Festlegung von horizontalen Schichten mit erhöhter Porosität, in der neben laminarem auch turbulentes Fließen möglich ist. Bei Konzepte können auch kombiniert werden. Da nur Modus 1 für diese Arbeit relevant ist, soll die Beschreibung hierauf beschränkt sein.

In MODFLOW wird das Modellgebiet aus einzelnen Zellen aufgebaut, für die jeweils Wasserbilanzen berechnet werden. Aus der Summe der ein- und ausfließenden Wassermengen wird die Speicher- und dementsprechend die Wasserspiegeländerung berechnet. Im porösen Gestein, im Folgenden Matrix genannt, wird die zwischen zwei Zellen fließende Wassermenge mit dem Darcy-Gesetz (Gleichung 1.2) berechnet. Die in MODFLOW-CFP möglichen Röhren bestehen aus einzelnen Segmenten, die zwei Knotenpunkte in benachbarten Zellen miteinander verbinden (Abbildung 3.2 links). Dabei kann pro Zelle nur ein Knotenpunkt definiert werden, der sich in der Zellmitte befindet. Jeder Knotenpunkt kann mit bis zu sechs weiteren verbunden werden. Die Röhren sind nicht isoliert in der Zelle, sondern über ihre gesamte Wandfläche mit der umgebenden Matrix verbunden. Die zwischen Röhren und Matrix ausgetauschte Wassermenge ist dabei abhängig vom

Unterschied der Standrohrspiegelhöhen in den beiden Kompartimenten und von einem individuellen Austauschparameter $Exch$, der für jeden Knotenpunkt festgelegt werden kann (Abbildung 3.2 rechts). Der Austauschparameter wird im Fall von nur teilweise gefüllten Röhren automatisch entsprechend der von Wasser benetzten Austauschfläche angepasst.

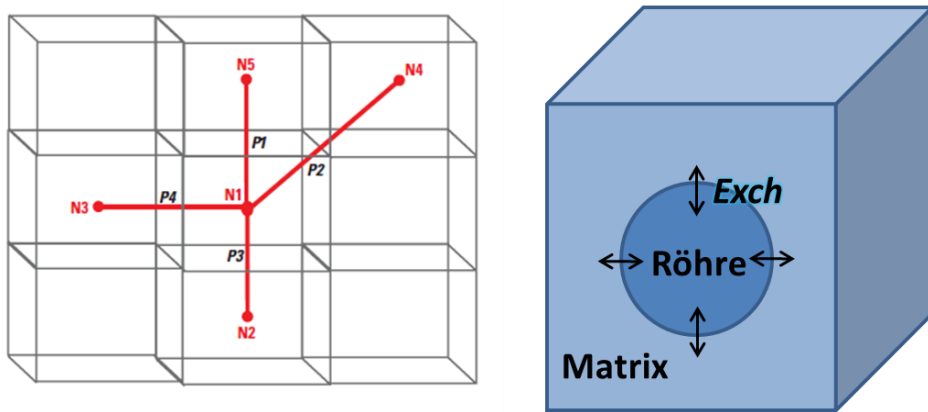


Abbildung 3.2: Links: Zellenstruktur mit modellierten Röhren (aus Shoemaker et al., 2008b). Rechts: Schematische Darstellung einer Zelle mit integrierter Röhre.

Bei der Modellierung des Fließens im Röhrensystem wird zwischen laminarem und turbulentem Fluss unterschieden. Bei laminarem Fließen werden parallele Stromlinien angenommen. Hierfür wird die Hagen-Poiseuille-Gleichung verwendet. Für das turbulente Fließen wird die Darcy-Weisbach-Gleichung zusammen mit der Colebrook-White-Formel verwendet (Shoemaker et al., 2008b). In welchen Röhren laminare oder turbulente Bedingungen herrschen, wird mit Hilfe der Reynolds-Zahl bestimmt. Diese ist von der Fließgeschwindigkeit, dem Röhrendurchmesser und der kinematischen Viskosität abhängig. Die kritische Reynolds-Zahl, bei der ein Wechsel zwischen turbulentem und laminarem Fließen stattfindet, steigt bei größeren Röhrendurchmessern an. Weiterhin ist sie unterschiedlich je nachdem, in welche Richtung der Zustandswechsel stattfindet, da sich das System träge verhält und den aktuellen Zustand möglichst lange beizubehalten versucht. Der Übergang von laminarem zu turbulentem Fließen findet daher bei höherer Reynolds-Zahl statt als derjenige in umgekehrter Richtung (Shoemaker et al., 2008b).

Der Anwender von MODFLOW-CFP muss für die Berechnung des Flusses im Röhrensystem einige Parameter angeben. Eine Übersicht befindet sich in Tabelle 3.4 in Kapitel 3.4.2. Zur Beschreibung der Geometrie sind der Röhrendurchmesser d , die mittlere Höhe der Unebenheiten der Röhrenwände **Roug** und die Tortuosität **Tort** notwendig, welche die tatsächliche Länge des Röhrensegments im Verhältnis zum direkten Weg zwischen den Knotenpunkten angibt. Weitere Parameter sind die obere und untere kritische

Reynolds-Zahl und die Wassertemperatur **Temp**, welche für die Berechnung der kinematischen Viskosität und damit der aktuellen Reynolds-Zahl benötigt wird.

Um die physikalischen Gegebenheiten im Modell darzustellen, können Randbedingungen angegeben werden. Es gibt dabei viele Pakete, von denen nur die hier verwendeten erläutert werden. Das *Recharge*-Paket soll die Grundwasserneubildung simulieren und gibt den Zellen der obersten Modellschicht Wasser hinzu. In der weiteren Analyse wird diese Menge mit **RCH** abgekürzt. Das *Well*-Paket kann beispielsweise die Grundwasserentnahme, Verrieselung von Abwasser oder Schlucklöcher modellieren und kann auf beliebige Zellen angewendet werden. Die verwendete Abkürzung ist **WEL**. Das *Constand head*-Paket **CHD** wird verwendet, um einzelnen Zellen eine definierte Standrohrspiegelhöhe zuzuweisen, welche zeitlich variabel sein kann. Damit werden die Grundwasserstände an den Modellgrenzen oder auch innerhalb des Modells definiert und ermöglicht, dass über die Grenzen Wasser ein- oder austreten kann. Grundsätzlich fließt über die Modellgrenzen, sofern sie keine Randbedingung aufweisen, kein Wasser. Schließlich wird in der Modellierung noch das *Drain*-Paket verwendet. Dieses Paket ermöglicht die Infiltration von Grundwasser in Flüsse, jedoch nicht umgekehrt. Zwei Parameter sind für die Definition dieser Randbedingung notwendig, die Höhe des Fluss-Wasserspiegels DRN_{elev} und die Durchlässigkeit des Flussbettes DRN_{cond} . Die in den Fluss fließende Wassermenge Q_{out} wird über folgende Formel bestimmt (nach Harbaugh, 2005, Gl. 6-10):

$$Q_{out} = \text{DRN}_{cond} \cdot (h_{i,j,k} - \text{DRN}_{elev}) \quad (3.1)$$

wobei $h_{i,j,k}$ die Standrohrspiegelhöhe in der am Fluss befindlichen Zelle (mit den Koordinaten i, j und k) ist. Q_{out} kann per Definition nicht unter null fallen.

Die Eingabe der Modellparameter erfolgt über mehrere Text-Dateien. Das sogenannte *Name file* beschreibt dabei, welche Dateien der einzelnen Pakete eingelesen werden sollen, und ist beispielhaft in Abbildung 3.3 abgebildet. Neben den Dateien, die die Modellparameter beschreiben, sind noch solche für den Lösungsalgorithmus (siehe Kapitel 3.3.6) und die Steuerung der Ausgabedateien notwendig.

# Model for Steady state conditions 2006				Name der Protokolldatei
LIST	11	BS 2006 SS.1st	REPLACE	
DIS	12	Basic.dis	OLD	Diskretisierung, Zelleigenschaften
BAS6	13	Basic.bas	OLD	
LPF	70	BS_2006_SS.lpf	OLD	
CHD	77	BS_2006_SS.chd	OLD	Randbedingungen
WEL	71	BS_2006_SS.wel	OLD	
DRN	72	BS_2006_SS.drn	OLD	
RCH	73	BS_2006_SS.rch	OLD	
PCG	78	BS_2006_SS.pcg	OLD	Lösungsalgorithmus, Steuerung Ausgabedateien
OC	39	BS_2006_SS.oc	OLD	
CFP	74	BS_2006_SS.cfp	OLD	Röhren: Geometrie, Eigenschaften, Output
CRCH	75	BS_2006_SS.crch	OLD	
COC	76	BS_2006_SS.coc	OLD	
DATA (BINARY)	37	BS_2006_SS.bhd	REPLACE	Name der Ausgabedatei

Abbildung 3.3: Beispiel eines *Name file* in MODFLOW-CFP. Die Datei gibt an, unter welchen Namen und ggf. Dateipfaden die einzulesenden Eingabedateien zu finden sind.

3.3 Parametrisierung des Modells und Datengrundlage

In den folgenden Abschnitten werden die Eingangsdaten für einen anfänglichen Modelllauf samt Herkunft beschrieben. Abschnitt 3.3.1 findet auch auf die folgenden Kapitel Anwendung.

3.3.1 Allgemeine Anmerkungen

Als Grundlage für die Sensitivitätsanalyse und zur Sicherstellung der korrekten Funktion wurde zunächst das kalibrierte Modell von Gallegos (2011), was auf den Vorgänger-Modellen von Davis et al. (2010), Davis und Katz (2007) und Davis (1996) basiert, mit den unten genannten Veränderungen erneut parametrisiert. Die dazu benötigten Daten wurden aus dem Datenpaket von Kuniansky (2016a) entnommen. Da kombinierte Messungen von Standrohrspiegelhöhen und Quellschüttungen im Gebiet nur an zwei Zeiträumen (November 1991 und Mai/Juni 2006) durchgeführt wurden (Davis et al., 2010, S. 35), sollte die Modellierung für diese Zeiten stattfinden. Der Zeitraum Mai/Juni 2006 wurde jedoch ausgeschlossen, da zu diesem Zeitpunkt ein besonderer Prozess stattfindet, der von MODFLOW-CFP nicht modelliert werden kann. An der Spring Creek-Quelle tritt salziges Meereswasser ins Höhlensystem ein und sorgt durch seine größere Dichte für ein höheres hydraulisches Potential in der entsprechenden Höhle. Dadurch tritt an der Spring Creek-Quelle kein Wasser mehr aus, sondern weiter nordwärts an der Wakulla-Quelle, obwohl diese höher als die Spring Creek-Quelle liegt. Im Mo-

dell von Gallegos wurde dieser Effekt durch eine erhöhte Standrohrspiegelhöhe an der Spring Creek-Quelle abgebildet, die sich in der Realität jedoch auf Meereshöhe befindet (eine genauere Beschreibung des Phänomens befindet sich in Davis et al., 2010). Diese Veränderung sorgt in der Umgebung der Spring Creek-Quelle für unrealistische Bedingungen, daher wurde der Datensatz aus 2006 nicht verwendet. Im November 1991 trat keine Salzwasserintrusion auf und die Daten konnten daher benutzt werden.

Aus dem Modell von Gallegos wurden die hydrologischen Daten unverändert übernommen, lediglich folgende Veränderungen, mit denen die Laufzeit von 6:18 Minuten auf 2:19 Minuten verringert werden konnte, wurden vorgenommen:

- Verwendung der aktuellen Forschungsversion von MODFLOW-CFP (Version 1.9.25 „CFPv2“ vom 04.06.2013, Reimann et al. (2013))
- Änderung der MODFLOW-internen Methode zum Einlesen einiger Datensätze
- Anpassung der Parameter des Lösungsalgorithmus
- Festlegung der MODFLOW-Ausgabedateien auf „formatierte“ Standrohrspiegelhöhen und Zellbudgets
- Änderung der MODFLOW-CFP-Ausgabedatei, sodass nur die Röhrenabschnitte an den Quellen ausgegeben werden

3.3.2 Räumliche Diskretisierung des Gebiets

Das Modellgebiet ist ein Ausschnitt aus einem größeren und gröber aufgelösten Modell von Davis und Katz (2007). Die Diskretisierung in 258 Zellen in Ost-West-Richtung und 288 Zellen in Nord-Süd-Richtung stammt ursprünglich von Davis et al. (2010). Obwohl der Karstaquifer vertikal durchgängig ist, ist das Modell in zwei Schichten aufgeteilt, um die Orte der Trinkwasserbrunnen besser darstellen zu können (Davis und Katz, 2007). Jede Zelle ist horizontal 500 x 500 Fuß (ft) groß. Die Schichten 1 und 2 bilden den *Upper Floridan Aquifer*, dessen Mächtigkeit zwischen unter 500 und über 1700 Fuß variiert. Schicht 1 repräsentiert dabei die obersten 200 Fuß (Davis und Katz, 2007; Davis et al., 2010). Die zugrunde liegenden geologischen Untersuchungen stammen von Miller (1986) und Davis et al. (2010).

3.3.3 Zelleigenschaften

Eine wichtige Eigenschaft der Zellen für den Grundwasserfluss ist die hydraulische Leitfähigkeit. Diese wurde im Modell von Gallegos (2011) weitgehend aus Davis et al. (2010)

übernommen, mit Ausnahme der stark durchlässigen Zellen, mit denen Davis et al. in MODFLOW-2000 das Röhrennetzwerk nachbildeten. Da MODFLOW-CFP ein diskretes Röhrennetzwerk zulässt, setzte Gallegos die erhöhten Leitfähigkeiten an den entsprechenden Stellen wieder herab und passte sie den benachbarten Matrixzellen an. Da der Aquifer keine stauenden Schichten aufweist, wird die hydraulische Leitfähigkeit als isotrop betrachtet. Die hydraulische Leitfähigkeit schwankt mit Werten von unter 30 ft/d im westlichen Modellteil bis zu über 3000 ft/d im Nordosten stark.

3.3.4 Randbedingungen

Feste Standrohrspiegelhöhen

An allen Modellgrenzen außer im Südosten wurden die Standrohrspiegelhöhen auf konstante Werte gesetzt, die aus dem kalibrierten, großflächigeren Modell von Davis und Katz (2007) stammen. Der südöstliche Abschnitt der Modellgrenze bilden undurchlässige *No flow*-Zellen. In diesem Bereich zeigen die Ergebnisse von Davis und Katz (2007) einen Grundwasserfluss parallel zur Grenze, weshalb dort kein Zu- oder Abfluss über die Modellgrenze zu erwarten ist. Weitere Zellen mit fester Standrohrspiegelhöhe sind an den Orten der drei Quellen *Spring Creek*, *Wakulla* und *St Marks*. Über die Modellgrenzen fließt die größte Wassermenge in das Modellgebiet hinein (siehe Ergebnisse).

Grundwasserneubildung und sonstige Zuflüsse

Mit dem RCH-Paket (Harbaugh, 2005) wurde die Grundwasserneubildung durch Niederschlag und die Verrieselung von Abwasser der Stadt Tallahassee an zwei Standorten berücksichtigt. Die Grundwasserneubildung wird als stationär betrachtet und in Davis und Katz (2007, S.9) beschrieben. Die Daten zur Abwasserverrieselung sind instationär und stammen von Jamie Shakar, Stadt Tallahassee (schriftliche Kommunikation, 2005, zitiert in Davis et al. (2010)). Mit dem WEL-Paket (Harbaugh, 2005) wurden dezentrale Abwasserverrieselungen (englisch *Onsite sewage disposal systems*) modelliert. Die Daten für die Abwasser-Verrieselungsmengen stammen von Davis et al. (2010), welcher eine Schätzung von Chelette et al. (2002) verwendete. Die Grundwasserneubildung durch Niederschlag bildet die zweitgrößte Wassermenge, die in das Modell einfließt.

Flüsse

Zur Simulation von Flüssen, die diffus von Grundwasser gespeist werden, wurde das DRN-Paket (Harbaugh, 2005) verwendet. Hierbei wurden der Wakulla und St. Marks

River modelliert, die von der Wakulla- und der St. Marks-Quelle gespeist werden. Infiltrierendes Wasser vom Fluss ins Grundwasser ist im Modell nicht möglich.

3.3.5 Röhrennetzwerk

Das Röhrennetzwerk wurde erstellt von Gallegos (2011) nach Vorlage des MODFLOW-2000-Modells von Davis et al. (2010), wo die Röhren durch Zellen mit erhöhter hydraulischer Leitfähigkeit dargestellt worden waren. Es besteht aus 1083 Knoten, die durch 1087 Röhrensegmente verbunden sind. Die Basis dafür bilden Kartierungen von Höhlenforschern und Vermutungen vorhandener Höhlen durch kurze Fließzeiten in Tracerversuchen, hohe Schlucklochdichten und Beobachtungen von Höhlentauchern. Der Röhrendurchmesser für die kartierten Abschnitte wurde von Höhlentauchern bestimmt (T. Kincaid, Geohydros, Inc. und C. McKinlay, Global Underwater Explorers, persönliche Kommunikation, 2010, zitiert in Gallegos et al. (2013)). In den übrigen Röhren wurde der Durchmesser kalibriert oder anhand vorhandener Felddaten geschätzt (H. Davis, USGS, persönliche Kommunikation, 2010, zitiert in Gallegos et al. (2013)). Für die Tortuosität wurde mit den Kartierungen ein Wert von 1,6 berechnet und auf alle Röhren angewendet. Die Rauigkeit der Röhrenwände ist ein geschätzter, unkalibrierter Wert und beträgt 0,1 ft, ebenso wie die kritischen Reynolds-Zahlen, die auf 2000 und 8000 festgelegt werden. Die Durchlässigkeit der Röhrenwand wurde kalibriert.

Die Wassertemperatur beträgt konstant 20,5 °C, gemessen als Durchschnittstemperatur im Wakulla-Höhlensystem (Gallegos, 2011; Gallegos et al., 2013).

3.3.6 Lösungsalgorithmus

Als Lösungsalgorithmus für die Berechnungen in der Gesteinsmatrix wurde das Paket „Preconditioned Conjugate-Gradient“ (PCG) verwendet. Dieses versucht in wiederholten Iterationen, die Differenzialgleichungen zu lösen, bis die sogenannten Konvergenzkriterien erreicht sind, bei denen die Berechnung als erfolgreich betrachtet wird. Die Konvergenzkriterien sind das *head change criterion* mit dem Parameter HCLOSE und das *Residual criterion* mit dem Parameter RCLOSE. HCLOSE gibt die maximal erlaubte Änderung der Standrohrspiegelhöhe im Vergleich zur vorherigen Iteration an. RCLOSE ist die Differenz zwischen den ein- und ausfließenden Wassermengen in jeder Zelle. Sind beide Kriterien für jede Zelle erreicht, konvergiert die Berechnung. Können die Gleichungen nicht innerhalb von einer bestimmten Anzahl „äußerer“ und „innerer“ Iterationen, bestimmt durch die Parameter MXITER und ITER1, gelöst werden, wird die Berechnung abgebrochen (Harbaugh, 2005). Zum Rekonstruieren des Modells von

Gallegos (2011) wurden die Lösungsparameter so weit gelockert, dass die Laufzeit verringert werden konnte, aber dennoch der Fehler klein blieb (siehe Tabelle 3.1).

Der Abfluss in den Röhren wird durch nichtlineare Gleichungen in sogenannten Newton-Raphson-Iterationen berechnet. Dabei muss die Wasserbilanz in jedem Röhrenabschnitt, ausgedrückt durch das Kirchhoff-Gesetz, stimmen. Die Konvergenz der nichtlinearen Gleichungen wird durch den Parameter EPSILON bestimmt. Weitere wichtige Parameter sind NITER, der die maximale Anzahl der Iterationen festlegt, und RELAX, der die Schrittweite der Newton-Raphson-Iterationen festlegt (**Shoemaker et al., 2008b**). Die verwendeten Werte sind in Tabelle 3.1 aufgelistet.

Die Wahl der Konvergenzkriterien beeinflusst die Genauigkeit der Gesamtlösung, daher ist es im Anschluss an den Modelllauf notwendig, auf die Wasserbilanz des Gesamtmodells zu achten. In MODFLOW werden die Wasserbilanzen der Röhren und auch aller Zellen inklusive der Röhren ausgegeben. Die Fehler beider Bilanzen sollten möglichst gering sein.

Tabelle 3.1: Wichtigste Parameter des Lösungsalgorithmus bei der anfänglichen Parametrisierung (die von **Gallegos (2011)** abweichenden Parameter *MXITER*, *ITER1*, *HCLOSE* und *RCLOSE* entsprechen der Empfehlung von Thomas Reimann, TU Dresden, schriftliche Kommunikation, 2017)

Parameter	Wert	Einheit	Eingangsdatei
MXITER	30	—	PCG
ITER1	20	—	PCG
HCLOSE	1	ft	PCG
RCLOSE	100	ft^3/d	PCG
EPSILON	0.01	—	CFP
NITER	100	—	CFP
RELAX	0.99	—	CFP

3.3.7 Vergleich mit dem Original-Modell

In Kapitel 4.1 wird das neu aufgesetzte Modell mit dem Originalmodell von **Gallegos (2011)** verglichen. Die modellierten Quellabflüsse der Spring Creek Springs- und Wakulla-Quellen entsprechen den durch die Röhren fließenden Wassermengen an den Quellorten (Spring Creek: Zeile 270, Spalte 89; Wakulla: Zeile 156, Spalte 109). Für die St. Marks-Quelle (Zeile 124, Spalte 204) wird zusätzlich noch der vorhandene Abfluss des St. Marks River oberhalb der Quelle berücksichtigt. Die geschieht durch die Aus-

wertung der Wasserbilanz aus dem Drain-Paket. Umgesetzt wird dies mit Zone Budget (Harbaugh, 1990), und berücksichtigt werden alle Flussabschnitte im Oberlauf bis Zelle 128, 205 (Zeile, Spalte). Zusätzlich wird die Wassermenge berücksichtigt, die die Matrix in der Quellzelle verlässt, da diese eine konstante Standrohrspiegelhöhe besitzt und dort Wasser das Modell verlässt.

Für den betrachteten Zeitraum existieren 13 Grundwassermessstellen, deren Verteilung im Modellgebiet in Abbildung 4.2 zu sehen ist.

3.4 Sensitivitätsanalyse

3.4.1 Methodenbeschreibung

Die Sensitivitätsanalyse soll dazu dienen, eine Rangliste der wichtigsten Parameter anzufertigen (*ranking*). Um den gesamten Parameterraum abzudecken, wird der *Elementary Effects-Test* (EET) angewendet, welchen Pianosi et al. (2016) in die Gruppe der *Multipe-starts perturbation*-Methoden einordnen. Diese ursprünglich von Morris (1991) veröffentlichte Methode wird in veränderter Form mit radialem Stichprobendesign nach Campolongo et al. (2011) durchgeführt. Die Parameter werden durch *Latin Hypercube Sampling* gezogen. Zur Durchführung der Berechnungen und Erstellung der Grafiken dient das Software-Paket *SAFER* (Pianosi et al., 2015) als Grundlage, welches zusammen mit R (R Core Team, 2017) verwendet wird.

Für die Sensitivitätsanalyse wird die grundlegende Struktur des Modells und die Datengrundlage weitgehend vom anfänglichen Modell (Kapitel 3.3) übernommen. Lediglich die festen Standrohrspiegelhöhen in der Matrix der Quellzellen wurden entfernt (in den Röhren sind diese weiterhin festgesetzt). Weiterhin wurden kleinere Veränderungen an der Menge der ausgegebenen Größen und an den Parametern des Lösungsalgorithmus vorgenommen.

Der Ablauf der Analyse soll in vier Schritte eingeteilt werden, nämlich in Vorbereitung (*preprocessing*), Modellausführung, Nachbereitung (*postprocessing*) und weitere Analyse (siehe Abbildung 3.4).

Vorbereitung (Preprocessing)

Im ersten Schritt des EET werden Parameter bestimmt, für die die Sensitivität getestet werden soll. Für jeden Parameter wird ein plausibler Wertebereich angegeben und so der mehrdimensionale Parameterraum aufgespannt. Innerhalb dieses Raums wird anschließend ein Startpunkt gezogen (der sogenannte „initiale Parametersatz“; mittlerer

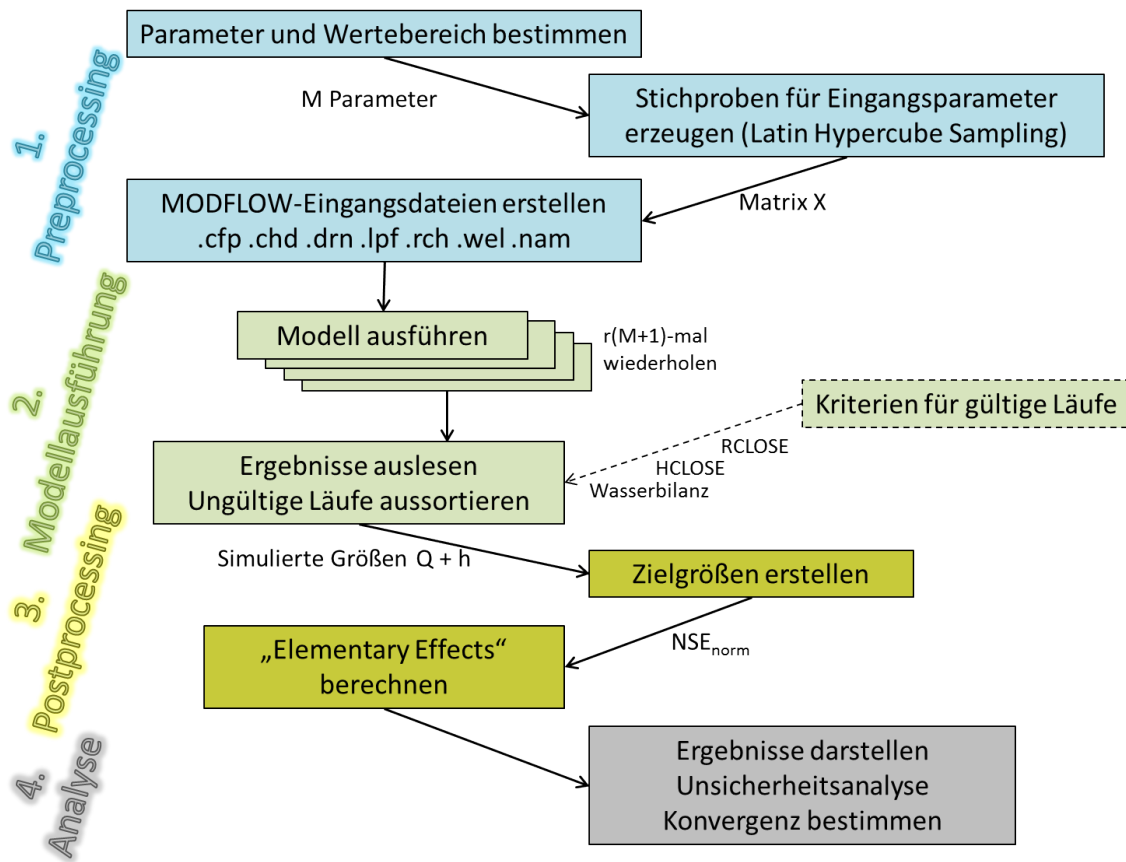


Abbildung 3.4: Arbeitsablauf der Sensitivitätsanalyse

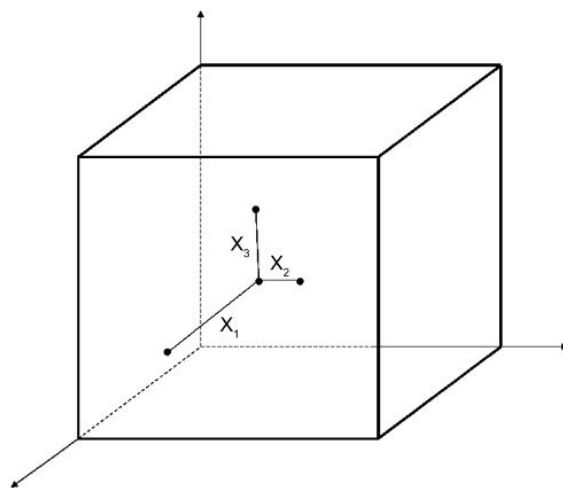


Abbildung 3.5: Beispiel eines radialen Stichprobendesigns im dreidimensionalen Raum (aus Campolongo et al., 2011).

Punkt in Abb. 3.5). Weitere Punkte werden gebildet, indem jeweils nur ein Parameter ausgehend vom Startpunkt variiert wird. So ergibt sich ein Bild wie in Abb. 3.5. Dieses Vorgehen wird für verschiedene Startpunkte mehrfach wiederholt, bis möglichst der gesamte Parameterraum repräsentiert ist. Durch das Stichprobendesign *Latin Hypercube Sampling* (LHS) soll sichergestellt werden, dass die Werte jedes Parameters gleichmäßig im Wertebereich verteilt sind. Für jeden Punkt wird nun ein Modelllauf mit den entsprechenden Parameterwerten durchgeführt, somit sind für r Startpunkte und M Parameter $r \cdot (M + 1)$ Modellläufe notwendig.

Modellausführung

Der zweite Schritt ist die Modellausführung. Mit einem *R*-Algorithmus werden die benötigten Inputdateien für *MODFLOW* erstellt, das Modell automatisiert gestartet und die Ergebnisse abgespeichert. Zusätzlich werden Fehlermeldungen ausgelesen und in Textdateien umgewandelt. Verschiedene Modellergebnisse können je nach Fragestellung relevant sein. Daher werden für alle Modellläufe die Standrohrspiegelhöhen in 13 Zellen sowie die Abflussmengen von drei großen Karstquellen betrachtet, zu denen jeweils auch Messwerte vorliegen. Die Quellabflüsse werden aus der Wasserbilanz des jeweiligen Röhrenknotens, an dem sich die Quelle befindet, ermittelt (Größe *QFIX* in der Ausgangsdatei). Bei der St. Marks-Quelle wird noch die Wassermenge hinzugerechnet, die sich bereits im St. Marks River bis einschließlich Zelle (128, 205) befindet, wie bereits in Kapitel 3.3.7 beschrieben.

Wenn die Parameter zufällig aus einem größeren Wertebereich gezogen werden, kommt es bei bestimmten Parameterkombinationen vor, dass die Konvergenzkriterien innerhalb der maximalen Anzahl Iterationen nicht erreicht werden. Für den Zweck der Sensitivitätsanalyse, bei der eher die Ergebnisunterschiede und nicht das exakte Ergebnis interessieren, werden deshalb die Konvergenzkriterien im Vergleich zu Kapitel 3.3.6 gelockert. Da sich jedoch die Konvergenzkriterien nur auf einzelne Zellen beziehen (vgl. Kapitel 3.3.6), könnte die Berechnung bereits stoppen, wenn die Wasserbilanz des Gesamtmodells noch hohe Fehler aufweist. Es muss also durch die Steuerung der Konvergenzkriterien ein Kompromiss gefunden werden zwischen einem möglichst geringen Fehler der Wasserbilanz und dem Erreichen der Konvergenz aller Einzelzellen. Für die Sensitivitätsanalyse wird daher ein zweistufiges Verfahren verwendet: Die Konvergenzkriterien werden auf relativ enge Werte festgesetzt (Tabelle 3.2), damit die Gesamtwasserbilanz möglichst geringe Fehler erreicht. Damit erhöht sich die Anzahl der Läufe, die nicht konvergieren. Bei diesen wird im Modellprotokoll manuell überprüft, wie weit das Erreichen der Konvergenz entfernt war. Auch der Fehler der Wasserbilanzen im Gesamt-

Tabelle 3.2: Wichtigste Parameter des Lösungsalgorithmus in der Sensitivitätsanalyse (Beschreibung in Kapitel 3.3.6).

Parameter	Wert	Einheit	Eingangsdatei
MXITER	100	—	PCG
ITER1	20	—	PCG
HCLOSE	1	ft	PCG
RCLOSE	1000	ft^3/d	PCG
EPSILON	0.001	—	CFP
NITER	100	—	CFP
RELAX	0.99	—	CFP

Tabelle 3.3: Konvergenzkriterien, die alle gültigen Läufe erfüllen müssen. Die Größe E_{Bil} (Bilanzfehler) bezieht sich sowohl auf die Gesamtwasserbilanz als auch die Röhrenwasserbilanz, welche beide die Kriterien erfüllen müssen. Der Grenzwert für die Wasserbilanzen ist angelehnt an eine Empfehlung von Dr. Thomas Reimann (TU Dresden, schriftliche Kommunikation, 2017). [Anm.: $\wedge$ entspricht „UND“]

Bedingung	Einstufung des Laufs
$hclose < 1 \wedge rclose < 10000 \wedge E_{Bil} < 10\%$	gültig
$hclose < 1 \wedge rclose < 20000 \wedge E_{Bil} < 5\%$	gültig
alle anderen Möglichkeiten	ungültig

modell und in den Röhren wird überprüft. Nach den Regeln in Tabelle 3.3 wird endgültig entschieden, welche Läufe anerkannt werden. Das beschriebene Vorgehen mit gelockerten Konvergenzkriterien ist sinnvoll, um für die Sensitivitätsanalyse eine möglichst hohe Anzahl gültiger Läufe zu bekommen. Für den Erhalt einer exakten Lösung sollten bei einem finalen Modelllauf, wenn die optimalen Parameter bekannt sind, die Kriterien wieder strenger gesetzt werden.

Nachbereitung (postprocessing)

Im dritten Schritt, dem *postprocessing*, werden die Ausgangsgrößen des Modells bearbeitet, um Maße für die Sensitivität zu erhalten. Für unterschiedliche Fragestellungen wird die Sensitivitätsanalyse (a) auf die Quellabflüsse, (b) auf die Standrohrspiegelhöhen und (c) auf beide Größen kombiniert bezogen. Dazu wird zunächst aus den berechneten physikalischen Größen ein Maß für die Modellgüte errechnet. Hierzu eignet sich die Nash-Sutcliffe-Efficiency NSE , die sich folgendermaßen errechnet (verändert nach Nash

und Sutcliffe, 1970):

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (obs_i - sim_i)^2}{\sum_{i=1}^n (obs_i - \overline{obs})^2} \quad (3.2)$$

mit den berechneten Werten sim , dem beobachteten Werten obs , dem Mittelwert aller beobachteten Werte $\overline{obs}$ und der Anzahl der beobachteten Werte n . Verwendet wird dazu das R-Paket *hydroGOF* (Bigiarini, 2017). Die NSE wird sowohl für die Quellabflüsse als auch für die Standrohrspiegelhöhen durchgeführt. Da diese beiden Größen unterschiedliche Einheiten besitzen und ihr Zahlenwert in unterschiedlichen Größenordnungen liegt, sind die Werte für die NSE nicht miteinander vergleichbar. Auf die kombinierte Betrachtung (c) hätte bei einer Mittelwertbildung die Größe mit den größeren Zahlenwerten mehr Einfluss. Deshalb werden die Werte der NSE normiert, sodass sich ein Mittelwert von 0 und eine Standardabweichung von 1 ergibt:

$$NSE_{norm} = \frac{(NSE - \overline{NSE})}{sd(NSE)} \quad (3.3)$$

mit der normierten NSE NSE_{norm} , dem Mittelwert $\overline{NSE}$ und der Standardabweichung sd der NSE von allen Modellläufen. Die NSE_{norm} wird drei Mal errechnet, nämlich für die Quellabflüsse (a), für die Standrohrspiegelhöhen (b) und für beide Größen kombiniert (c) als Mittelwert der normierten NSE von (a) und (b).

Aus den normierten Werten für die NSE können die *Elementary Effects* bestimmt werden, wofür das R-Paket *SAFER* (Pianosi et al., 2015) verwendet wird. Anhand von Abbildung 3.5 lässt sich das Verfahren beispielhaft für die Parameter 1, 2 und 3 und für einen Mittelpunkt nachvollziehen. Für jeden Parameter wird ein *Elementary Effect* EE berechnet, wofür jeweils der Mittelpunkt P_0 sowie ein äußerer Punkt P_i verwendet werden. Die beiden Punkte unterscheiden sich nur in einem Parameter, die Differenz ist in Abb. 3.5 als X_1 , X_2 und X_3 bezeichnet. Für einen beliebigen Parameter i lässt sich die Berechnung folgendermaßen darstellen:

$$EE_i = \frac{|NSE_{norm,P_i} - NSE_{norm,P_0}|}{|X_i|} \cdot R_i \quad (3.4)$$

wobei R_i die Spanne des Wertebereichs von i ist und als Skalierungsfaktor dient. Die *Elementary Effects* werden für jeden Parameter und für jeden der r Mittelpunkte berechnet.

Für den endgültigen **Sensitivitätsindex** S_i , mit dem die Parameter verglichen werden

können, wird der Mittelwert aus allen *Elementary Effects* gebildet (Pianosi et al., 2016):

$$S_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r EE_i^j \quad [= \text{mean}\{EE_i^{j=1}, EE_i^{j=2}, \dots, EE_i^{j=r-1}, EE_i^{j=r}\}] \quad (3.5)$$

Der Varianzkoeffizient CV dient als Maß für die Interaktion zwischen den Parametern:

$$CV_i = \frac{sd\{EE_i^{j=1}, EE_i^{j=2}, \dots, EE_i^{j=r-1}, EE_i^{j=r}\}}{S_i} \quad (3.6)$$

jeweils für die Parameter $i \in \{1, \dots, M\}$ und Mittelpunkte $j \in \{1, \dots, r\}$.

Weitere Analyse

Weitere Analysewerkzeuge werden angewendet, um die Aussagekraft des Ergebnisses zu bestimmen:

- Unsicherheit mit Bootstrapping:

Um einen Unsicherheitsbereich für die Sensitivitätsindizes zu bestimmen, wird das Bootstrap-Verfahren angewendet. Dazu werden aus allen *Elementary Effects* Zufallsstichproben mit Zurücklegen gezogen, mit jeweils der gleichen Größe wie die ursprünglichen Elementary Effects. Durch das Zurücklegen werden mit hoher Wahrscheinlichkeit manche Zahlen doppelt gezogen, somit ändert sich auch der Sensitivitätsindex bei jeder Stichprobe. Von den Sensitivitätsindizes aus 1000 Stichproben werden jeweils die größten und kleinsten 2.5 % abgeschnitten, die restlichen Werte bilden den Unsicherheitsbereich.

- Sind genügend Modellläufe gemacht worden?

In der Konvergenzprüfung soll getestet werden, ob die Anzahl der Modellläufe ausreichend ist, um die Ergebnisse sicher bestimmen zu können. Hierbei kann die Antwort je nach interessierender Größe unterschiedlich sein. Die **Sensitivitätsindizes** können als stabil betrachtet werden, wenn der größte Unsicherheitsbereich (das Konfidenzintervall) aller Sensitivitätsindizes weniger als 5 % des größten Sensitivitätsindex ausmacht (Sarrazin et al., 2016).

Geht es um die **Rangfolge** der Sensitivitätsindizes, schlagen Sarrazin et al. (2016) folgendes Verfahren vor: Aus den Ergebnissen des Bootstrapping sollen Paare gebildet werden, um eine nach dem Rang gewichtete Korrelation ρ_s zu bestimmen. Dabei schlagen sie eine spezielle Gewichtungsmethode vor, die die sensitiven Parameter deutlich stärker gewichtet als die insensitiven. Für ein Paar der Bootstraps

j und k wird ρ_s wie folgt bestimmt (Sarrazin et al., 2016, Gl. 2):

$$\rho_{s,j,k} = \sum_{i=1}^M |R_i^j - R_i^k| \frac{\max_{j,k}(S_i^j, S_i^k)^2}{\sum_{i=1}^M \max_{j,k}(S_i^j, S_i^k)^2} \quad (3.7)$$

wobei R_i der Rang des jeweiligen Parameters i , j und k unterschiedliche Bootstraps, M die Anzahl der Parameter, und S_i der Sensitivitätsindex des Parameters i ist. Für j und k empfehlen Sarrazin et al. (2016), alle möglichen Bootstrap-Kombinationen zu bilden, das sind bei 1000 Bootstraps $\sum_{i=1}^{999} i = 499\,500$ Kombinationen. Aus Gründen der einfacheren Berechnung werden stattdessen nur $\sum_{i=995}^{999} i = 4\,985$ Paare betrachtet. Die Resultate sind in den untersuchten Fällen auch bei geringerer Anzahl bereits stabil. Die Rangfolge der Sensitivitätsindizes wird als stabil betrachtet, wenn das 95. Perzentil aller berechneten ρ_s unter 1 liegt. Diese Größe wird in den Ergebnissen als $\text{Stat}_{\text{ranking}}$ bezeichnet.

- Identifizierung wichtiger Quellen und Grundwassermessstellen

Bei dieser Untersuchung soll festgestellt werden, ob eine der betrachteten Quellen oder Grundwassermessstellen einen herausragenden Einfluss auf das Ergebnis hat. Dazu werden die Sensitivitätsindizes anhand der NSE (nicht normierte NSE!) berechnet, wobei jeweils eine Quelle bzw. eine Grundwassermessstelle ignoriert wird. Dieser Wert wird dividiert durch den Sensitivitätsindex mit allen Quellen bzw. Messstellen. Liegen dann alle Ergebnisse in der Nähe von 1, ist der Einfluss von allen Quellen bzw. Messstellen ungefähr gleich.

3.4.2 Räumlich einheitliche Parametervariation

Der erste Teil der Sensitivitätsanalyse betrachtet die Parameter im gesamten Modellgebiet einheitlich. Der Wertebereich der Parameter wurde zunächst subjektiv oder anhand von Literaturwerten festgelegt, jedoch nach ersten Modellläufen durch die Betrachtung der Modellgüte auf sinnvolle Werte angepasst. Als Beispiel soll Abbildung 3.6 aus einem der ersten Modellläufe dienen: Da die Modellgüte im Randbereich stark abnimmt, wurde der Wertebereich von $\{-1.8 \dots +1.8\}$ auf $\{-1.5 \dots +1.4\}$ angepasst.

Je nach Art des Parameters besitzt der Wertebereich unterschiedliche Bedeutungen (Tabelle 3.4). Bei Parametern, die in allen Zellen den gleichen Wert besitzen, wird der Wertebereich als absolute Zahl angegeben, so beispielsweise bei der Wassertemperatur. Bei Parametern, die in den Zellen unterschiedliche Werte besitzen, bezeichnet der Wertebereich einen Faktor, mit dem die ursprünglichen Werte multipliziert werden. So soll das Verhältnis von großen und kleinen Werten im Modell erhalten bleiben. Bei einer weiteren

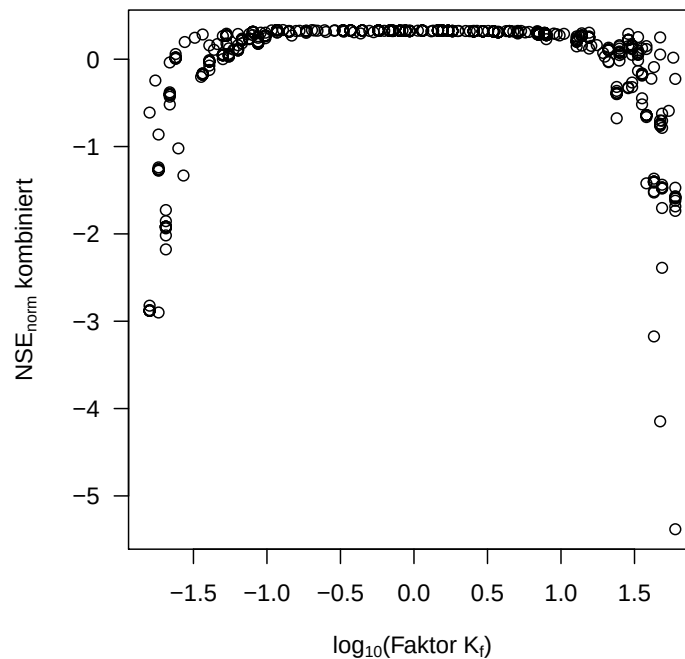


Abbildung 3.6: Scatter-Plot der Modellgüte (normierte Nash-Sutcliffe-Efficiency bezogen auf Abflüsse und Standrohrspiegelhöhen) abhängig von der Variation des Parameters K_f in einem Probelauf des Modells

Gruppe von Parametern muss der Wertebereich transformiert werden, weil sie über mehrere Größenordnungen schwanken können (zum Beispiel die hydraulische Leitfähigkeit). Eine uniforme Wahrscheinlichkeitsverteilung der Stichproben, wie sie im *preprocessing* angewandt wird, würde sonst mehr Werte in den hohen Größenordnungen hervorbringen. Damit alle Größenordnungen gleichmäßig in den Stichproben vorkommen, muss der Wertebereich logarithmiert werden. Damit stellt die gezogene Zahl den Logarithmus des Faktors dar, mit dem der ursprüngliche Parameterwert multipliziert werden soll. Wurde beispielsweise die Zahl x als Stichprobe aus dem Wertebereich gezogen, werden alle Parameterwerte mit der Zahl 10^x multipliziert. Schließlich gibt es noch diejenigen Parameter, die eine Höhe angeben, nämlich die Höhe des Wasserspiegels der Flüsse, DRN_{Elev} , und die Standrohrspiegelhöhe an den Modellrändern, CHD . Hier bedeutet der Wertebereich eine Addition zum (bzw. Subtraktion vom) ursprünglichen Wert. Sollte der Wert dadurch negativ werden, wird er auf Null gesetzt.

Als Zahl für die unterschiedlichen Startpunkte (bzw. „initiale Parametersätze“) wird 60 festgelegt. Dies ergibt für 11 Parameter 720 Modellläufe. In einem ersten Modelllauf wurden die kritischen Reynoldszahlen als zusätzliche Parameter verwendet. Ihre Sensitivität war jedoch sehr gering, daher wurden sie zugunsten eines geringeren Rechenaufwandes nicht weiter untersucht.

Tabelle 3.4: Parameter der Sensitivitätsanalyse und zugehörige Wertebereiche. Letztere entsprechen entweder dem Absolutwert („absolut“), dem Faktor („Faktor“), dem Summanden („Summand“) oder dem 10er-Logarithmus des Faktors („ $\log_{10}$ “)

Parameter [Dimension]	Abkürzung	Wertebereich Sampling	Bedeutung des Wertebereichs
hydraulische Leitfähigkeit (isotrop) [LT^{-1}]	K_f	$-1.5 \dots +1.4$	$\log_{10}$
Wassertemperatur [Θ]	Temp	$16.5 \dots 23.5$	absolut ($^{\circ}\text{C}$)
Röhrendurchmesser [L]	d	$0.35 \dots 1.65$	Faktor
Tortuosität [-]	Tort	$1.2 \dots 2$	absolut
Röhrenrauhigkeit [L]	Roug	$-1 \dots +0.5$	$\log_{10}$
Durchlässigkeit Matrix-Röhren [L^2T^{-1}]	Exch	$-1.5 \dots +1.5$	$\log_{10}$
Brunnen Input [L^3T^{-1}]	WEL	$0.7 \dots 1.3$	Faktor
Grundwasserneubildung [LT^{-1}]	RCH	$0.5 \dots 1.5$	Faktor
Randbedingung Drainage - Höhe [L]	DRN_{elev}	$-4 \dots +4 \text{ ft } (\geq 0)$	Summand
Randbedingung Drainage - Durchlässigkeit [L^2T^{-1}]	DRN_{cond}	$-2.1 \dots +2.1$	$\log_{10}$
Standrohrspiegelhöhe Modellrand [L]	CHD	$-4 \dots +4 \text{ ft } (\geq 0)$	Summand

3.4.3 Räumlich verteilte Parametervariation

Beim zweiten Teil der Sensitivitätsanalyse werden die Parameter mit der größten Sensitivität, hydraulische Leitfähigkeit und Grundwasserneubildung, räumlich aufgeteilt und einer räumlich verteilten Sensitivitätsanalyse unterzogen. Aus Gründen der Rechenkapazität wird das Modellgebiet in 4 Bereiche, basierend auf der Höhe der ursprünglichen K_f -Werte und möglichst gleich groß, aufgeteilt (siehe Abbildung 3.7). Die Grenzen zwischen den Bereichen liegen bei den Werten 30, 300 und 3000 ft/d , wobei die Grenzzahl zum darunter liegenden Bereich gehört. Für die Grundwasserneubildung wird die gleiche räumliche Aufteilung wie für die hydraulische Leitfähigkeit des obersten Layers verwendet. So werden aus ursprünglich zwei Parametern acht, was die Gesamtzahl auf 17 erhöht. Die Wertebereiche für die Variation der räumlich verteilten Parameter bleiben unverändert wie in Tabelle 3.4 beschrieben.

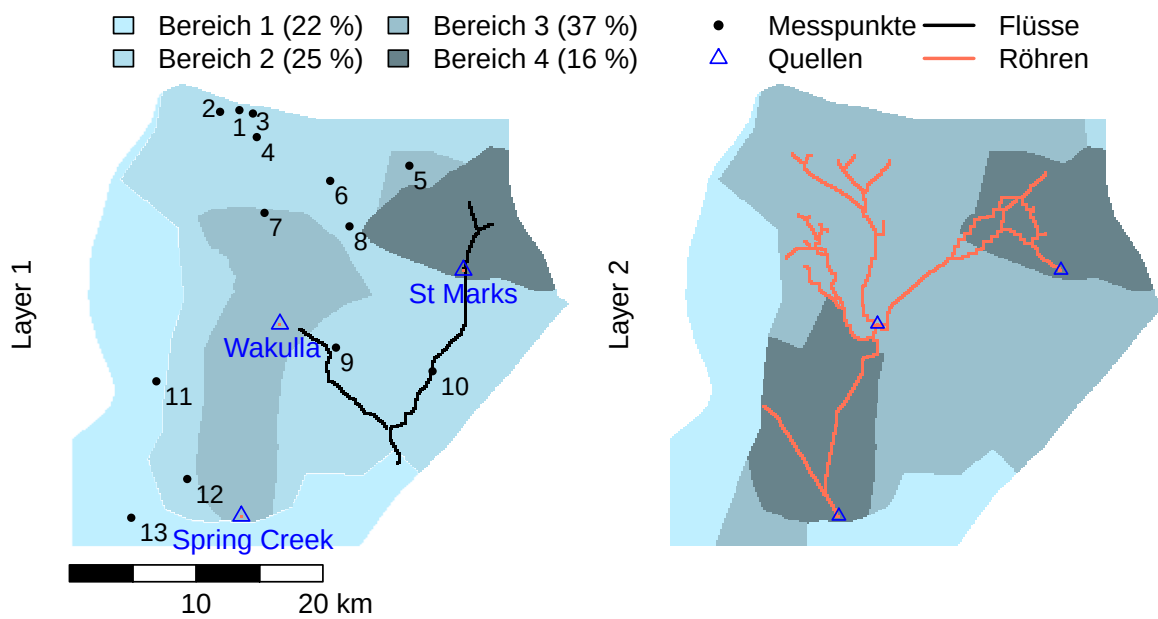


Abbildung 3.7: Bereiche für die räumlich verteilte Sensitivitätsanalyse der Parameter K_f und RCH . In der Legende finden sich die Anteile der Zellen am Gesamtmodell. Insgesamt besteht es aus 104.972 aktiven Zellen. Zur Orientierung sind die modellierten Flüsse, Röhren, Grundwassermessstellen und Quellen eingezeichnet.

Kapitel 4

Ergebnisse

4.1 Parametrisierung des Modells

Zum Vergleich des neu aufgesetzten Modells mit dem Original von Gallegos (2011) wurden die Abflussmengen an den Quellen (Tabelle 4.1) und die Standrohrspiegelhöhen an 13 Messstellen (Abbildung 4.1) miteinander verglichen. Die Modellabweichungen sind bei allen Werten vergleichbar mit dem Originalmodell. Bei den Standrohrspiegelhöhen liegt ein Wert außerhalb einer Toleranz von fünf Fuß, die anderen zwölf liegen innerhalb der Toleranz. Die Nash-Sutcliffe-Efficiency (NSE; nach Gleichung 3.2) für die Standrohrspiegelhöhen beträgt beim Originalmodell 0.70, bei dem neu Aufgesetzten 0.68. Für die Quellabflüsse beträgt die NSE für das Original 0.961 und für das neu Aufgesetzte 0.963. Abbildung 4.2 stellt die simulierten Standrohrspiegelhöhen sowie die Lage der Grundwassermessstellen dar.

Tabelle 4.1: Vergleich des neu aufgesetzten Modells (Schima) mit dem ursprünglichen Modell von Gallegos (2011). Zu sehen sind die modellierten und gemessenen Abflüsse der Quellen Wakulla, Spring Creek und St Marks für den Messzeitpunkt November 1991 in ft^3/s (Messwerte aus Davis et al. (2010)) sowie die prozentualen Abweichungen zwischen Modell und Messwert.

	Wakulla	Spring Creek	St Marks
Modellierter Abfluss Schima	370.4	287.0	569.3
Modellierter Abfluss Gallegos	373.7	290.6	568.3
Gemessener Abfluss	350	307	602
Abweichung Schima	5.8 %	−6.5 %	−5.4 %
Abweichung Gallegos	6.8 %	−5.3 %	−5.6 %

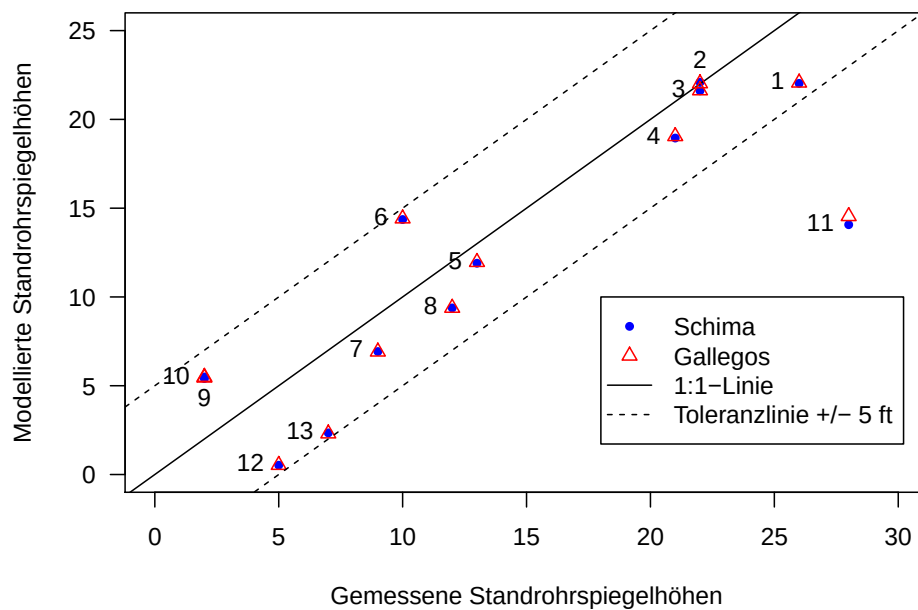


Abbildung 4.1: Vergleich zwischen gemessenen und modellierten Standrohrspiegelhöhen in *ft* mit dem neu aufgesetzten Modell („Schima“) und dem Original-Modell aus Gallegos (2011) („Gallegos“) für den Messzeitraum im November 1991. Die Zahl neben dem Symbol entspricht der Nummer der Grundwassermessstelle.

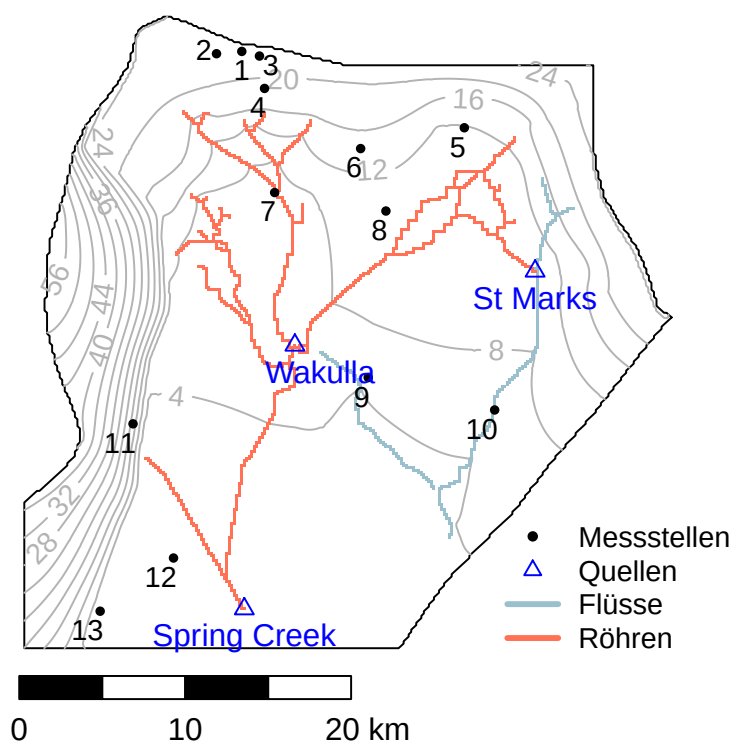


Abbildung 4.2: Lage und Nummer der Grundwassermessstellen sowie simulierte Grundwassergleichen (grau). Zusätzlich sind Quellen, Flüsse und Röhren dargestellt.

Weitere Wasserbilanzgrößen des Modells sind in Tabelle 4.2 dargestellt. Die weitaus größte Wassermenge fließt unterirdisch über die Modellränder zu, bedingt durch die CHD-Randbedingung. Etwa ein Drittel des zufließenden Wassers stammt aus der Grundwasserneubildung durch Niederschlag (RCH). Der Zufluss durch Abwasserverrieselung (WEL) hat nur eine untergeordnete Bedeutung. Neben den Abflussmengen der Quellen verlässt ein Teil des Wassers das Modellgebiet über die Flüsse (RIV).

Tabelle 4.2: Ausgewählte Wasserbilanzgrößen, die durch die Randbedingungen bestimmt werden. Die bei RCH, CHD und WEL aufgelisteten Wassermengen fließen in das Modellgebiet hinein, die bei RIV aus diesem hinaus.

Randbedingung	Wassermenge	Einheit
CHD	938	ft^3/s
RCH	532	ft^3/s
WEL	0.8	ft^3/s
RIV	(-)336	ft^3/s

4.2 Sensitivitätsanalyse

4.2.1 Räumlich einheitliche Parametervariation

Für die Sensitivitätsanalyse von 11 Parametern werden insgesamt 720 Modellläufe ausgewertet. Jeder Parameter nimmt darin 120 verschiedene Werte an, wodurch theoretisch 60 Elementary Effects bestimmt werden können. Durch unrealistische Parameterkombinationen findet MODFLOW-CFP nicht immer Lösungen, und einzelne Modellläufe müssen aus der Analyse ausgeschlossen werden. Für eine globale Sensitivitätsanalyse sollten jedoch die Parameterwerte über den ganzen möglichen Wertebereich verteilt sein. Dies wird mit Abbildung 4.3 geprüft. Darin ist für jeden Parameter ein Histogramm über den jeweiligen Wertebereich dargestellt. Graue und rot schraffierte Flächen stellen die Gesamtheit aller Modellläufe, die für den jeweiligen Parameter von Bedeutung sind, dar. Doppelte Werte eines Parameters werden nicht mitgezählt, da sie für die Berechnung des jeweiligen Sensitivitätsindex unerheblich sind. Die grauen Flächen sind gültige, während die rot schraffierten ungültige Läufe sind.

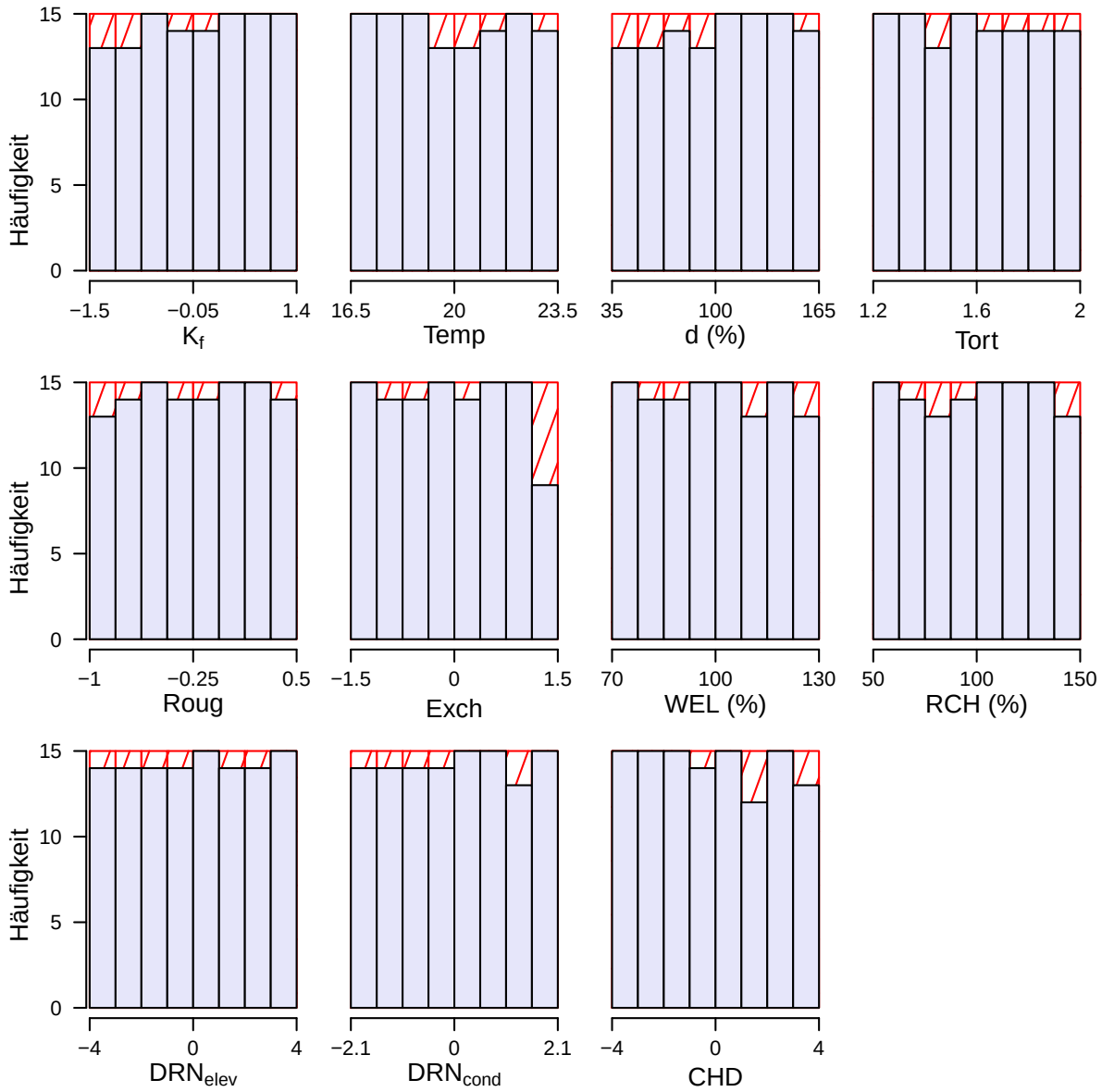


Abbildung 4.3: Verteilung der Werte jedes Parameters über seinen Wertebereich. Doppelte Werte von Parametern, die nur für die Berechnung der *Elementary Effects* anderer Parameter benötigt werden, sind nicht mitgezählt, somit ist die Stichprobengröße für jeden Parameter 120. Rot schraffiert sind die nicht konvergierten Modellläufe, die aus der weiteren Analyse ausgeschlossen werden.

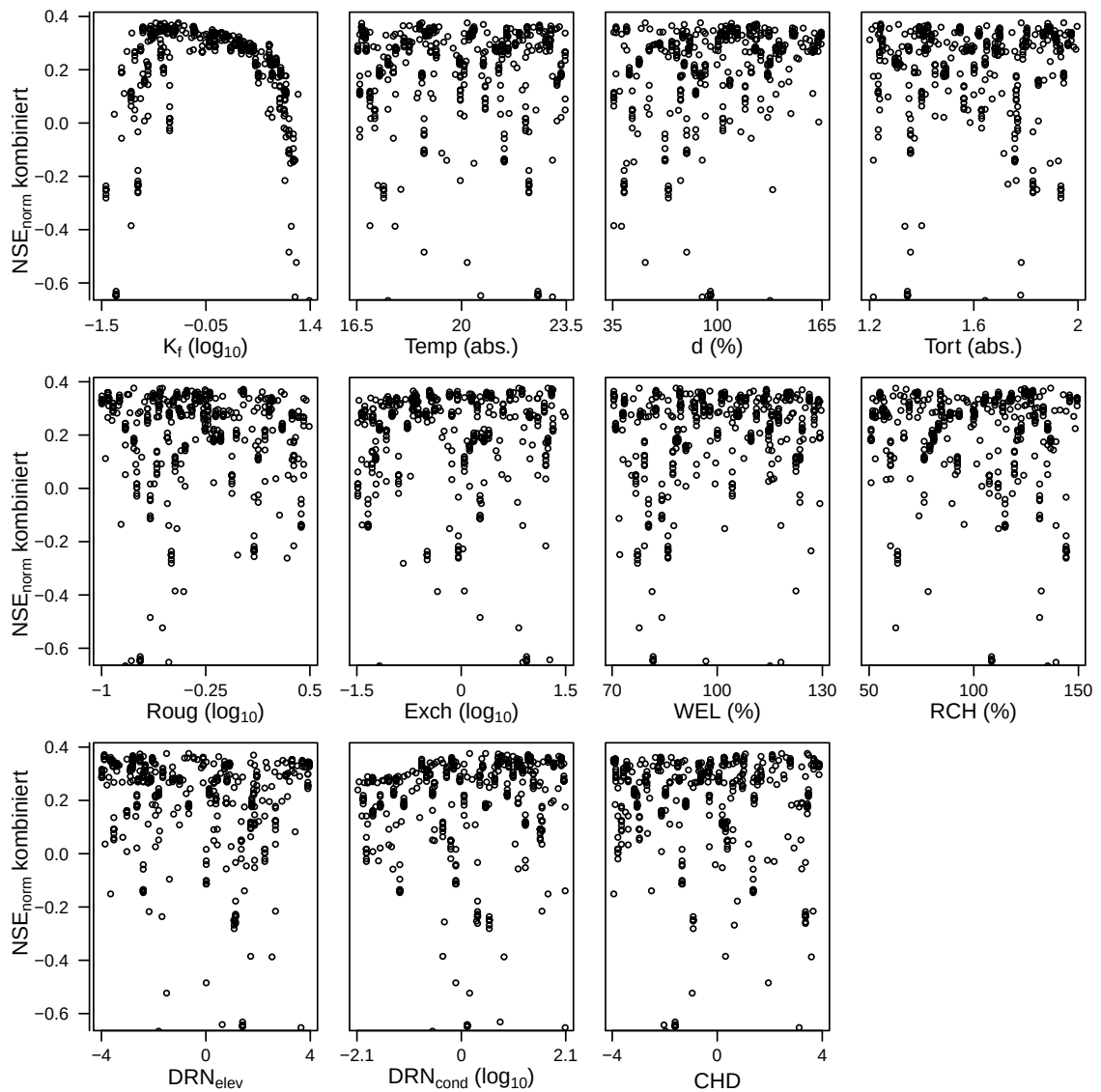


Abbildung 4.4: Streudiagramme der Modellgüte in Abhängigkeit von den Parametern. Für die Bedeutung der Parameter und der Wertebereiche siehe Tabelle 3.4. Die y-Achse ist gekürzt und beinhaltet Werte, deren Differenz zum besten Wert höchstens eins beträgt.

Einen ersten Überblick über den Einfluss der Parameter auf die Modellgüte können Streudiagramme (engl. *scatter plots*) geben. Abbildung 4.4 zeigt die Modellgüte für die besten Modellläufe, bei denen die Modellgüte NSE_{norm} maximal eine Einheit schlechter als bei den besten Läufen sind. Bei der hydraulischen Leitfähigkeit ist ein Plateau in der Mitte des Wertebereichs mit guten Modellgüten zu erkennen. Zu den Rändern hin fällt die Güte stark ab. Bei allen anderen Parametern sind keine klaren Bereiche mit unterschiedlichen Modellgüten auszumachen. Die Modellgüte schwankt über den kompletten Wertebereich mehr oder weniger gleich stark. Der Absolutwert der NSE_{norm} ist durch die zahlreichen Transformationen nur schwer interpretierbar. Eine Hilfestellung können

die Original-Parameter geben. Ein Modelllauf mit diesen würde nach der Transformation einen normierte NSE von 0.34 erreichen. Die beste hier dargestellte Modellgüte beträgt 0.38.

Die Hauptergebnisse der Sensitivitätsanalyse, die Sensitivitätsindizes S_i , zeigen die Abbildungen 4.5 und 4.6, deren Ergebnisse mit Bootstrapping ermittelt wurden (die folgenden Zahlen im Fließtext wurden ohne Bootstrapping aus den ursprünglichen Modellläufen ermittelt). Die hydraulische Leitfähigkeit K_f ist der Parameter mit dem größten Sensitivitätsindex, 1.84, bezogen auf die Standrohrspiegelhöhen und Quellabflüsse. Es folgen mit relativ ähnlichen Werten und überlappenden Unsicherheitsbereichen die Grundwasserneubildung RCH (0.40), die Standrohrspiegelhöhe am Modellrand CHD (0.26), die Durchlässigkeit und Höhenlage der Flüsse DRN_{cond} und DRN_{elev} (0.21 und 0.19), die Durchlässigkeit zwischen Matrix und Röhren $Exch$ (0.09) sowie der Röhrendurchmesser d (0.09). Eine geringere Bedeutung besitzen die Röhrenrauigkeit ($1.10 \cdot 10^{-2}$) und die Tortuosität ($1.09 \cdot 10^{-2}$). Mehrere Größenordnungen geringer sind die Sensitivitätsindizes der Abwasserverrieselung (WEL , $2.75 \cdot 10^{-4}$) und der Wassertemperatur ($1.24 \cdot 10^{-5}$).

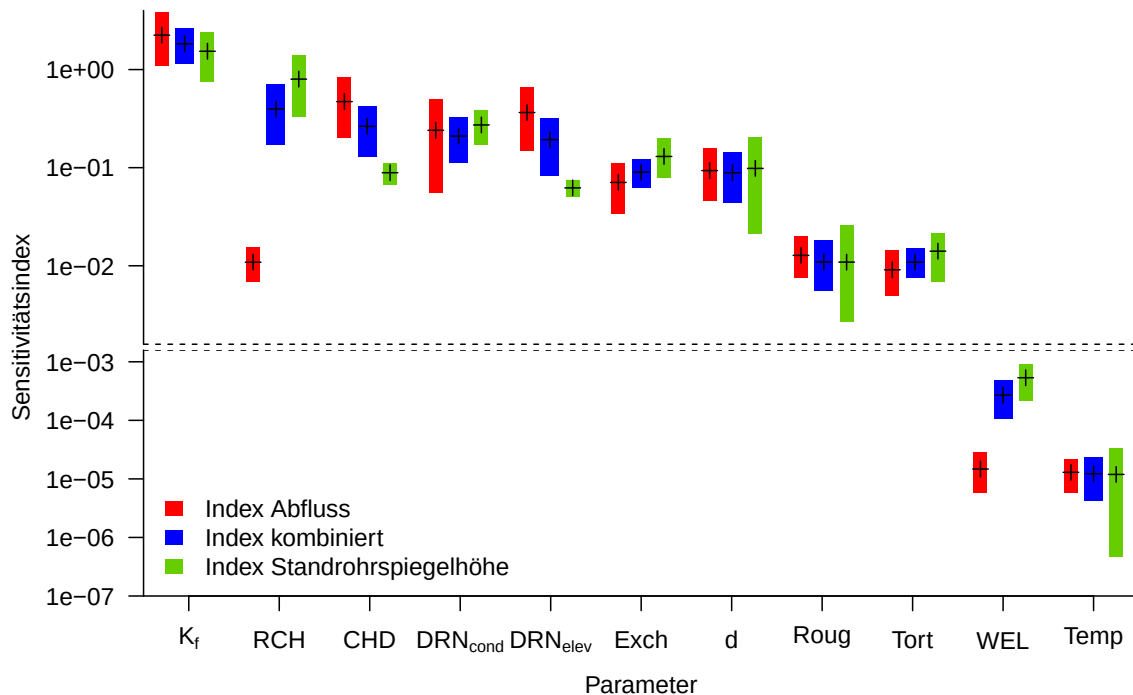


Abbildung 4.5: Darstellung der Sensitivitätsindizes S_i aller Parameter, jeweils bezogen auf die Quellabflüsse, Standrohrspiegelhöhen und auf beide Größen kombiniert. Die Kreuze sind Mittelwerte, die Balken 95%-Konfidenzintervalle aus einer Bootstrapping-Analyse. Die Reihenfolge ist absteigend nach dem kombinierten Sensitivitätsindex. Die unterschiedliche y-Achsenkalierung im oberen und unteren Bereich ist zu beachten und soll die Übersichtlichkeit verbessern.

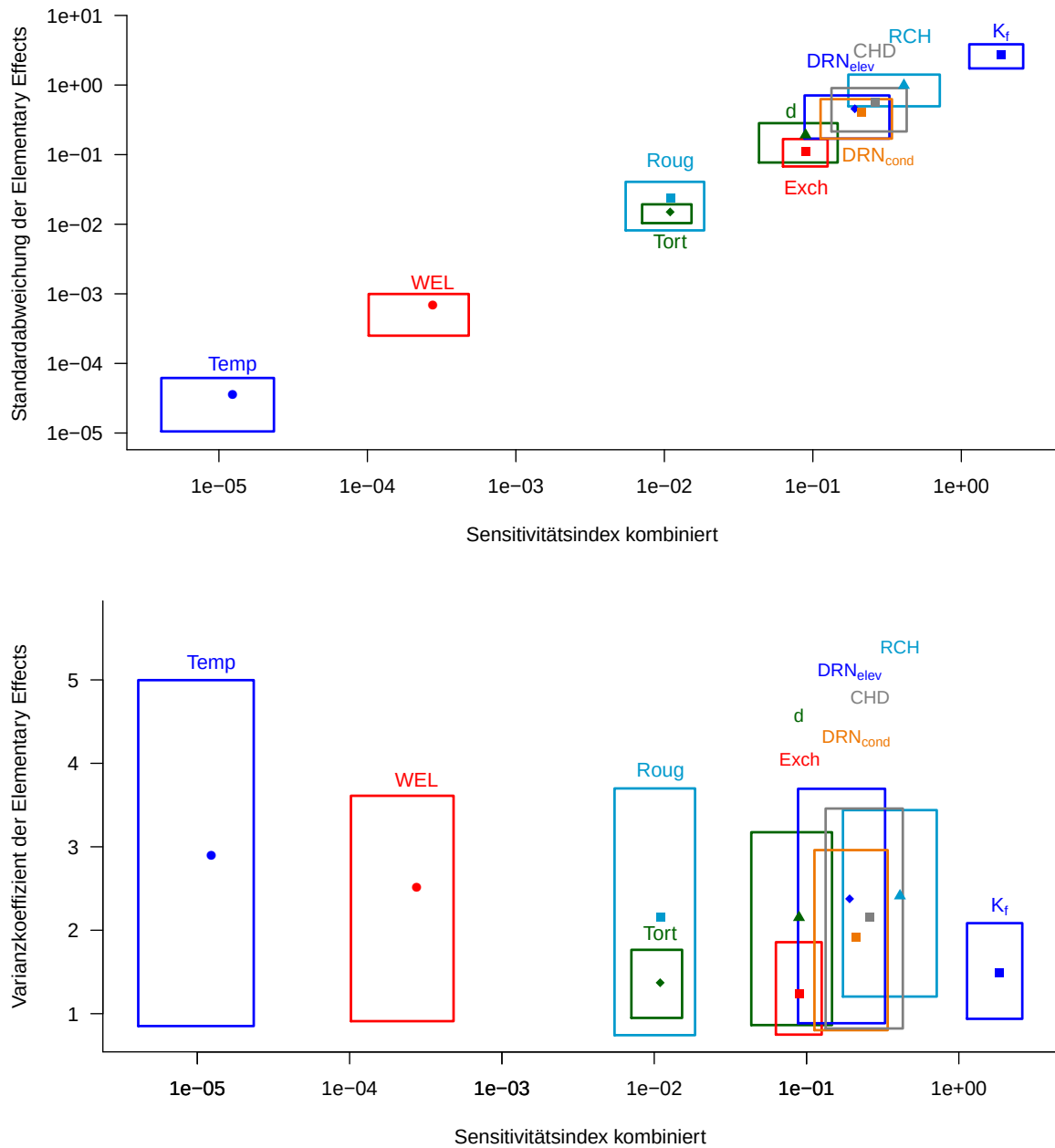


Abbildung 4.6: Oben: Verhältnis zwischen dem Mittelwert der *Elementary Effects* (entspricht dem Sensitivitätsindex bezogen auf Abfluss und Standrohrspiegelhöhen) und deren Standardabweichung.

Unten: Verhältnis zwischen dem Mittelwert der *Elementary Effects* und deren Varianzkoeffizient. Die Rahmen stellen jeweils das 95%-Konfidenzintervall aus einer Bootstrapping-Analyse dar.

Bei einigen Parametern ist ein unterschiedlich hoher Einfluss auf die Quellabflüsse und auf die Standrohrspiegelhöhen zu erkennen (Abbildung 4.5). Am Auffälligsten ist die Grundwasserneubildung *RCH*, auf die die Standrohrspiegelhöhen um mehrere Größenordnungen sensibler reagieren als die Quellabflüsse ($S_i = 0.80$ gegenüber $S_i = 0.01$). Hierbei

sind auch die Unsicherheitsbereiche deutlich voneinander entfernt. Ähnlich verhält sich *WEL* mit 37-fach höherer Sensitivität der Standrohrspiegelhöhen im Vergleich zu den Quellabflüssen. Umgekehrt reagieren die Quellen deutlich sensibler als die Standrohrspiegelhöhen auf die Parameter *CHD* (Faktor 5) und *DRN_{elev}* (Faktor 6). Die Standrohrspiegelhöhen verhalten sich, wie auch die kombinierte Modellgüte, am sensitivsten auf *K_f* und *RCH*, daher werden diese beiden Parameter in der räumlich verteilten Sensitivitätsanalyse näher untersucht.

Die Schwankung der *Elementary Effects* in verschiedenen Modellläufen wird durch die Standardabweichung und den Varianzkoeffizienten ausgedrückt. Hierfür wird in Abbildung 4.6 nur noch die Kombination von Standrohrspiegelhöhen und Quellabflüssen betrachtet. Mit der Betrachtung des Varianzkoeffizienten soll eine eventuell vorhandene Korrelation zwischen Standardabweichung und Sensitivitätsindex normiert werden. Bei der Betrachtung des Varianzkoeffizienten (Abbildung 4.6, unten) ist keine Abhängigkeit vom Sensitivitätsindex zu erkennen. Der Varianzkoeffizient schwankt in seinem Mittelwert zwischen ca. 1.5 und 3 und steigt im Unsicherheitsbereich auf bis zu 5 an. Drei Parameter fallen durch einen geringen Varianzkoeffizienten und gleichzeitig geringen Unsicherheitsbereich auf: *Tort*, *Exch* und *K_f*. Die Varianzkoeffizienten der anderen Parameter liegen darüber und besitzen teils auch deutlich höhere Unsicherheitsbereiche. Die höchsten Werte besitzen die Parameter *Temp* und *WEL*, welche auch einen großen Unsicherheitsbereich aufweisen. Gleichzeitig sind dies die Parameter mit der geringsten Sensitivität.

Für die **Konvergenzanalyse der Sensitivitätsindizes** sind deren Unsicherheitsbereiche von Bedeutung. Abbildung 4.7 zeigt diese abhängig von der Anzahl der Startpunkte bzw. berechneten *Elementary Effects* für die fünf sensitivsten Parameter. Die Unsicherheitsbereiche sollten bei einer Konvergenz weniger als 5% des größten Sensitivitätsindex ausmachen, welcher derjenige von *K_f* ist. Keiner der fünf sensitivsten Parameter erfüllt dieses Kriterium. Die „relativen“ Unsicherheitsbereiche betragen bei den fünf dargestellten Parametern zwischen 76.2% (*K_f*) und 11.9% (*DRN_{cond}*). Somit ist die Konvergenz der Sensitivitätsindizes nach 57 Startpunkten bzw. *Elementary Effects* noch nicht erreicht. Unter 5% beträgt der Unsicherheitsbereich der weniger sensitiven Parameter *Temp*, *Tort*, *Roug*, *Exch* und *WEL*. Die **Konvergenz der Parameter-Rangfolge** zeigt der Wert *Stat_{ranking}* an. Dieser liegt bereits ab 17 Startpunkten bzw. *Elementary Effects* deutlich unter dem Schwellenwert für Konvergenz (Abbildung 4.8). Für die Endergebnisse, die aus 57 *Elementary Effects* berechnet werden, weist *Stat_{ranking}* einen Wert von 0.21 auf.

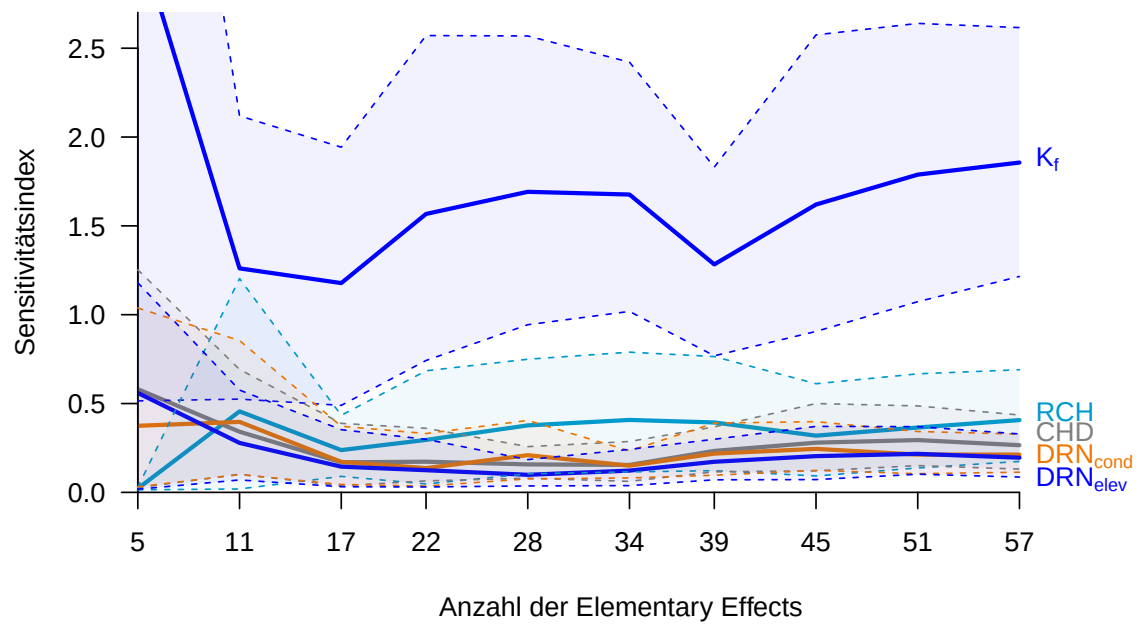


Abbildung 4.7: Konvergenz der Sensitivitätsindizes bei zunehmender Anzahl von Modellläufen für die fünf Parameter mit dem größten Sensitivitätsindex. Blassere Bereiche sind das 95%-Konfidenzintervall aus dem Bootstrapping.

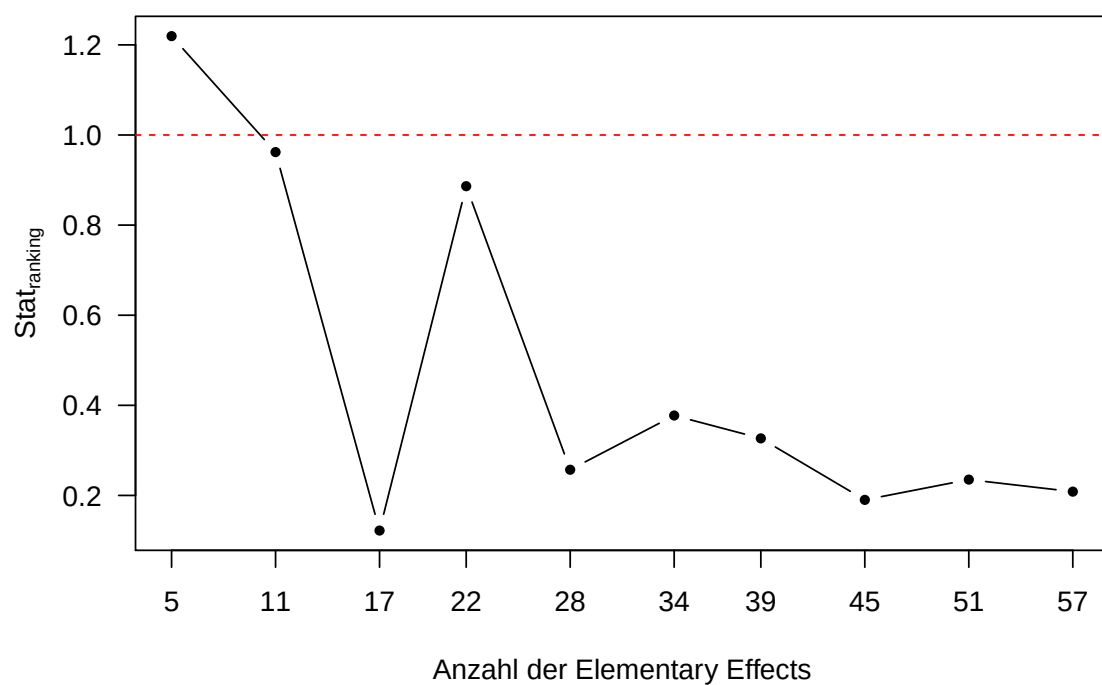


Abbildung 4.8: Konvergenz der Rangfolge, $\text{Stat}_{\text{ranking}}$, bei zunehmender Anzahl von Modellläufen. Rot gestrichelt ist der Wert 1, unterhalb dessen von einer Konvergenz ausgegangen wird.

Eine **weitere Analyse** soll den relativen Einfluss einzelner Beobachtungspunkte auf das Ergebnis zeigen. Den Sensitivitätsindex ohne Betrachtung einzelner Quellen zeigt Abbildung 4.9. Bei den meisten Parametern hat die St. Marks-Quelle einen erheblichen Einfluss auf den Sensitivitätsindex. Ohne deren Einbeziehung würde der Sensitivitätsindex für einige Parameter deutlich vom aktuellen Wert abweichen, für *WEL* wäre er um mehr als das 20-fache, für *d* und *Exch* um mehr als das 10-fache erhöht.

Die gleiche Analyse für die beobachteten Standrohrspiegelhöhen zeigt Abbildung 4.10. Die einzelnen Messpunkte haben weniger Einfluss als einzelne Quellen, jedoch verursachen die Punkte 11 und 10 teilweise eine deutliche Veränderung der Sensitivitätsindizes.

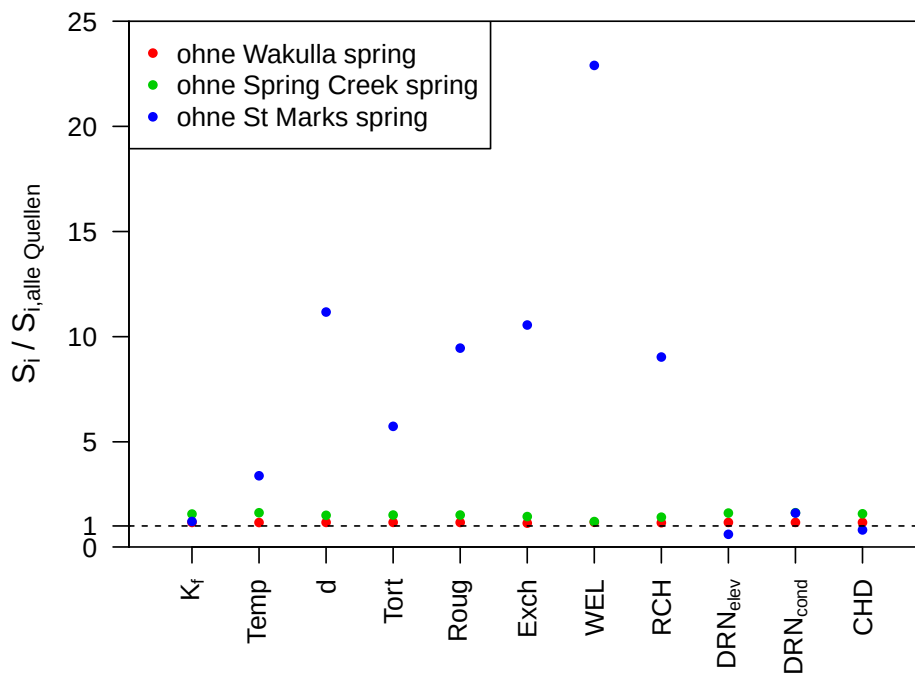


Abbildung 4.9: Einfluss einzelner Quellen auf den Sensitivitätsindex. Die y-Achse zeigt den Sensitivitätsindex S_i , bei dem jeweils ein Quellabfluss weggelassen wurde, dividiert durch den Sensitivitätsindex unter Berücksichtigung aller Quellen $S_{i,alle\ Quellen}$. Quellen ohne Einfluss würden einen Wert von 1 ergeben. Beobachtete und berechnete Standrohrspiegelhöhen wurden nicht einbezogen.

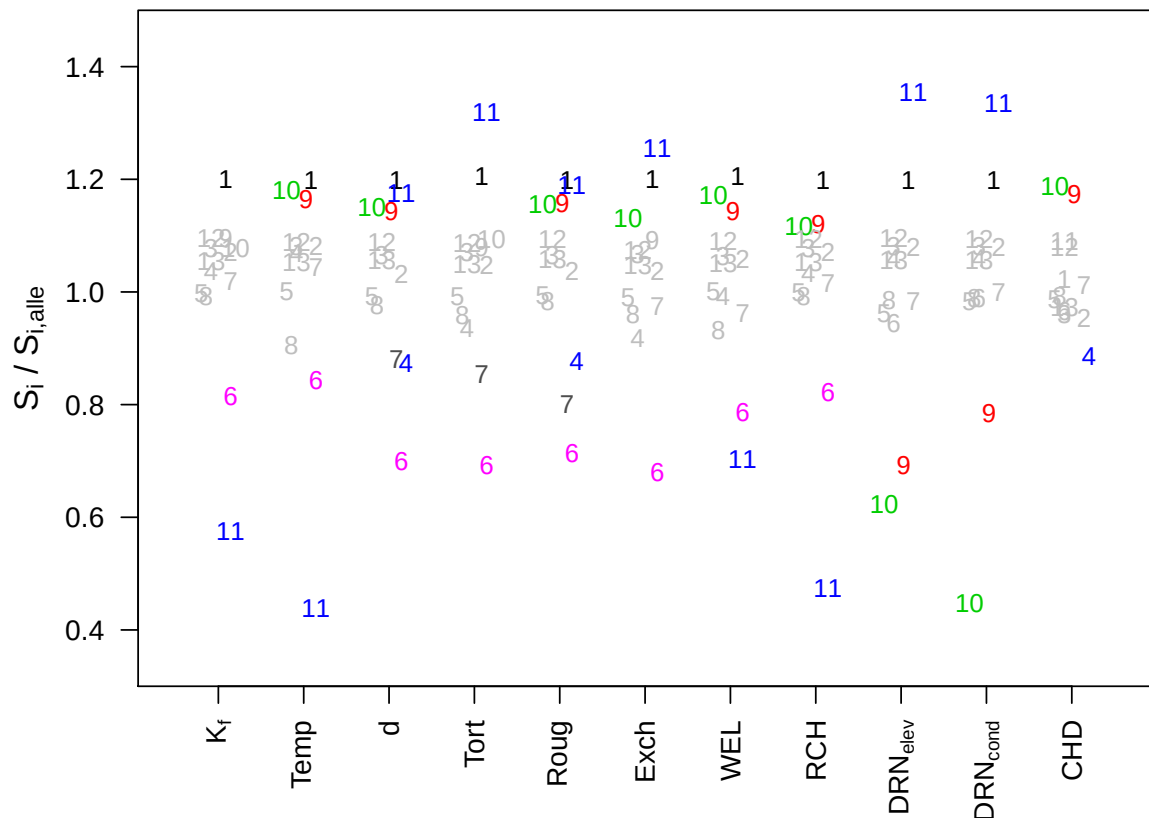


Abbildung 4.10: Einfluss einzelner Messpunkte von Standrohrspiegelhöhen auf den Sensitivitätsindex. Die y-Achse zeigt den Sensitivitätsindex S_i , bei dem jeweils ein Messpunkt weggelassen wurde, dividiert durch den Sensitivitätsindex unter Berücksichtigung aller Messpunkte $S_{i,alle}$. Die Zahlen zeigen die Nummer des jeweiligen Messpunktes an. Messpunkte ohne Einfluss würden einen Wert von 1 ergeben. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind Werte zwischen 0.9 und 1.1 in grau dargestellt und die Zahlen um kleine Beträge nach links oder rechts verschoben. Beobachtete und berechnete Quellabflüsse wurden nicht einbezogen.

4.2.2 Räumlich verteilte Parametervariation

Die Ergebnisse für die Sensitivitätsanalyse der räumlich verteilten Parameter K_f und RCH sollen im folgenden Kapitel dargestellt werden. Auch hier gibt es einige Parameterkombinationen, die von MODFLOW nicht gelöst werden konnten. Die Verteilung der gültigen Läufe auf die Wertebereiche der räumlich aufgeteilten Parameter zeigt Abbildung 4.11 und, für die nicht räumlich aufgeteilten Parameter, Abbildung A1 im Anhang. Wie im vorigen Kapitel soll ein erstes Bild durch die Betrachtung der Modellgüte in Abhängigkeit der Parameterwerte gewonnen werden. Für keinen Parameter lassen sich jedoch Tendenzen zu besseren Modellergebnissen in bestimmten Wertebereichen erkennen. Für die räumlich variierten Parameter befindet sich das Streudiagramm in Anhang A2.

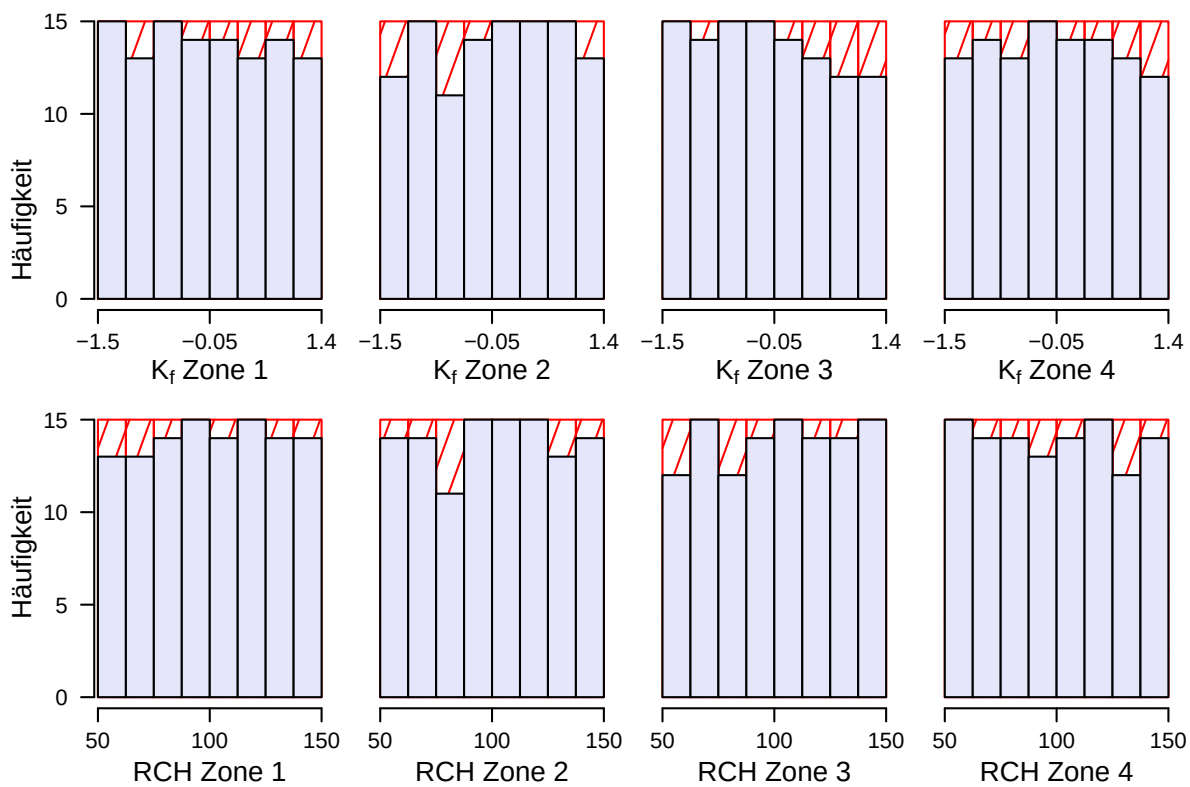


Abbildung 4.11: Häufigkeitsverteilung der räumlich verteilten Parameter über ihren Wertebereich. Rot schraffiert sind die nicht konvergierten Modellläufe, die aus der Analyse ausgeschlossen wurden.

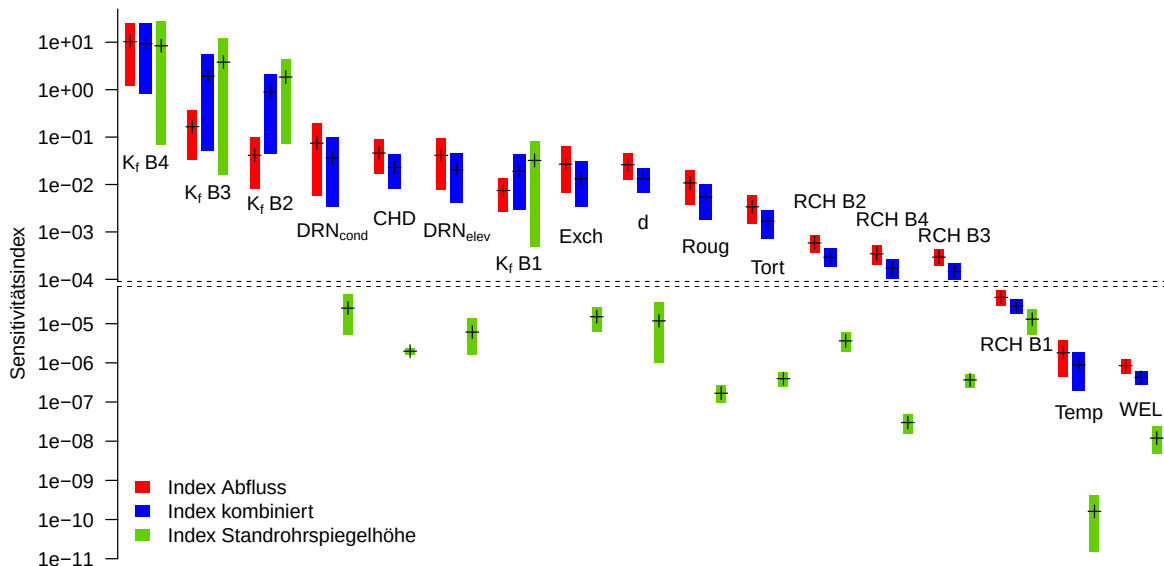


Abbildung 4.12: Darstellung der Sensitivitätsindizes der Parameter für unterschiedliche Zielgrößen (Quellabflüsse, Standrohrspiegelhöhen und beide kombiniert). Die Parameter K_f und RCH sind räumlich in die Bereiche „B1“ bis „B4“ eingeteilt. Die Unsicherheitsbereiche sind das 95%-Konfidenzintervall aus dem Bootstrapping. Die unterschiedliche Achsenskalierung ist zu beachten.

Die Sensitivitätsindizes für die zwei räumlich variierten Parameter und die restlichen, räumlich einheitlichen, sind in Abbildung 4.12 dargestellt. Die Reihenfolge der räumlich einheitlichen Parameter beim kombinierten Index stimmt bis auf eine Ausnahme mit der Analyse aus Kapitel 4.2.1 überein. Die jeweils in vier Bereiche aufgeteilten Parameter K_f und RCH , die in der ersten Untersuchung die höchsten Werte besaßen, sortieren sich auf anderen Positionen ein. K_f besitzt in den Bereichen 4, 3 und 2 die höchsten Sensitivitätsindizes, im Bereich 1 liegt der Index zwischen DRN_{elev} und $Exch$ auf Rang sieben. Die Indizes von RCH sind im Vergleich zu Kapitel 4.2.1 deutlich niedriger. Lediglich $Temp$ und WEL besitzen noch kleinere Sensitivitätsindizes. Die Unterschiede zwischen den betrachteten Zielgrößen sind teilweise beträchtlich. Bei vielen Parametern liegen die Sensitivitätsindizes für die Standrohrspiegelhöhen mehrere Größenordnungen unter denen für die Abflüsse. Lediglich bei K_f in den Bereichen 1, 2 und 3 ist der Index für die Standrohrspiegelhöhen größer als für die Abflüsse. Dies ist ein deutlicher Unterschied zur räumlich einheitlichen Analyse. Die Beträge des Sensitivitätsindex lassen sich durch die vorgenommene Normierung, die jeweils von den Ergebnissen der aktuellen Modellläufe abhängig ist, nicht mit denen aus Kapitel 4.2.1 vergleichen. Eine räumliche Einordnung der Sensitivitätsindizes von K_f und RCH erlaubt Abbildung 4.13.

Die Variation der Elementary Effects, bewertet anhand des Varianzkoeffizienten, ist in der räumlich verteilten Analyse insgesamt deutlich höher als in der räumlich Einheitlichen (Abbildung 4.14). K_f ist im Bereich 3 der am stärksten variiierende Parameter, wenn der Mittelwert betrachtet wird. Allerdings ist die Unsicherheit hier sehr hoch und der Wert könnte auch sehr klein sein. Weitere Parameter mit hohen Varianzkoeffizienten sind DRN_{cond} und K_f in den Bereichen 4. Der geringste Wert ist bei den Parametern RCH in allen Bereichen und WEL zu beobachten. Beim Vergleich der räumlich variierten Parameter mit der räumlich einheitlichen Analyse hat sich die Variation der K_f -Parameter vergrößert, während sie sich bei den RCH -Parametern verringert haben.

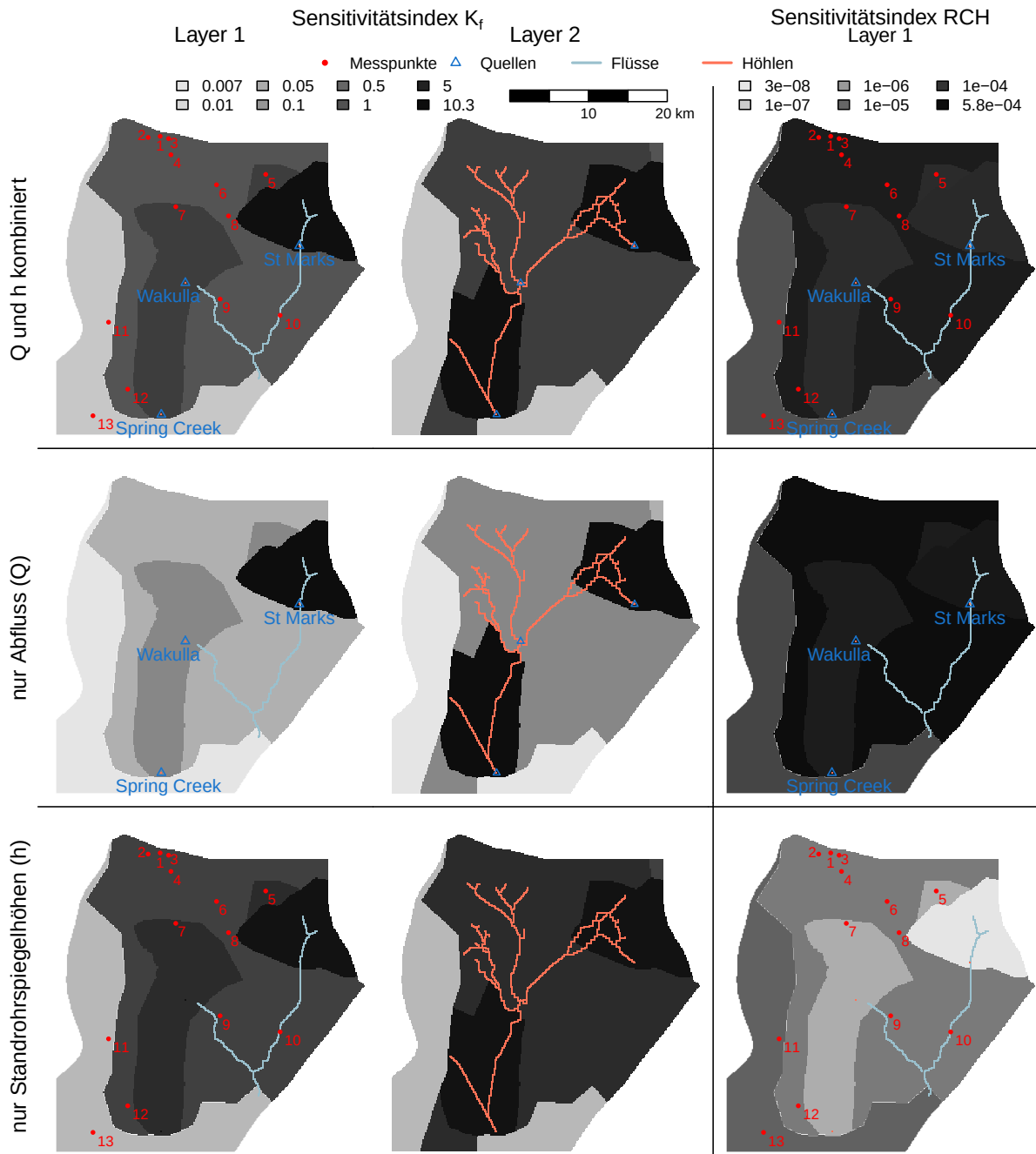


Abbildung 4.13: Räumliche Darstellung der Sensitivitätsindizes von K_f und RCH , jeweils bezogen auf verschiedene Zielgrößen.

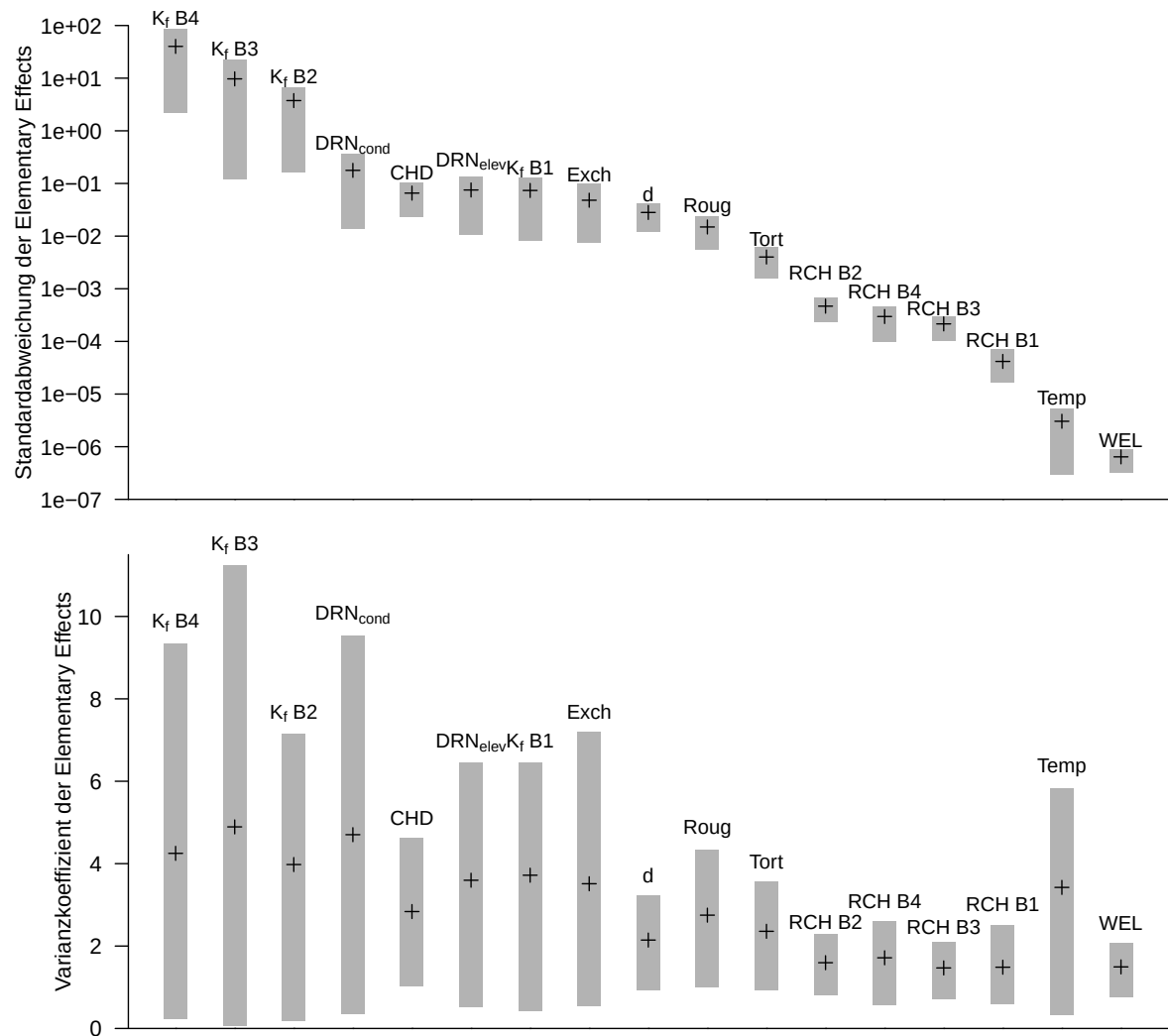


Abbildung 4.14: Darstellung der Standardabweichung (oben) und des Varianzkoeffizienten (unten) der Elementary Effects bezogen auf Quellen und Standrohrspiegelhöhen kombiniert. Dargestellt sind Mittelwert (+) und 95%-Konfidenzintervall aus dem Bootstrapping. Die Reihenfolge der Parameter ist absteigend nach dem kombinierten Sensitivitätsindex.

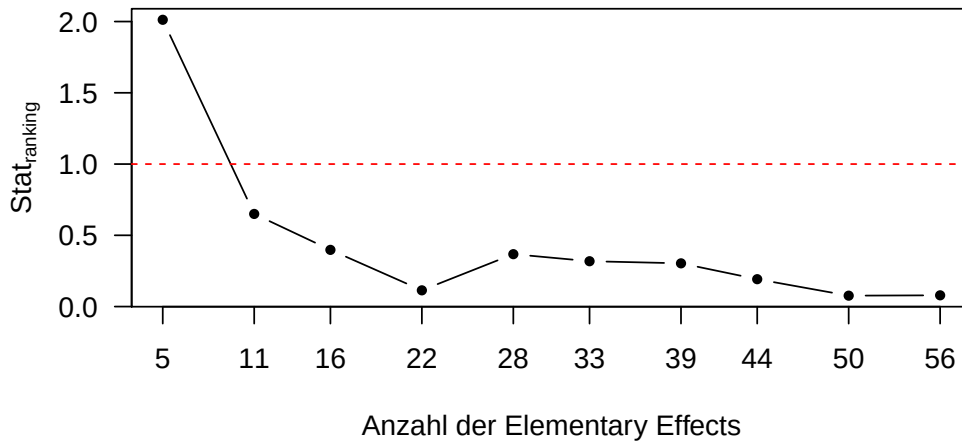


Abbildung 4.15: Konvergenz der Rangfolge $\text{Stat}_{\text{ranking}}$ für die räumlich verteilte Analyse, in Abhängigkeit von der Anzahl der Elementary Effects. Rot gestrichelt ist der Wert 1, unter dem von einer Konvergenz ausgegangen wird.

Die **Konvergenzanalyse der Sensitivitätsindizes** ergibt keine Konvergenz bei der Anzahl durchgeführter Modellläufe. Die Unsicherheit von drei Parametern liegt teilweise deutlich über dem Schwellenwert für Konvergenz. Die Unsicherheitsbereiche von K_f beträgt in den Bereichen 4, 3 und 2 jeweils 275%, 65.8% und 23% des größten Sensitivitätsindex. Alle anderen Parameter liegen unter dem Schwellenwert von 5%. Die **Konvergenz der Parameter-Rangfolge** wird erreicht (Abbildung 4.15).

Die **weitere Analyse** der Ergebnisse zeigt, wie auch schon in der räumlich einheitlichen Untersuchung, einen großen Einfluss von Messstelle 11 (Abbildung 4.16). Besonders auffällig sind die Parameter K_f in allen vier Bereichen, deren Werte von $S_i/S_{i,\text{alle}}$ jeweils kleiner als 10^{-4} sind. Die Lage der Messstellen ist Abbildung 4.2 zu entnehmen. Die Analyse der einflussreichsten Quellen ergibt, dass die St. Marks-Quelle einen großen Einfluss auf den Sensitivitätsindex hat (Abbildung 4.17). Ohne deren Berücksichtigung wäre der Index für einige Parameter deutlich erhöht, beispielsweise bei K_f im Bereich 1 um den Faktor 47.7 und bei RCH im Bereich 1 um den Faktor 37.3. Die beiden anderen Quellen besitzen einen geringeren Einfluss, der größte Wert ist hier 1.6.

Eine weitere Betrachtung soll zeigen, ob ein Zusammenhang zwischen der Größe des Bereichs und dem Sensitivitätsindex der räumlich verteilten Parameter besteht. Wie Abbildung 4.18 zeigt, besteht weder bei K_f noch RCH eine erkennbare Korrelation.

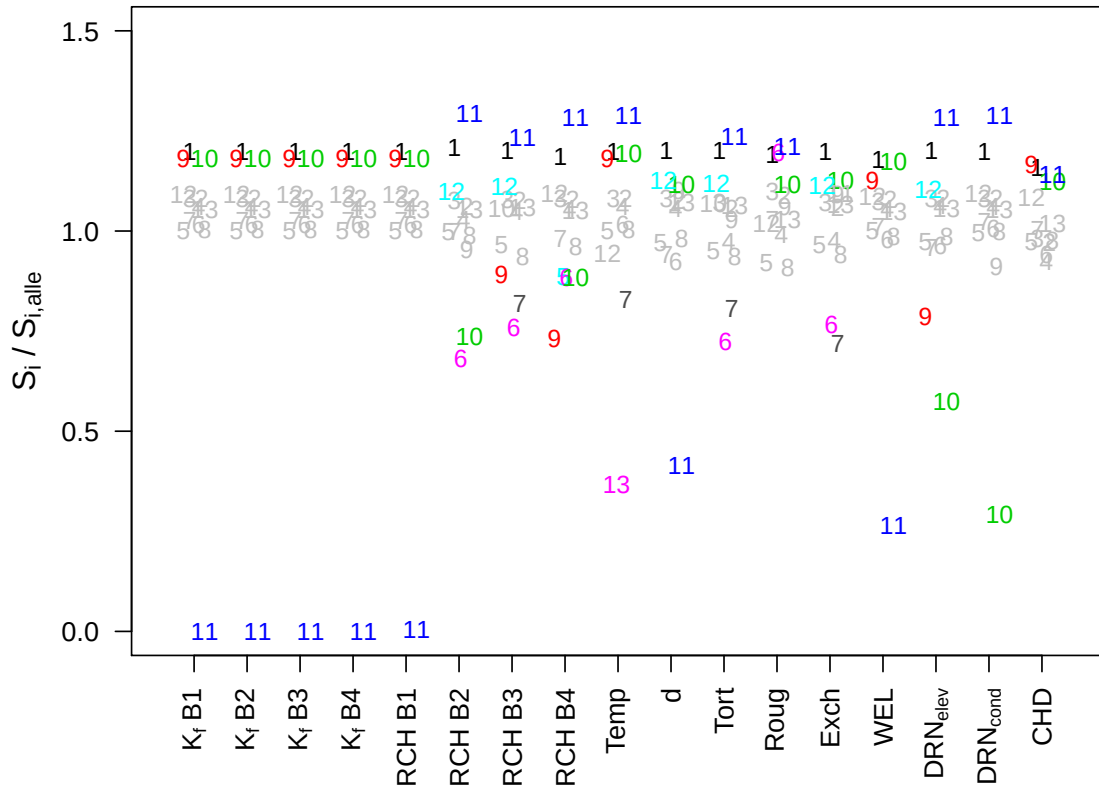


Abbildung 4.16: Einfluss einzelner Messpunkte von Standrohrspiegelhöhen auf den Sensitivitätsindex. Die y-Achse zeigt den Sensitivitätsindex S_i , bei dem jeweils ein Messpunkt weggelassen wurde, dividiert durch den Sensitivitätsindex unter Berücksichtigung aller Messpunkte $S_{i,alle}$. Die Zahlen zeigen die Nummer des jeweiligen Messpunktes an. Messpunkte ohne Einfluss würden einen Wert von 1 ergeben. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind Werte zwischen 0.9 und 1.1 in grau dargestellt und die Zahlen um kleine Beträge nach links oder rechts verschoben. Beobachtete und berechnete Quellabflüsse wurden nicht einbezogen.

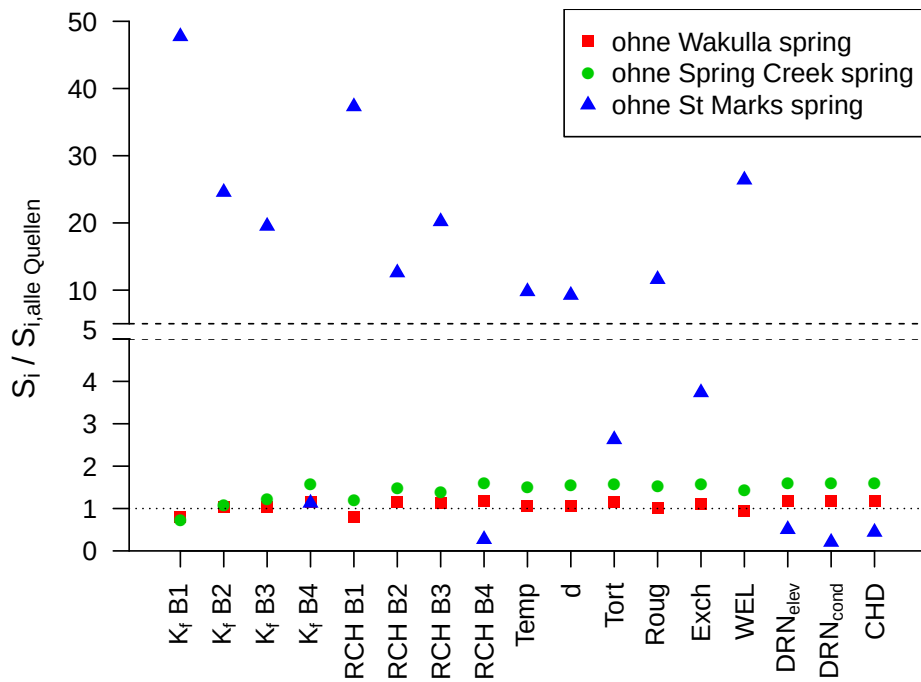


Abbildung 4.17: Einfluss einzelner Quellen auf den Sensitivitätsindex. Der Wert der y-Achse entspricht dem Quotienten aus dem Sensitivitätsindex S_i , bei dem jeweils eine Quelle unberücksichtigt bleibt, und jenem unter Berücksichtigung aller Quellen. Quellen ohne Einfluss würden einen Wert von 1 ergeben. Die geänderte y-Achsenkalierung ab dem Wert 5 ist zu beachten.

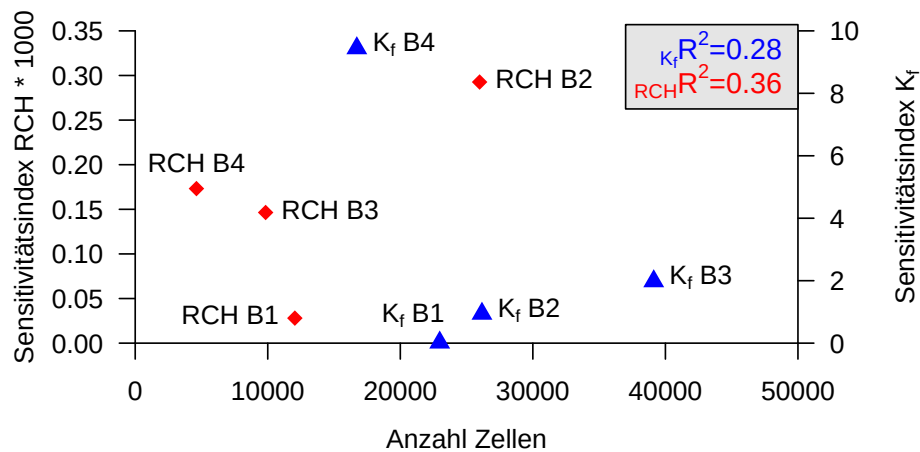


Abbildung 4.18: Zusammenhang zwischen den Sensitivitätsindizes der räumlich verteilten Parameter K_f und RCH und der Größe des Bereichs im Modell (Anzahl Zellen). Das Maß R entspricht dem Korrelationskoeffizienten nach Pearson (R^2 dessen Quadrat). Für RCH sind nur die Zellen der obersten Schicht relevant, für K_f beide Schichten des Modells.

Kapitel 5

Diskussion

5.1 Parametrisierung des Modells

Die Parametrisierung des Modells soll die Ergebnisse von Gallegos (2011) reproduzieren, um eine Basis für weitergehende Untersuchungen zu schaffen. Die Interpretation der Modellergebnisse ist daher nicht Teil dieser Arbeit. Dennoch muss kritisch hinterfragt werden, ob eine korrekte Reproduktion gelungen ist. Die berechneten Standrohrspiegelhöhen und Quellabflüsse stimmen zwar nicht genau mit denen von Gallegos überein, sind jedoch gering im Vergleich mit den Abweichungen zu den beobachteten Werten. Gleiches zeigt auch die Nash-Sutcliffe-Efficiency. Die geringe Anzahl und die ungleichmäßige Verteilung von Grundwassermessstellen birgt jedoch eine gewisse Unsicherheit, da in den Bereichen ohne Messstellen die Modellgüte nicht überprüft werden kann.

Die Ursache der Unterschiede liegt vermutlich in den geänderten Parametern des Lösungsalgorithmus. Da die Konvergenzkriterien gelockert wurden, stoppt das Modell die Berechnung bereits früher. Es ist daher anzunehmen, dass die Ergebnisse von Gallegos genauer sind, wenngleich dies vernachlässigbar ist. Als Konsequenz ergibt sich, dass die angewendete Modellversion, die eingestellten Parameter und die Prozedur zum Auslesen der Ergebnisse akzeptabel funktioniert und für eine weitergehende Sensitivitätsanalyse verwendet werden kann.

5.2 Sensitivitätsanalyse mit räumlich einheitlicher Parametervariation

5.2.1 Unsicherheit

Preprocessing

Für die Sensitivitätsanalyse mit räumlich einheitlicher Parametervariation gibt es einige Unsicherheitsfaktoren, die im Folgenden diskutiert werden sollen. Schon das *preprocessing* stellt mit der Wahl der Wertebereiche für die Parameter eine Quelle für Unsicherheiten dar. Die Entscheidung, welche Werte plausibel sind, ist zumeist subjektiv, und gerade bei räumlich verteilten Parametern, die ausgehend von bestimmten Anfangswerten variiert werden (zum Beispiel durch Multiplikation mit einem Faktor), ist es schwer, einen Wertebereich zu finden, der für alle Werte im Modellgebiet passt. Eine zu kleine Wahl des Wertebereichs blendet Bereiche im Parameterraum aus, die wichtig für das Ergebnis sein könnten. Ein zu großer Wertebereich bezieht Bereiche mit ein, die in der Realität nicht vorkommen und kann das Ergebnis verfälschen. Hinzu kommt, dass die Größe des Wertebereichs direkt in die Berechnung der *Elementary Effects* eingeht (vgl. Formel 3.4). Selbst wenn die Sensitivität im ganzen Parameterraum homogen wäre, würde also die Wahl des Wertebereichs die Sensitivitätsindizes beeinflussen.

Eine weitere subjektive Entscheidung ist die Art der Parametervariation (in Tabelle 3.4 Spalte „Bedeutung des Wertebereichs“). Unterschiedliche Vorgehensweisen sind aufgrund der verschiedenen physikalischen Eigenschaften der Parameter nötig, jedoch gibt es hierbei mehrere Möglichkeiten, deren Wahl der individuellen Entscheidung des Modellierers obliegt. Als Beispiel für mögliche Unsicherheiten seien die Parameter DRN_{elev} und CHD genannt, die durch Addition der Subtraktion variiert werden und nach unten hin auf 0 ft begrenzt sind. Zellen mit kleinen Parameterwerten können somit unter Umständen nicht innerhalb des kompletten Wertebereichs variiert werden, weil sie an die 0-ft-Grenze stoßen. Dies ist vor allem bei der Subtraktion von großen Beträgen der Fall. Die Veränderung dieser Eingangsparameter geschieht also nicht im gesamten Wertebereich gleichmäßig, was wiederum einen Einfluss auf den Sensitivitätsindex haben kann. Die Wahl der Zielgröße, mit der die *Elementary Effects* berechnet werden, ist ebenfalls eine subjektive Entscheidung. Bei der Wahl des Gütemaßes, dessen Normierung und der Kombination von Standrohrspiegelhöhen und Quellabflüssen sind auch andere Möglichkeiten denkbar, beispielsweise die Verwendung des Root Mean Square Error. Durch die nicht konvergierenden Modellläufe weicht die Verteilung der Eingangsparamete-

ter von einer Uniformverteilung ab (siehe Abbildung 4.3). Bei einer geringen Anzahl fehlerhafter Modellläufe, die in unterschiedlichen Regionen des Wertebereichs liegen, wie beispielsweise bei DRN_{elev} der Fall, dürfte dies keinen Einfluss auf die Sensitivitätsanalyse haben. Bei anderen Parametern wie $Exch$ sind jedoch mehr fehlerhafte Läufe vorhanden, von denen einige im rechten Achtel des Wertebereichs liegen. In diesem Achtel sind nur 9 von 15 Modellläufen gültig. Ob dies einen Einfluss auf die Sensitivitätsindizes hat, ist auch davon abhängig, welche Wertepaare für die Berechnung der Elementary Effects herangezogen werden und wie stark die lokale Sensitivität im Randbereich von $Exch$ vom restlichen Wertebereich abweicht. In jedem Fall erhöhen nicht konvergierende Modellläufe die Unsicherheit, im Allgemeinen dürfte dieser Effekt aber bei der gegebenen Anzahl an Modellläufen vernachlässigbar sein. Eine Verkleinerung des Wertebereichs bringt nicht unbedingt mehr gültige Läufe hervor, da auch Interaktionen mit anderen Parametern die ungültigen Läufe verursachen können.

Postprocessing

Im *postprocessing* der Ergebnisse werden Unsicherheitsbereiche ausgerechnet. Die Methode, das Bootstrapping, basiert auf der erneuten Kombination der durchgeführten Modellläufe. Informationen, die nicht von den Modellläufen oder den Beobachtungsdaten abgedeckt werden, sind auch nicht in den Unsicherheitsbereichen enthalten. Insgesamt ist die Unsicherheit jedoch ohnehin relativ hoch. Dies zeigt sich auch daran, dass die Sensitivitätsindizes der einflussreichsten Parameter nicht konvergieren. Laut [Sarrazin et al. \(2016\)](#) ist dies erst nach vielen Modellläufen der Fall. Diese Aussage wird gestützt von [Vanrolleghem et al. \(2015\)](#) und [Yang \(2011\)](#), bei denen der Morris-Sensitivitätsindex erst nach 2000 Startpunkten (entspricht den Elementary Effects pro Parameter) stabil wurde. Die beiden Studien verwendeten unterschiedliche Modelle mit 17 bzw. 5 Parametern. Deutlich früher als der Sensitivitätsindex soll laut [Sarrazin et al. \(2016\)](#) die Rangfolge konvergieren. Dies ist bereits nach wenigen Modellläufen erreicht, wie Abbildung 4.8 zeigt. Gerade für die Parameter mit niedrigen Sensitivitätsindizes ist dies jedoch offensichtlich nicht zutreffend. Die Konfidenzintervalle vieler Parameter überlappen sich teilweise deutlich und, wie Abbildung 4.7 zeigt, verändert sich die Reihenfolge der Parameter RCH , CHD , DRN_{cond} und DRN_{elev} auch bei hoher Anzahl berücksichtigter Modellläufe noch mehrmals. Innerhalb der letzten sechs ausgewerteten Elementary Effects wird erst die endgültige Reihenfolge von DRN_{cond} und DRN_{elev} erreicht, was sich bei weiteren Modellläufen erneut verändern könnte. Offensichtlich mindert die starke Gewichtung der sensitivsten Parameter bei dem von [Sarrazin et al. \(2016\)](#) eingeführten Index $Stat_{ranking}$ die Aussagekraft für die weniger sensitiven Parameter. In diesem Fall

betrifft dies bereits den viertgrößten von elf Parametern.

Wie die Ergebnisse (Abbildungen 4.9 und 4.10) zeigen, haben einzelne Quellen und Grundwassermessstellen teilweise einen deutlichen Einfluss auf die Ergebnisse. Dies ist problematisch, wenn Aussagen über das gesamte Modellgebiet getroffen werden sollen. Obwohl die einflussreichen Messpunkte nur einen kleinen Bereich repräsentieren, verändern sie das Ergebnis im Verhältnis zu den anderen Punkten überproportional stark. Eine weitere Unsicherheitsquelle ist die geringe Anzahl an Messpunkten und ihre ungleichmäßige Verteilung. Einerseits werden möglicherweise wichtige Effekte an Orten ohne Messstellen nicht erkannt, andererseits sind Regionen mit hoher Messstellendichte überrepräsentiert und haben einen höheren Einfluss auf das Ergebnis.

5.2.2 Interpretation der Ergebnisse

Im folgenden Absatz sollen die Ergebnisse erläutert und interpretiert werden. Ein erster Blick auf die Streudiagramme (Abbildung 4.4) zeigt, dass die meisten Parameter keinen klar definierten Bereich besitzen, in dem die besten Modellläufe liegen. Lediglich K_f zeigt ein Maximum und besitzt im Randbereich einen deutlichen Abfall der Modellgüte. Dies weist auf einen starken Einfluss von K_f hin. Durch das radiale Stichprobendesign sind mehrere Modellläufe mit dem gleichen Parameterwert vorhanden. Diese sind in den Diagrammen deutlich durch direkt untereinander befindliche Punkte zu sehen. Je weiter diese Punkte vertikal gestreckt sind, desto größer sind die Interaktionen mit anderen Parametern. Bei K_f ist im zentralen Bereich nur eine kleine vertikale Streuung der Punkte zu beobachten, dort besteht also nur eine geringe Interaktion. Die restlichen Parameter interagieren stärker, was zeigt, dass die Modellgüte (außer im Fall von K_f) nicht nur von einem Parameter dominiert wird, sondern die Kombination entscheidend ist.

Wie in den Ergebnissen erwähnt, erreichen einige Modellläufe bessere Modellgüten als mit den von Gallegos (2011) kalibrierten Parametern. Zu berücksichtigen ist dabei, dass Gallegos zusätzlich zu den Standrohrspiegelhöhen und Quellabflüssen Tracerverweilzeiten und einen zweiten Zeitpunkt benutzte und nicht alle Parameter kalibrierte. Dies macht die Bedeutung der betrachteten Zielgröße für die Interpretation des Ergebnisses deutlich.

Die Betrachtung der Sensitivitätsindizes soll getrennt nach den beiden Bezugsgrößen Quellabflüsse und Standrohrspiegelhöhen erfolgen, da teilweise erhebliche Unterschiede zwischen beiden bestehen (siehe Abbildung 4.5).

Quellabflüsse

Die hydraulische Leitfähigkeit K_f ist der mit Abstand einflussreichste Parameter für die auf die Quellabflüsse bezogene Modellgüte. Dies kann damit begründet werden, dass K_f für jede Zelle definiert ist und direkt die durchfließende Wassermenge beeinflusst. In der Studie von Gallegos et al. (2013) war die hydraulische Leitfähigkeit ebenfalls einflussreich, lag jedoch nur auf Rang zwei hinter dem Röhrendurchmesser. Allerdings wurde die Methode der *Composite Scaled Sensitivities* verwendet, die sich in einigen Punkten von der hier verwendeten unterscheidet. Beispielsweise berechnet sie nur lokale Sensitivitätsindizes.

Deutlich niedriger als bei der hydraulischen Leitfähigkeit sind die Sensitivitätsindizes der Randbedingungen CHD , DRN_{elev} und DRN_{cond} , jeweils etwa auf gleichem Niveau. Über die feste Standrohrspiegelhöhe an den Modellrändern (CHD) fließt, zumindest mit den kalibrierten Parametern, ein Großteil der Wassermenge (62%) in das Modell. Dieser Parameter hat daher auch einen großen Einfluss auf die Abflussmenge an den Quellen. Die beiden DRN -Parameter steuern, wie viel Wasser von den Flüssen aus dem System entnommen wird. Diese Wassermenge wird zum Teil in die Abflussmenge der St. Marks-Quelle eingerechnet, der andere Teil kann nicht mehr unterirdisch den Quellen zugeführt werden und beeinflusst diese daher relativ stark.

Auf dem nächsten Rang schließt sich der Parameter d an, der das Röhrensystem charakterisiert. Er bestimmt maßgeblich die Wassermenge, die durch die Röhren abgeführt werden kann, und auch, wie groß die Austauschfläche zwischen Matrix und Röhren ist. Abweichend zu diesem Ergebnis war die Sensitivität der Röhrendurchmesser bei Gallegos et al. (2013) größer, jedoch, wie oben erläutert, mit einer anderen Methode. Bei dem Röhrendurchmesser, wie auch bei den anderen Parametern des Röhrensystems, ist der große Einfluss der St. Marks-Quelle bemerkenswert (Abbildung 4.9). Möglicherweise wird diese Quelle zu einem kleineren Teil von den Röhren gespeist als die anderen Quellen. Auch die Tatsache, dass die St. Marks-Messstelle den Oberlauf des St. Marks River mit einbezieht, der sich aus der Matrix speist, kann zu einer geringeren Sensitivität auf die Röhrenparameter beitragen.

Der Austausch-Parameter $Exch$ folgt auf dem nächsten Rang mit ähnlicher Größe wie der Röhrendurchmesser. Der Austausch mit der Matrix ist der einzige Weg, über den das Wasser überhaupt in die Röhren gelangt, und ist dementsprechend einflussreich auf die Abflussmenge. Auch hier gelangten Gallegos et al. (2013) zu abweichenden Ergebnissen, nämlich zu einem deutlich geringeren Einfluss des Austausch-Parameters im Vergleich zum Röhrendurchmesser.

Mit kleineren Sensitivitätsindizes folgen in der Rangfolge die Röhrenrauhigkeit *Roug*, die Grundwasserneubildung *RCH* und die Tortuosität der Röhren *Tort*. Der relativ niedrige Sensitivitätsindex der Grundwasserneubildung überrascht, da diese bei den Standrohrspiegelhöhen sehr bedeutend ist und auf Rang zwei liegt. Dies liegt daran, dass der Quellabfluss zwar auch aus Grundwasserneubildung stammt, jedoch nur zu einem Teil. Wie bereits weiter oben erwähnt, wird der Abfluss maßgeblich durch lateral an den Modellgrenzen zufließendes Grundwasser beeinflusst. Die St. Marks-Quelle ist hierbei besonders insensitiv gegenüber Variationen von *RCH* (Abbildung 4.9). Scheinbar besteht dort ein sehr großer Anteil des Abflusses aus lateral zufließendem Grundwasser. Dafür spricht eine Zahl aus dem Vorgängermodell von Davis et al. (2010, Tabelle 5), in dem der größte Teil (ca. 78%) des unterirdischen Zuflusses über die nordöstliche Modellgrenze stattfindet, welche im Einzugsgebiet der St. Marks-Quelle liegt. Bezüglich der beiden Parameter *Roug* und *Tort* decken sich die Ergebnisse mit denen von Gallegos et al. (2013), die ebenfalls nur einen geringen Einfluss dieser Parameter fanden.

Die beiden Parameter *WEL* und *Temp* sind in der Rangliste am wenigsten sensitiv. Die Wassermenge, die über die *WEL*-Randbedingung das Modell speist, ist im Verhältnis zur Gesamtwassermenge so gering, dass der Parameter nur einen geringen Einfluss auf die Abflussmengen hat. Die Temperatur beeinflusst im Modell lediglich die Viskosität und damit den Übergang zwischen laminarem und turbulentem Fließen in den Röhren. Dieser Zusammenhang überträgt sich nur sehr schwach auf die Abflussmengen. Bekräftigt wird dieses Ergebnis durch die Untersuchungen von Karay und Hajnal (2016). In ihrer Sensitivitätsanalyse waren die Temperatur, die kritischen Reynoldszahlen und die Röhrenrauhigkeit nicht sensitiv.

Standrohrspiegelhöhen

Die Sensitivität der Standrohrspiegelhöhen ist, ebenso wie bei den Abflüssen, am größten bei der hydraulischen Leitfähigkeit. Die Ergebnisse von Gallegos et al. (2013) im gleichen Gebiet und Hill (2008) an einem anderen Ort zeigen ebenfalls einen hohen Einfluss von K_f , jedoch besitzen in beiden Studien andere Parameter eine noch höhere Sensitivität.

Auf Rang zwei befindet sich die Grundwasserneubildung *RCH*, deren Sensitivitätsindex der Standrohrspiegelhöhen gegenüber den Quellabflüssen deutlich erhöht ist. Dies liegt vermutlich daran, dass eine Veränderung der Grundwasserneubildung in jeder Zelle des Modellgebiets den Wasserhaushalt beeinflusst, was sich direkt als Veränderung der Standrohrspiegelhöhe ausdrückt. In der Studie von Hill (2008) besaß die Grundwasserneubildung die größte Sensitivität, bezogen auf die Standrohrspiegelhöhen, noch vor der hydraulischen Leitfähigkeit.

Der nächste Parameter in der Rangliste, DRN_{cond} , bestimmt die in die Flüsse infiltrierende Wassermenge. In unmittelbarer Umgebung der Flüsse wird dadurch die Standrohrspiegelhöhe am stärksten verändert, was sich durch das hohe Gewicht der Punkte 9 und 10 erklären lässt, die nahe an den Flüssen liegen (Abbildungen 4.2 und 4.10).

Auf den Rängen vier und fünf folgen zwei Parameter des Röhrensystems, $Exch$ und d . Generell hat das Röhrensystem einen großen Einfluss auf die Grundwasseroberfläche, was an den Konturlinien in Abbildung 4.2 zu sehen ist. Auf den Sensitivitätsindex aller Röhrenparameter hat Messpunkt 6 einen besonderen Einfluss, denn er liegt in einem Bereich mit relativ hohem Gradienten des Grundwasserspiegels und zwischen den beiden nördlichen Zweigen des Röhrensystems. In der Literatur finden sich teils abweichende Ergebnisse. In Gallegos et al. (2013) besitzt d die größte Sensitivität aller Parameter, während $Exch$ einen deutlich kleineren Wert aufweist und in der gleichen Größenordnung wie $Tort$ und $Roug$ liegt. Saller et al. (2013) bestätigen die Sensitivität von zwei Grundwassermessstellen, die sich nahe eines Röhrensystems befinden, auf die beiden Parameter. Für d ist die Sensitivität jedoch abhängig vom Parameterwert; oberhalb eines bestimmten Grenzwertes ist der Parameter nicht mehr sensitiv. Einen Vergleich der beiden Parameter nehmen die Autoren nicht vor.

Die Ränge sechs und sieben belegen die Randbedingungen CHD und DRN_{elev} . Hierbei sind die Konfidenzintervalle verhältnismäßig eng, es kann also von einem klaren Zusammenhang zwischen den Standrohrspiegelhöhen und jedem der beiden Parameter ausgegangen werden. Dieser Zusammenhang besteht insofern, als dass die beiden Parameter Wasserspiegelhöhen darstellen, im Fall von CHD eben jene an den Modellrändern, bei DRN_{elev} diejenigen des Flusses. Auf eine Veränderung dieser Wasserspiegelhöhen reagieren die Standrohrspiegelhöhen an den Messstellen dann in ähnlicher Weise. Für beide Parameter sind die Punkte 9 und 10 von besonderer Bedeutung, die nahe an den Flüssen liegen. Deren Wirkung lässt sich hier gut erkennen. Für den Sensitivitätsindex von CHD sind diese Punkte jedoch ebenfalls von Bedeutung. Wie in Abbildung 4.10 zu sehen, wäre bei ihrer Abwesenheit der Sensitivitätsindex höher, was bedeutet, dass sie ihn durch ihre Anwesenheit verringern. Zu erklären ist dies damit, dass die Flüsse die Standrohrspiegelhöhen in ihrer Umgebung relativ konstant halten, auch wenn sich die Bedingungen an den Modellrändern verändern.

Die Sensitivitätsindizes der folgenden Parameter $Tort$ und $Roug$ sind bereits zwei Größenordnungen kleiner als die von K_f . Sie sind die weniger einflussreichen Parameter des Röhrensystems, auf das schon weiter oben eingegangen wurde. Ebenfalls eher insensitiv sind diese Parameter bei Gallegos et al. (2013).

Die Schlusslichter bei den Sensitivitätsindizes der Standrohrspiegelhöhen bilden, wie

bereits bei den Quellabflüssen und aus gleichen Gründen, *WEL* und *Temp*. Bemerkenswert ist der Unterschied von *WEL* zwischen den Standrohrspiegelhöhen und Quellabflüssen, deren Ursache ähnlich wie bei *RCH* sein dürfte.

Der Einfluss von Messpunkt 11 wurde bisher in der Interpretation ausgeklammert. Bei allen Parametern außer *CHD* beeinflusst er den Sensitivitätsindex in besonderer Weise (vgl. Abbildung 4.10). Vermutlich liegt dies nicht an einer besonderen Sensitivität dieses Punktes auf alle Parameter, sondern daran, dass das Modell selbst mit den kalibrierten Parametern den Messwert nicht genau vorhersagen kann. Durch den großen Fehler erhält dieser auch bei der Berechnung des Sensitivitätsindex ein hohes Gewicht.

Variation

Die Bedeutung des Varianzkoeffizienten („CV“) soll im folgenden Absatz anhand von Abbildung 4.6 (unten) erläutert werden, die sich auf die kombinierten *Elementary Effects* bezieht. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf den einflussreicheren Parametern, da der CV bei diesen anzeigt, wie „stabil“ deren Einflussgröße ist, also wie stark sie sich im Parameterraum verändert. K_f als einflussreichster Parameter besitzt einen relativ geringen CV, ist also über einen großen Wertebereich und in vielen Bereichen des Parameterraums einflussreich. Der Einfluss des Parameters *RCH* schwankt deutlich stärker im Parameterraum, wobei die Schwankung wiederum ebenfalls eine große Unsicherheit aufweist. Wie groß die Sensitivität auf den Parameter ist, hängt also stark davon ab, welche Werte die *anderen* und auch *der betrachtete Parameter selbst* annehmen. Genauso verhält es sich bei den folgenden Parametern *CHD*, DRN_{elev} , DRN_{cond} und *d*. Der nächste Parameter *Exch* besitzt den niedrigsten CV aller Parameter und auch eine relativ geringe Unsicherheit. Er scheint daher einen konstant bleibenden Einfluss auf die Ausgangsgrößen zu besitzen. Auf die restlichen Parameter sind die Erklärungen zu übertragen, wobei sich bei kleineren Sensitivitätsindizes die Frage nach der Aussagekraft stellt. Wie bei *Temp* zu sehen, beträgt die Standardabweichung der Elementary Effects das Dreifache des Mittelwertes, mit einem Unsicherheitsbereich, der annähernd an das Fünffache heran reicht. Trotzdem ist der Absolutwert der Standardabweichung sehr gering. Bei geringen Sensitivitätsindizes ist auch ohne weitere Untersuchung davon auszugehen, dass eine starke Interaktion mit den anderen, einflussreicheren Parametern besteht.

5.2.3 Folgerungen

Folgende Folgerungen lassen sich aus den Untersuchungen ableiten: Durch die Unterschiede der Parametersensitivitäten lassen sich die wichtigsten Stellschrauben des Mo-

dells identifizieren und auch eine Rangliste aufstellen, wenn auch durch die große Unsicherheit nicht jeder Rang eindeutig bestimmt werden kann. Der sowohl für die Quellabflüsse als auch die Standrohrspiegelhöhen einflussreichste Parameter ist die hydraulische Leitfähigkeit. Es folgen in einigem Abstand Parameter der Randbedingungen, nämlich die Grundwasserneubildung, die Standrohrspiegelhöhen am Modellrand, und die Parameter der *DRN*-Randbedingung, deren kombinierte Sensitivitätsindizes etwa gleich groß sind, obwohl zwischen den Zielgrößen große Unterschiede bestehen. Erst im Anschluss folgen die MODFLOW-CFP-spezifischen Parameter für die diskreten Röhren. Die *WEL*-Randbedingung übt nur einen geringen Einfluss auf die Ausgangsgrößen aus. Teilweise existieren starke Interaktionen zwischen den Parametern, was die Komplexität des Modells weiter hervorhebt.

Die durchgeführten Untersuchungen erlauben ein allgemeines Verständnis des Modells, das durch den Einfluss einzelner Messstellen gut ergänzt wird. Für praktische Fragestellungen dürfte dieses jedoch nicht ausreichend sein. Die Ergebnisse stellen nur Mittelwerte dar, sowohl räumlich und, da die Modellierung nur stationär durchgeführt wurde, auch zeitlich. Die „mittleren“ Zustände der Grundwasserneubildung, der Standrohrspiegelhöhen an den Modellrändern etc., wie sie in der stationären Modellierung angenommen werden, kommen in der Realität vermutlich niemals vor. Es ist anzunehmen, dass bei einer instationären Modellierung auch die Parameter und deren Sensitivitäten unterschiedlich sein werden. Bei der Verwendung der Ergebnisse sollte dies berücksichtigt werden.

5.3 Sensitivitätsanalyse mit räumlich verteilter Parametervariation

5.3.1 Unsicherheit

Das prinzipielle Vorgehen bei der räumlich verteilten ist genauso wie bei der räumlich einheitlichen Parametervariation. Daher sind die Ursachen, die zu Unsicherheit führen, hier ebenso vorhanden, beispielsweise die Wahl des Parameter-Wertebereichs oder nicht konvergierende Modellläufe (siehe Abbildung 4.11). Das Konfidenzintervall der Sensitivitätsindizes ist teilweise größer als bei der räumlich einheitlichen Untersuchung (Abbildung 4.12), beim Parameter K_f im Bereich 3 erstreckt es sich, bezogen auf die Standrohrspiegelhöhen, über ca. drei Größenordnungen. Auch der Varianzkoeffizient (Abbildung 4.14) besitzt für diesen Parameter eine sehr hohe Unsicherheit von mehr als 10.

Wie schon in Kapitel 5.2 erwähnt wurde, birgt die Konvergenzanalyse für die Sensitivitätsindizes und die Rangfolge Unsicherheiten. Auch in der räumlich verteilten Analyse

konvergieren die Sensitivitätsindizes nicht, die formell konvergierende Rangfolge (Abbildung 4.15) kann angezweifelt werden. Die Ausführungen über einflussreiche Messpunkte aus Kapitel 5.2 gelten entsprechend.

Die Aufteilung des Gebietes in mehrere Bereiche kann zur Folge haben, dass die Sensitivität der Parameter abnimmt, da kleine Gebiete möglicherweise weniger Einfluss auf Ausgangsgrößen haben wie große. Die gemischte Betrachtung von räumlich aufgeteilten und einheitlichen Parametern berücksichtigt diesen Umstand nicht, wodurch Fehlinterpretationen möglich sind. Eine offensichtliche Korrelation zwischen der Zellenanzahl des Bereichs und dem Sensitivitätsindex besteht für die räumlich variierten Parameter nicht (Abbildung 4.18).

5.3.2 Interpretation der Ergebnisse

Sensitivitätsindizes

Im folgenden Absatz sollen die Ergebnisse erläutert und interpretiert werden. Die Rangfolge der Sensitivitätsindizes ist, verglichen mit der räumlich einheitlichen Untersuchung, im Großen und Ganzen gleich geblieben. Der Hauptunterschied sind die geringen Indizes von RCH , was durch die geringere räumliche Ausdehnung der einzelnen Bereiche zu erklären ist. K_f weist trotz der Aufteilung in drei Bereichen die höchsten Sensitivitätsindizes von allen Parametern auf. Die Größe der Indizes hat im Vergleich zur räumlich einheitlichen Untersuchung abgenommen. Eine mögliche Erklärung ist, dass extreme Werte für K_f oder RCH , die vorher auf das ganze Modellgebiet angewendet wurden, jetzt nur noch auf einen begrenzten Bereich angewendet werden, während die anderen Bereiche nur in wenigen Fällen ebenfalls extreme Werte annehmen. So kommen Modellläufe mit extrem guter oder schlechter Modellgüte seltener vor und die Unterschiede zwischen den Modellläufen und damit auch die Sensitivitätsindizes werden geringer. Dieser Effekt könnte jedoch möglicherweise durch die vorgenommene Transformation der Nash-Sutcliffe-Efficiency verringert oder sogar umgekehrt werden.

Ein näherer Blick auf die Unterschiede zwischen den Bereichen ist von einigem Interesse. K_f besitzt die größten Werte in Bereich 4, gefolgt von 3, 2 und 1. Diese Reihenfolge ist sowohl bei dem auf die Standrohrspiegelhöhen als auch beim auf die Quellabflüsse bezogenen Sensitivitätsindex gleich (Abbildung 4.12). Ein Grund dafür dürfte sein, dass in Bereich 4 die ursprünglich kalibrierten Parameterwerte am höchsten und in Bereich 1 am niedrigsten waren. Da die Variation der Parameter auf Basis des ursprünglichen Wertes passiert, werden die Bereiche in den meisten Modellläufen ebenfalls diese Rangfolge aufweisen. Die Zellen mit dem höchsten K_f -Wert haben tendenziell einen größeren

Wasserdurchfluss als die Zellen mit niedrigen K_f -Werten, sorgen somit für den größten Teil des Abflusses an den Quellen und können ihn am stärksten beeinflussen, was einen größeren Sensitivitätsindex zur Folge hat. Eine weitere Erklärung liefert der große Einfluss der St. Marks-Quelle auf den abflussbezogenen Sensitivitätsindex. Wie Abbildung 4.17 zu entnehmen ist, weist die Quelle bei den meisten Parametern eine relativ zu den anderen Quellen geringere Sensitivität auf, mit absteigender Einflussgröße in den Bereichen 1 bis 4. Daraus lässt sich schließen, dass die Reihenfolge der Bereiche stark von der St. Marks-Quelle gesteuert wird. Die Erklärung dafür liefert ein Blick auf Abbildung 3.7: Im Einzugsgebiet der St. Marks-Quelle liegen fast ausschließlich die Bereiche 4 und 3. Bereich 2 trägt nur einen kleinen Teil zum Abfluss bei, Bereich 1 ist fast nicht im Einzugsgebiet vorhanden und zum größten Teil weit entfernt von der St. Marks-Quelle. Dies wirkt sich deutlich auf die Sensitivitäten aus.

Auf die Standrohrspiegelhöhen wirkt sich eine Variation von K_f in Form einer Veränderung des Grundwassergradienten aus. Eine Variation in einem Bereich hat zwar immer Auswirkungen auf das ganze Modell, jedoch ist schwer nachzuvollziehen, warum sich K_f im Bereich 4 stärker auf die Standrohrspiegelhöhen auswirkt als in den anderen Bereichen. Insbesondere weil in Bereich 4 keine Grundwassermessstelle liegt, sondern zum überwiegenden Teil in Bereich 2, ist das Ergebnis schwer zu interpretieren. Dass das Konfidenzintervall in Bereich 2 am kleinsten ist, könnte auf diese Messstellenverteilung zurück geführt werden. Ein Blick auf Abbildung 4.16 zeigt allerdings, dass Messpunkt 11 einen erheblichen Einfluss auf den Sensitivitätsindex hat. Dessen Werte für K_f 1 bis 4 im Diagramm liegen zwischen $1.5 \cdot 10^{-5}$ und $5.8 \cdot 10^{-5}$, ohne Punkt 11 wäre also der Sensitivitätsindex deutlich niedriger. Wie bereits oben erwähnt, lässt sich die gewaltige Dominanz dieser Messstelle im Vergleich zu den anderen dadurch erklären, dass er, zumindest mit den kalibrierten Parametern, einen hohen Fehler aufweist (Abbildung 4.1). Dadurch dominiert er die NSE und dementsprechend auch den Sensitivitätsindex.

Der räumlich aufgeteilte Parameter RCH beeinflusst die Standrohrspiegelhöhen und die Quellabflüsse auf unterschiedliche Weise in den einzelnen Bereichen. Da der auf die Quellabflüsse bezogene Sensitivitätsindex mehrere Größenordnungen über dem auf die Standrohrspiegelhöhen bezogenen liegt, ist die Reihenfolge des kombinierten Indexes die gleiche wie bei dem auf die Quellabflüsse bezogenen. Die Abflüsse reagieren am sensitivsten auf die Bereiche 2, 4 und 3, auf die in einigem Abstand Bereich 1 folgt. Mögliche Erklärungen liefert ein Blick auf die Karte in Abbildung 4.13. Da die Grundwasserneubildung von oben kommt, wirkt sie nur auf die oberste Schicht im Modell. In dieser Schicht hat Bereich 2 den größten Anteil und liegt in den Einzugsgebieten aller Quellen, wodurch sich ein großer Einfluss auf die Abflussmengen ergibt. Die Bereiche 4 und 3 sind zwar kleiner,

besitzen aber die höchsten hydraulischen Leitfähigkeiten und können daher eine große Wassermenge zu den Quellen transportieren. Bereich 3 liegt dabei zum größten Teil im Einzugsgebiet der Wakulla- und Spring Creek-Quellen, während er kaum zum Abfluss der St. Marks-Quelle beiträgt. Bereich 4 hingegen entwässert zum größten Teil in die St. Marks-Quelle und hat wenig Einfluss auf die anderen Quellen. Insgesamt gleichen sich diese Effekte aus, sodass die Bereiche 3 und 4 auf alle Quellen bezogen einen ähnlichen Einfluss besitzen. Der Sensitivitätsindex von Bereich 1 ist ungefähr eine Größenordnung kleiner als der anderer Bereiche, weil die hydraulische Leitfähigkeit dort am geringsten ist. Eine größere Neubildungsmenge kann das Gebiet nur langsam verlassen und sorgt daher nicht für hohe Quellschüttungen. Zudem liegt der Bereich nicht im Einzugsgebiet der St. Marks-Quelle. Ohne deren Berücksichtigung wäre der Sensitivitätsindex fast 40-mal höher (Abbildung 4.17).

Die Standrohrspiegelhöhen reagieren am sensitivsten auf RCH im Bereich 1, gefolgt von den Bereichen 2, 3 und 4. Diese Reihenfolge erscheint auf den ersten Blick logisch, da sich der Gradient des Grundwasserspiegels mit sinkender hydraulischer Leitfähigkeit erhöht, und sich damit auch die Standrohrspiegelhöhen stärker verändern. Auf den zweiten Blick hat jedoch die Verteilung der Messstellen einen erheblichen Einfluss auf die Reihenfolge. Der hohe Sensitivitätsindex in Bereich 1 wird stark von Messstelle 11 beeinflusst (Abbildung 4.16), er wäre ohne diese Messstelle nur 0.005-mal so groß. Messstelle 11 wurde bereits mehrfach diskutiert. Der Sensitivitätsindex in Bereich 2 ist groß, weil dort neun von 13 Messstellen liegen, während in den Bereichen 3 und 4 nur zwei bzw. gar keine Messstellen liegen. Diese Verteilung beeinflusst die Reihenfolge der Bereiche von RCH vermutlich stark.

Variation

Der Varianzkoeffizient (CV) unterscheidet sich zwischen den Parametern und auch in den einzelnen räumlichen Bereichen deutlich. Tendenziell sind die Varianzkoeffizienten bei den Parametern mit hohem Sensitivitätsindex am höchsten. Es sollen die beiden räumlich variierten Parameter K_f und RCH betrachtet werden. Der CV von K_f bewegt sich in den einzelnen Regionen zwischen 3 und 5. Diese hohen Werte kommen dadurch zustande, dass K_f eine Gebietseigenschaft ist und den Wasserhaushalt nicht direkt beeinflusst. Der K_f -Wert bekommt eine hohe Bedeutung, wenn gleichzeitig viel Wasser durch die Zellen fließt. Ohne Wasser ist K_f jedoch für die Ausgangsgrößen ohne Bedeutung, und durch diese Abhängigkeit von anderen Parametern kommt ein hoher CV zustande. Der Unterschied zwischen einzelnen Bereichen hängt vermutlich davon ab, wie viele Parameter in den Wasserhaushalt des jeweiligen Bereichs eingreifen. Die Bereiche 3 und 4 beispielsweise, die

einen sehr hohen CV besitzen, sind mit dem Röhrensystem verbunden. Dieses wird durch viele Parameter charakterisiert, die in den einzelnen Modellläufen einen sehr variablen Einfluss auf die *Elementary Effects* besitzen.

Der Parameter *RCH* hingegen beeinflusst direkt den Wasserkreislauf durch die Menge der Grundwasserneubildung. Sein Einfluss ist daher eher unabhängig von der Konstellation anderer Parameter und sein CV mit Werten zwischen eins und zwei in den einzelnen Bereichen entsprechend gering. Die Bereiche weisen dabei nur geringe Unterschiede auf, und auch die Unsicherheit ist unter den kleinsten von allen Parametern.

5.3.3 Folgerungen

Aus einer räumlichen Unterteilung der Eingangsparameter und anschließender Sensitivitätsanalyse können wichtige Erkenntnisse gewonnen werden. Die Methodik ist allerdings, angefangen bei der Gebietsaufteilung über die Parametervariation bis hin zum Vergleich mit Beobachtungsdaten, von herausragender Bedeutung, damit keine falschen Schlüsse gezogen werden. Die in dieser Studie gewonnenen Ergebnisse sind von einer großen Unsicherheit geprägt. Dies ist zum Teil der gemeinsamen Untersuchung von verschiedenen Ausgangsgrößen geschuldet, deren Ergebnisse sich deutlich unterscheiden. Darüber hinaus haben die räumlichen Gegebenheiten und sogar einzelne Messstellen einen dominierenden Einfluss auf das Endergebnis. In dieser Studie sind dies die St. Marks-Quelle und die Grundwassermessstelle 11. Daher sind allgemeine Aussagen über den Einfluss der Parameter in den Teilbereichen schwer zu treffen. Vielmehr ist eine differenzierte Betrachtung je nach Fragestellung sinnvoll. Grundsätzlich zeigt diese Untersuchung jedoch, dass der Einfluss der räumlichen Gebiete unterschiedlich ist und bei keiner Studie fehlen sollte. Die hier durchgeführten Analysen zu einflussreichen Beobachtungspunkten stellen ebenfalls wichtige Werkzeuge für tiefer gehende Untersuchungen mit räumlich verteilten Modellen dar, die auch außerhalb des Grundwasserbereichs angewandt werden können.

Kapitel 6

Schlussfolgerungen und Ausblick

Die Sensitivitätsanalyse zeigt, dass es zwischen den Parametern deutliche Unterschiede hinsichtlich ihres Einflusses auf die Modellgüte gibt. Variiert man die Parameter im gesamten Modellgebiet einheitlich, sind die einflussreichsten Parameter die hydraulische Leitfähigkeit sowie die Randbedingungen, die den Zu- und Abfluss in und aus dem Modell kontrollieren. Die Parameter des Röhrensystems besitzen, trotz der wichtigen Rolle für die Modellgüte, eine geringere Sensitivität. Betrachtet man einzelne räumliche Bereiche der wichtigsten Parameter K_f -Wert und Grundwasserneubildung, sind die Sensitivitäten unterschiedlich. Zudem steigen die Interaktionen zwischen den Parametern und Unsicherheiten an. Dies zeigt, dass die räumliche Aufteilung sinnvoll ist. Auch bei anderen räumlich verteilten Modellen sollte sie daher angewendet werden.

Für praktische Fragestellungen sind folgende Punkte für die richtige Interpretation wichtig:

- Für jede Fragestellung muss die relevante Ausgangsgröße betrachtet werden, da sich die Sensitivitätsindizes für Quellschüttungen und Standrohrspiegelhöhen stark voneinander unterscheiden.
- Die Verteilung der Messstellen, mit denen die Modellgüte berechnet wird, kann sich auf das Ergebnis auswirken. Die Sensitivitätsanalyse beurteilt daher nur das Modellergebnis an den Messstellen.
- Da die Streuung der *Elementary Effects* innerhalb des Parameterraums relativ hoch ist, kann ergänzend eine lokale Sensitivitätsanalyse im Bereich der kalibrierten Parameterwerte erfolgen, um ein genaueres Ergebnis zu erhalten.
- Die Ergebnisse wurden in einer stationären Modellierung mit mittleren Randbedingungen ermittelt. Ob ein solcher Zustand in der Realität überhaupt auftritt,

ist zu bezweifeln. Unter realen Bedingungen, beispielsweise während eines Niederschlagsereignisses, dürften die Sensitivitätsindizes abweichen.

Für ein tieferes Verständnis können in Zukunft weitere Untersuchungen beitragen. Ein erster Schritt wäre, auch andere Parameter räumlich aufzuteilen und die Bereiche zu verkleinern. Die Fragestellung nach den räumlichen Sensitivitäten der Röhrenparameter wäre dabei besonders interessant. Vermutlich ist der Austausch zwischen Röhren und Matrix bei hoher Röhrendichte oder großen Röhren einflussreicher als an anderen Orten. Weiterhin sollten instationäre Modellierungen folgen, die die reale Dynamik des Einzugsgebiets wiedergeben. Dann würde noch der spezifische Speicherkoeffizient als Aquiferparameter hinzu kommen. Auch eine getrennte Betrachtung von feuchten und trockenen Zeiträumen würde bereits einen Mehrwert an Informationen bringen, denn es ist anzunehmen, dass bei einem hohen Aquiferfüllstand andere Prozesse dominant sind als bei einem niedrigen. Bei feuchten Bedingungen dürften die Röhrenparameter einflussreicher als die Matrixeigenschaften sein, da durch die Röhren dann die größte Abflussmenge fließt. Für umfassendere Untersuchungen wären zudem mehr Messpunkte mit einer gleichmäßigen räumlichen Verteilung anzustreben. Weiterhin zeigen die hohen Standardabweichungen der *Elementary Effects*, dass die Variabilität der Sensitivität im Parameterraum besser untersucht werden sollte.

Wie bei jeder Erkenntnis, die in einem speziellen Gebiet gewonnen wurde, sollten weitere Untersuchungen andere Gebiete in unterschiedlichen Klimazonen und mit unterschiedlichem Grad der Verkarstung einschließen.

Literaturverzeichnis

- Bigiarini, M. Z. (2017). Goodness-of-fit (GoF) functions for numerical and graphical comparison of simulated and observed time series, mainly focused on hydrological modelling: R Package "hydroGOF": Version 0.3-10.
- Campolongo, F., Saltelli, A. und Cariboni, J. (2011). From screening to quantitative sensitivity analysis. A unified approach, *Computer Physics Communications* **182**(4): 978–988.
- Chang, Y., Wu, J. und Liu, L. (2015). Effects of the conduit network on the spring hydrograph of the karst aquifer, *Journal of Hydrology* **527**: 517–530.
- Chelette, A., Pratt, T. R. und Katz, B. G. (2002). Nitrate Loading as an Indicator of Nonpoint Source Pollution in the Lower St. Marks-Wakulla Rivers Watershed, *Water Resources Special Report*, Vol. 02-1.
- Davis, H. (1996). Hydrogeologic Investigation and Simulation of Ground-Water Flow in the Upper Floridan Aquifer of North-Central Florida and Southwestern Georgia and Delineation of Contributing Areas for Selected City of Tallahassee, Florida, Water-Supply Wells, *U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report*, Vol. 95-4296.
- Davis, J. H. und Katz, B. G. (2007). Hydrogeologic Investigation, Water Chemistry Analysis, and Model Delineation of Contributing Areas for City of Tallahassee Public-Supply Wells, Tallahassee, Florida, *U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report*, Vol. 2007-5070.
- Davis, J., Katz, B. G. und Griffin, D. W. (2010). Nitrate-N Movement in Groundwater from the Land Application of Treated Municipal Wastewater and Other Sources in the Wakulla Springs Springshed, Leon and Wakulla Counties, Florida, 1966-2018, *U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report*, Vol. 2010-5099.

- Doerfliger, N., Jeannin, P.-Y. und Zwahlen, F. (1999). Water vulnerability assessment in karst environments: a new method of defining protection areas using a multi-attribute approach and GIS tools (EPIK method), *Environmental Geology* **39**(2): 165–176.
- Filippini, M., Martina, M., Menichetti, S., Palmiero, F., Ranfagni, L. und Gargini, A. (2016). Use of the Conduit Flow Process for the simulation of passive mitigation measures against the piezometric damming effect at the new underground High Speed railway station of Florence, *Rendiconti Online della Società Geologica Italiana* **41**: 57–60.
- Ford, D. C. und Williams, P. (2007). *Karst Hydrogeology and Geomorphology*, John Wiley & Sons.
- Gallegos, J. J. (2011). Modeling Groundwater Flow in Karst Aquifers: An Evaluation of MODFLOW-CFP at the Laboratory and Sub-Regional Scales. Masterarbeit. Florida State University.
- Gallegos, J. J., Hu, B. X. und Davis, J. (2013). Simulating flow in karst aquifers at laboratory and sub-regional scales using MODFLOW-CFP, *Hydrogeology Journal* **21**(8): 1749–1760.
- Giese, M., Reimann, T., Liedl, R., Maréchal, J.-C. und Sauter, M. (2017). Application of the flow dimension concept for numerical drawdown data analyses in mixed-flow karst systems, *Hydrogeology Journal* **25**(3): 799–811.
- Gleeson, T., Wada, Y., Bierkens, M. F. P. und van Beek, L. P. H. (2012). Water balance of global aquifers revealed by groundwater footprint, *Nature* **488**(7410): 197–200.
- Goldscheider, N. und Andreo, B. (2007). The geological and geomorphological framework, in N. Goldscheider und D. Drew (eds), *Methods in Karst Hydrogeology*, International Contributions to Hydrogeology, Taylor & Francis Group, Leiden, Niederlande, pp. 9–23.
- Groves, C. (2007). Hydrological methods, in N. Goldscheider und D. Drew (eds), *Methods in Karst Hydrogeology*, International Contributions to Hydrogeology, Taylor & Francis Group, Leiden, Niederlande, pp. 45–64.
- Harbaugh, A. W. (1990). A Computer Program for Calculating Subregional Water Budgets Using Results from the U.S. Geological Survey Modular Three-dimensional Finite-difference Ground-water Flow Model, *U.S. Geological Survey Open-File Report*, Vol. 90-392.

- Harbaugh, A. W. (2005). MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey modular ground-water model - the Ground-Water Flow Process, *U.S. Geological Survey Techniques and Methods*, Vol. 6-A16.
- Hartmann, A., Barber, J. A., Lange, J., Andreo, B. und Weiler, M. (2013). Progress in the hydrologic simulation of time variant recharge areas of karst systems - Exemplified at a karst spring in Southern Spain, *Advances in Water Resources* **54**: 149–160.
- Hartmann, A., Goldscheider, N., Wagener, T., Lange, J. und Weiler, M. (2014). Karst water resources in a changing world: Review of hydrological modeling approaches, *Reviews of Geophysics* **52**(3): 218–242.
- Hill, M. E. (2008). An evaluation of conduit conceptualizations and model performance. Doktorarbeit. University of South Florida.
URL: <http://scholarcommons.usf.edu/etd/292>
- Hill, M. E., Stewart, M. T. und Martin, A. (2010). Evaluation of the MODFLOW-2005 Conduit Flow Process, *Ground Water* **48**(4): 549–559.
- Jeannin, P.-Y., Groves, C. und Häuselmann, P. (2007). Speleological investigations, in N. Goldscheider und D. Drew (eds), *Methods in Karst Hydrogeology*, International Contributions to Hydrogeology, Taylor & Francis Group, Leiden, Niederlande, pp. 25–44.
- Karay, G. und Hajnal, G. (2015). Modelling of Groundwater Flow in Fractured Rocks, *Procedia Environmental Sciences* **25**: 142–149.
- Karay, G. und Hajnal, G. (2016). Modelling Methods Attached to the Research of Groundwater Flow in Fractured Rocks – Theories, Laboratory and Numerical Modelling, *Periodica Polytechnica Civil Engineering* pp. 437–448.
- Kiraly, L. (1998). Modelling karst aquifers by the combined discrete channel and continuum approach, *Bulletin d'Hydrogéologie* **16**: 77–98.
- Kordilla, J., Sauter, M., Reimann, T. und Geyer, T. (2012). Simulation of saturated and unsaturated flow in karst systems at catchment scale using a double continuum approach, *Hydrology and Earth System Sciences* **16**(10): 3909–3923.
- Kuniansky, E. L. (2014). Taking the Mystery Out of Mathematical Model Applications to Karst Aquifers - A Primer, in E. L. Kuniansky und L. E. Spangler (eds), *U.S. Geological Survey Karst Interest Group Proceedings*, U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2014-5035, pp. 69–81.

- Kuniansky, E. L. (2016a). MODFLOW and MODFLOW Conduit Flow Process data sets for simulation experiments of the Woodville Karst Plain, near Tallahassee, Florida with three different approaches and different stress periods, *U.S. Geological Survey data release*.
URL: <http://dx.doi.org/10.5066/F7PK0D87>
- Kuniansky, E. L. (2016b). Simulating groundwater flow in karst aquifers with distributed parameter models—Comparison of porous-equivalent media and hybrid flow approaches, *U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report*, Vol. 2016-5116.
URL: <https://pubs.er.usgs.gov/publication/sir20165116>
- Kuniansky, E. L., Gallegos, J. J. und Davis, J. (2011). Comparison of Three Model Approaches for Spring Simulation, Woodville Karst Plain, Florida, in E. L. Kuniansky (ed.), *U.S. Geological Survey Karst Interest Group Proceedings*, U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2011-5031, Reston, Virginia, pp. 169–170.
- Kuniansky, E. L., Halford, K. J. und Shoemaker, W. B. (2008). Permeameter data verify new turbulence process for MODFLOW, *Ground Water* **46**(5): 768–771.
- McDonald, M. G. und Harbaugh, A. W. (2003). The History of MODFLOW, *Ground Water* **41**(2): 280–283.
- Miller, J. A. (1986). Hydrogeologic Framework of the Floridan Aquifer System in Florida and in Parts of Georgia, Alabama, and South Carolina, *U.S. Geological Survey Professional Paper*, Vol. 1403-B.
- Morris, M. D. (1991). Factorial Sampling Plans for Preliminary Computational Experiments, *Technometrics* **33**(2): 161.
- Nash, J. E. und Sutcliffe, J. V. (1970). River flow forecasting through conceptual models part I - A discussion of principles, *Journal of Hydrology* (10): 282–290.
- Pianosi, F., Beven, K., Freer, J., Hall, J. W., Rougier, J., Stephenson, D. B. und Wagener, T. (2016). Sensitivity analysis of environmental models: A systematic review with practical workflow, *Environmental Modelling & Software* **79**: 214–232.
- Pianosi, F., Sarrazin, F. und Wagener, T. (2015). A Matlab toolbox for Global Sensitivity Analysis, *Environmental Modelling & Software* **70**: 80–85.
- R Core Team (2017). R: A Language and Environment for Statistical Computing.
URL: <https://www.R-project.org>

- Reimann, T., Giese, M., Geyer, T., Liedl, R., Maréchal, J. C. und Shoemaker, W. B. (2014). Representation of water abstraction from a karst conduit with numerical discrete-continuum models, *Hydrology and Earth System Sciences* **18**(1): 227–241.
- Reimann, T. und Hill, M. E. (2009). MODFLOW-CFP: A New Conduit Flow Process for MODFLOW-2005, *Ground Water* **47**(3): 321–325.
- Reimann, T., Liedl, R., Birk, S. und Bauer, S. (2013). MODFLOW-CFP, Version 1.9.25 CFPv2.
URL: <https://tu-dresden.de/bu/umwelt/hydro/igw/forschung/downloads/cfpv2>, zuletzt geprüft am 14.09.2017
- Reimann, T., Rehrl, C., Shoemaker, W. B., Geyer, T. und Birk, S. (2011). The significance of turbulent flow representation in single-continuum models, *Water Resources Research* **47**(9): W09503.
- Saller, S. P., Ronayne, M. J. und Long, A. J. (2013). Comparison of a karst groundwater model with and without discrete conduit flow, *Hydrogeology Journal* **21**(7): 1555–1566.
- Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M. und Tarantola, S. (2008). *Global Sensitivity Analysis: The Primer*, John Wiley & Sons, West Sussex, England.
- Sarrazin, F., Pianosi, F. und Wagener, T. (2016). Global Sensitivity Analysis of environmental models: Convergence and validation, *Environmental Modelling & Software* **79**: 135–152.
- Sauter, M., Geyer, T., Kovács, A. und Teutsch, G. (2006). Modellierung der Hydraulik von Karstgrundwasserleitern – Eine Übersicht, *Grundwasser* **11**(3): 143–156.
- Shoemaker, W. B., Cunningham, K. J., Kuniansky, E. L. und Dixon, J. (2008a). Effects of turbulence on hydraulic heads and parameter sensitivities in preferential groundwater flow layers, *Water Resources Research* **44**(3): W03501.
- Shoemaker, W. B., Kuniansky, E. L., Birk, S., Bauer, S. und Swain, E. D. (2008b). Documentation of a Conduit Flow Process (CFP) for MODFLOW-2005, *U.S. Geological Survey Techniques and Methods*, Vol. 6-A24.
- Siebert, S., Burke, J., Faures, J. M., Frenken, K., Hoogeveen, J., Döll, P. und Portmann, F. T. (2010). Groundwater use for irrigation – a global inventory, *Hydrology and Earth System Sciences* **14**(10): 1863–1880.

- Teutsch, G. und Sauter, M. (1998). Distributed parameter modelling approaches in karst hydrological investigations, *Bulletin d'Hydrogéologie* **16**: 99–110.
- Vanrolleghem, P. A., Mannina, G., Cosenza, A. und Neumann, M. B. (2015). Global sensitivity analysis for urban water quality modelling: Terminology, convergence and comparison of different methods, *Journal of Hydrology* **522**: 339–352.
- Xu, Z., Hu, B. X., Davis, J. und Cao, J. (2015a). Simulating long term nitrate-N contamination processes in the Woodville Karst Plain using CFPv2 with UMT3D, *Journal of Hydrology* **524**: 72–88.
- Xu, Z., Hu, B. X., Davis, J. H. und Kish, S. (2015b). Numerical study of groundwater flow cycling controlled by seawater/freshwater interaction in a coastal karst aquifer through conduit network using CFPv2, *Journal of contaminant hydrology* **182**: 131–145.
- Yang, J. (2011). Convergence and uncertainty analyses in Monte-Carlo based sensitivity analysis, *Environmental Modelling & Software* **26**(4): 444–457.
- Zepp, H. (2014). *Geomorphologie: Eine Einführung. 6., aktualisierte Aufl.*, Schöningh, Paderborn.

Anhang

Zusätzliches Material

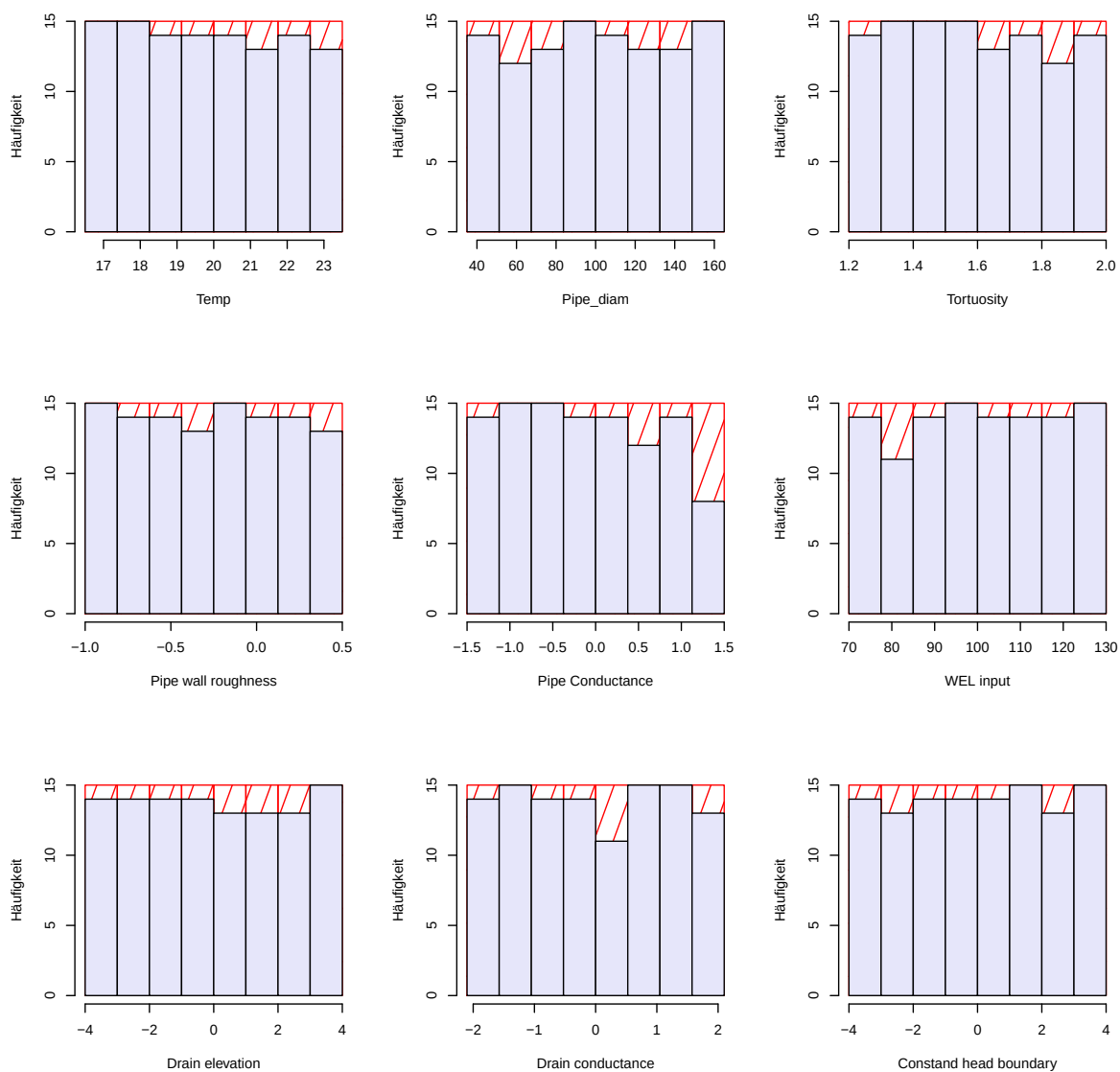


Abbildung A1: Histogramm der ungünstigen Läufe (rot schraffiert) der räumlich verteilten Analyse für die nicht in Abbildung 4.11 dargestellten Parameter

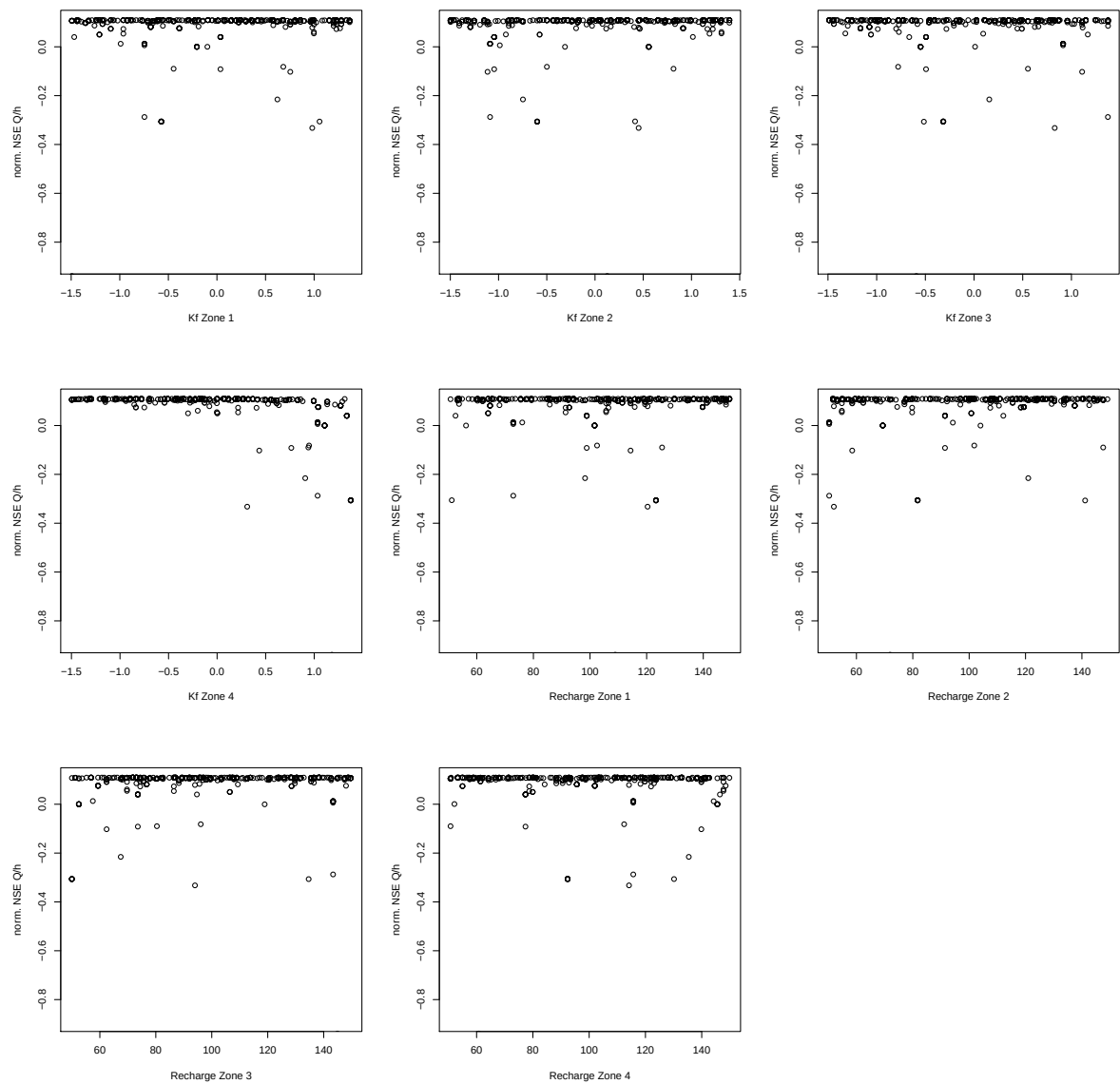


Abbildung A2: Streudiagramme für die räumlich variierten Parameter RCH und K_f . Die y-Achse ist gekürzt und nur der oberste Bereich ist dargestellt.

Ehrenwörtliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass die Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt wurde.

Alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Inhalte habe ich als solche kenntlich gemacht.

Diese Masterarbeit ist oder war weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens.

Ort, Datum

Unterschrift