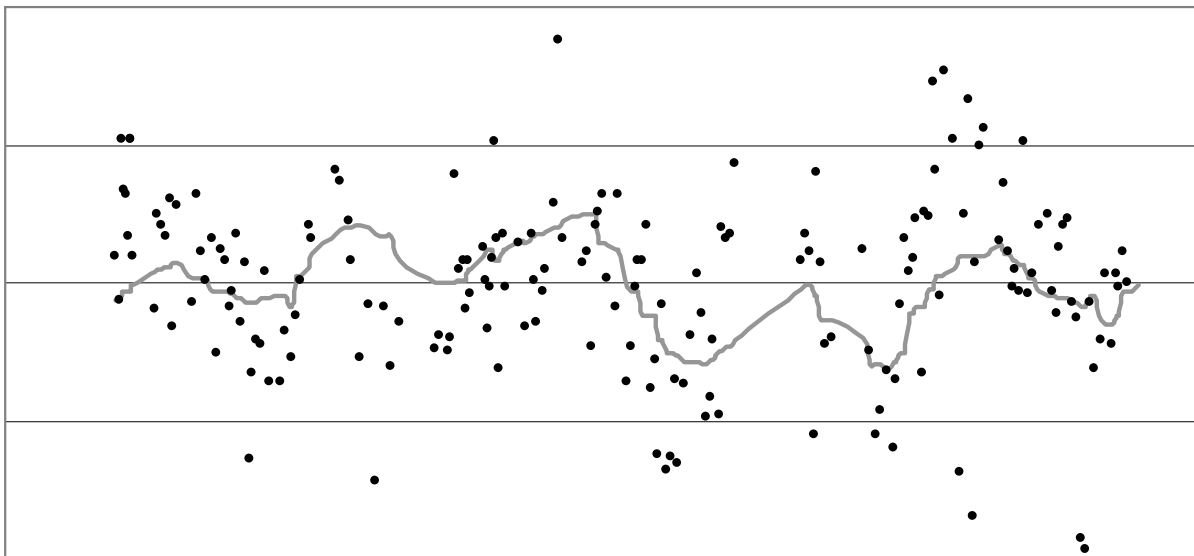

**Vergleich verschiedener Modellierungsansätze
zur Bestimmung von mittleren Verweilzeiten aus
 ^{18}O -Zeitreihen im Bruggagebiet (Südschwarzwald)**



Institut für Hydrologie
der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Falk Scissek

**Vergleich verschiedener Modellierungsansätze
zur Bestimmung von mittleren Verweilzeiten aus
¹⁸O-Zeitreihen im Bruggagebiet (Südschwarzwald)**

Referent: Prof. Dr. Ch. Leibundgut
Koreferent: Dr. S. Uhlenbrook

Diplomarbeit unter Leitung von Prof. Dr. Ch. Leibundgut
Freiburg im Breisgau, Dezember 2002

**„Bist du hinab zu den Quellen des Meeres gereist,
hast du den Abgrund des Ozeans durchwandert?**

**Hast du die Vorratskammern gesehen,
in denen ich Schnee und Hagel aufbewahre?**

**Wer schafft den Regenfluten eine Bahn,
wer ebnet Blitz und Donner den Weg...?**

**Hat der Regen einen Vater?
Wer lässt den Tau entstehen?**

**Wer bringt Eis und Frost hervor,
wenn das Wasser hart wird wie Stein,
wenn Seen und Flüsse zugefroren sind?**

**Rufst du den Wolken einen Befehl zu,
damit sie Regen auf dich herabströmen lassen?“**

Hiob 38: 16, 22, 25, 28, 29, 34

**Dem Herrn gehört die ganze Welt
und alles, was auf ihr lebt.
Die Erde befestigte er über dem Wasser,
ihre Fundamente legte er auf Meeresgrund.**

Psaln 24: 1-2

**Ich will den Herrn von ganzem Herzen loben,
alles in mir soll seinen heiligen Namen preisen!
Ich will den Herrn loben und nie vergessen,
wie viel Gutes er mir getan hat.**

**Ja, er vergibt mir meine ganze Schuld
und heilt mich von allen Krankheiten!
Er bewahrt mich vor dem sicheren Tod
und schenkt mir das Leben neu.
Seine Liebe und Güte umgeben mich allezeit.**

**Denn so hoch, wie der Himmel über der Erde ist,
so groß ist seine Liebe zu allen,
die ihm mit Ehrfurcht begegnen.
So fern, wie der Osten vom Westen liegt,
so weit wirft Gott unsere Schuld von uns fort!**

**Wie ein Vater seine Kinder liebt,
so liebt der Herr alle, die ihn ehren.**

Psaln 103:1-4, 11-13

Prof. Dr. Leibundgut

Dr. Stefan Uhlenbrook

Ich bedanke mich von Herzen bei meinem Referenten für die Ermöglichung dieser Diplomarbeit und bei meinem Koreferenten für seine Betreuung und Hilfestellung bei der Bearbeitung dieser Aufgabe.

**Matthias Retter,
Gunter Adolf
Kerstin Wille
Dr. Paul Königer
Volker Abraham
Jürgen Strub**

Die Arbeit beruhte zu einem großen Teil auf der Auswertung von Daten, die ich nicht selber gesammelt habe. Ich bedanke mich bei und ihren Vorgängern für die Probenahme sowie bei und für die Analyse der Proben. und waren für mich eine große Hilfe bei computertechnischen Fragen.

Prof. Dr. Jim Kirchner

Johny Setiawan

Ich bedanke mich bei von der *University of California, Berkeley*, sowie bei meinem Zimmernachbarn für ihre unersetzliche Hilfe bei der Spektralanalyse. Ohne die beiden hätte es vermutlich diesen zweiten Teil der Arbeit zumindest nicht in dieser Form und Qualität gegeben.

**Prof. Dr. Jeff McDonnell
Kevin McGuire
Dr. Markus Weiler,**

Dr. Piotr Maloszewski

Dr. Heiko Müller

Ganz herzlicher Dank geht auch an die *Oregon State University* in Corvallis, an sowie an zwei Mitarbeiter seines Teams, und für ihre Gastfreundschaft und fachliche Hilfestellung während meines Besuches dort. Ich bin weiterhin zu Dank für die ausführliche und aufschlussreiche Diskussion zu Dank verpflichtet. danke ich für seine Hilfe bei der Programmierung eines Makros zur effektiveren Modellierung mithilfe von Fließmodellen.

**Angela Sieber
Axel Wellpott.**

Für das gute Miteinander und die große Hilfsbereitschaft bedanke ich mich bei meinen Kommilitonen und Kommilitoninnen. Speziell für das wertvolle Korrekturlesen danke ich und

**Anna E. Scissek
Erwin P. Scissek**

Arne und [REDACTED] Scissek,

Der Beitrag, den meine Eltern, und zu dieser Arbeit geleistet haben, ist für mich unermesslich! Danke für die vergangen 26 Jahre Eurer Fürsorge und Unterstützung! Ebenfalls danke ich meinen Brüdern die mir durch ihre computertechnischen Problemlösungen und die Bereitstellung von „Prozessorleistung“ bei der modellierungstechnischen Seite meiner Arbeit sehr geholfen haben.

**DAAD
Studienstiftung
des deutschen Volkes**

Weiterhin sei dem und der für Ihre Unterstützung gedankt.

Inhaltsverzeichnis

Verzeichnis der Abbildungen	V
Verzeichnis der Tabellen	IX
Verzeichnis der Abkürzungen und Symbole	X
Zusammenfassung	XII
Extended Summary	XIV
1 Einleitung	1
1.1 Bedeutung der Verweilzeiten	1
1.2 Stand der Forschung	2
1.3 Problemstellung	3
1.4 Zielsetzungen und Vorgehensweise	5
1.5 Arbeitsschritte und Aufbau der Diplomarbeit	6
2 Untersuchungsgebiet	7
2.1 Morphologie	7
2.2 Klima	9
2.3 Hydrogeologie	10
2.4 Böden, Vegetation und Landnutzung	12
2.5 Hydrologie	13
2.6 Fazit	15

3	Theoretischer Hintergrund und Methoden	16
3.1	Umweltisotope	16
3.1.1	Umweltisotope im Wasserkreislauf	16
3.1.2	Messung und Angabe des Isotopengehaltes	16
3.1.3	Isotopenfraktionierung	17
3.1.4	Isotopeneffekte bei der Niederschlagsbildung	18
3.1.5	Prozesse in den Speichern	19
3.1.6	Umweltisotope als natürliche Tracer in der Hydrologie	21
3.1.7	Verschiedene Ansätze zur Bestimmung der mittleren Verweilzeit	22
3.2	Modellierung natürlicher Tracer mithilfe von Fließmodellen	23
3.2.1	Modelltheorie	23
3.2.2	Auswahl des Fließmodell-Ansatzes	23
3.2.3	Modelle des Lumped-Parameter-Typus	24
3.2.4	Prozessorientierte Modellierung	32
3.2.5	Modellierung mithilfe von Fließmodellen	40
3.3	Modellierung natürlicher Tracer mithilfe von Spektralanalysen	43
3.3.1	Modelltheorie	43
3.3.2	Frequenz- und Leistungsdichtespektrum	43
3.3.3	Analyse der Leistungsdichtespektren zur Bestimmung von mittleren Verweilzeiten	46
3.3.4	Prozessorientierte Deutung der potenzgewichteten Verweilzeitverteilung	51
3.3.5	Datenanforderungen für die Spektralanalyse	53
3.3.6	Modellierung mithilfe von Spektralanalysen	54
3.4	Fazit	55
4	Eingangsdaten	57
4.1	Datenbeschaffung	57
4.2	Datenaufbereitung für die Modellierung mithilfe von Fließmodellen	58
4.2.1	Erstellung der Inputfunktion	58
4.2.2	Erstellung der Outputfunktion	68
4.3	Datenaufbereitung für die Modellierung mithilfe von Spektralanalysen	68
4.4	Fazit	71

5 Ergebnisse und Diskussion	73
5.1 Eingangsdaten	73
5.1.1 $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe des Niederschlags (Inputfunktion)	73
5.1.2 $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe des Abflusses (Outputfunktion)	77
5.2 Modellierung von mittleren Verweilzeiten mithilfe der Amplitudendämpfung	78
5.3 Voruntersuchungen zur Lumped-Parameter- Modellierung	79
5.3.1 Abgrenzung der Untersuchungszeiträume	79
5.3.2 Bedeutung der Gewichtung der Inputkonzentration	80
5.3.3 Fazit	81
5.4 Saisonale Infiltrationsparameter	82
5.4.1 Bestimmung der saisonalen Infiltrationsparameter über die Wasserbilanz	82
5.4.2 Bestimmung der saisonalen Infiltrationsparameter über den Stofftransport	83
5.4.3 Bestimmung der saisonalen Infiltrationsparameter über Kalibrierung	84
5.4.4 Modellierungsergebnisse mithilfe verschiedener Infiltrationsparameter	84
5.4.5 Fazit	87
5.5 Verwendung von Halbmonatsmitteln in der Outputfunktion	87
5.6 Höhere zeitliche Auflösung der Inputfunktion	88
5.7 Mittlere halbmonatliche Infiltrationskoeffizienten	89
5.8 Methoden zur Rückwärtsextrapolation der Inputfunktion	93
5.8.1 Zeitlich verkürzte Temperaturregression	93
5.8.2 Sinusfunktion	93
5.8.3 Darstellung des gesamten Inputs über eine Temperaturregression	93
5.9 Halbmonatlich variable Infiltrationskoeffizienten	94
5.9.1 Modellierung auf der Basis der Evapotranspirationsbedingungen	94
5.9.2 Modellierung auf der Basis des HBV-Modells mit Modifikation aufgrund der Evapotranspirationsbedingungen	97
5.9.3 Fazit	98
5.10 Modellierung verschiedener Teilsysteme des Bruggagebietes	99
5.10.1 Analyse der direktabflussfreien Komponenten am Pegel „Oberried“	99
5.10.2 Analyse der Abflusskomponenten an der Quelle „Zipfeldobel“	100
5.10.3 Fazit	102
5.11 Analyse von Schwachstellen in der Lumped-Parameter-Modellierung	102

5.11.1	Ableitung des $\delta^{18}\text{O}$ -Gebietsmittels für den Input	103
5.11.2	Anreicherungsverfahren in den Speichern	105
5.11.3	Wirkung des Schneespeichers	106
5.11.4	Fazit	110
5.12	Spektralanalyse	111
5.12.1	Spektralanalyse von Niederschlag und Abfluss	111
5.12.2	Modellierung der hydraulischen Übertragungsfunktion	112
5.12.3	Spektralanalyse der $\delta^{18}\text{O}$ -Konzentrationen	113
5.12.4	Interpretation der Analyseergebnisse	116
5.12.5	Fazit	118
6	Schlussfolgerungen und Ausblick	119
	Literaturverzeichnis	123
	Anhang	133

Verzeichnis der Abbildungen

Abb. 2.1	Topographie des Bruggaeinzugsgebietes (UHLENBROOK 1999, 8)	7
Abb. 2.2	Gewässernetz des Bruggagebietes sowie relevante Messstellen (verändert nach ROSER 2001)	8
Abb. 2.3	Mittlere Monatssummen des Niederschlages und des Abflusses im Bruggaeinzugsgebiet (aus unkorrigierten Daten der Messtation „St. Wilhelm“ von 1975 bis 1993)	9
Abb. 2.4	Jährliche mittlere korrigierte Niederschlagshöhen verschiedener Messstationen im Bruggaeinzugsgebiet und der Station "Freiburg"	10
Abb. 2.5	Abflussregime der Dreisam (1941-1996) und der Brugga (1934-1994) (WENNINGER 2002)	14
Abb. 3.1	Wasseräquivalent und mittlerer $\delta^{18}\text{O}$ -Wert der Schneedecke am Klimaturm „St. Wilhelm“. Daten aus HILDEBRAND (1996)	20
Abb. 3.2	Gewichtungsfunktionen des Exponential-Piston-Flow-Modells mit einer mittleren Verweilzeit von 30 Jahren und einem Aufteilungsparameter von 1,05 (schwarz Linie) bzw. 1,4 (graue Linie)	28
Abb. 3.3	Vergleich von Exponentialmodell (schwarze Linie) und Exponential-Piston-Flow-Modell mit einem Aufteilungsparameter von 1,4 (graue Linie).	29
Abb. 3.4	Gewichtungsfunktionen des Dispersionsmodells für eine mittlere Verweilzeit von 30 Jahren und einem Dispersionsparameter von 0,05 (schwarze Linie) bzw. 0,5 (graue Linie)	31
Abb. 3.5	Darstellung einer Funktion im Zeit-Raum: Überlagerung zweier Schwingungen	44
Abb. 3.6	Darstellung der Einzelschwingungen der in Abbildung 3.5 gezeigten Funktion im Frequenz-Raum	44
Abb. 3.7	Negative Amplitude als computertechnisches Artefakt	45
Abb. 3.8	Leistungsdichtespektrum	45
Abb. 3.9	Leistungsdichtespektren der Wasserflüsse und der Chlorid-Konzentrationen. KIRCHNER ET AL. (2000)	48
Abb. 3.10	Vergleich zwischen den Leistungsdichtespektren der Gamma-Funktion und denen des Exponential- bzw. des Dispersionsmodells. KIRCHNER ET AL. (2000)	49
Abb. 3.11	Vergleich der rücktransformierten Verweilzeitverteilungen. KIRCHNER ET AL. (2000)	50
Abb. 3.12	Flächenhafte Integration des Dispersionsmodells. KIRCHNER ET AL. (2001)	52
Abb. 3.13	Leistungsdichtespektren hochfrequenter Messungen im Vergleich zu Leistungsdichtespektren der Routinemessungen (FENG ET AL. 2002)	54
Abb. 4.1	$\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag als Funktion der mittleren bodennahen Lufttemperatur für das Bruggagebiet	59
Abb. 4.2	Vergleich der gemessenen mit der über Temperaturregression simulierten Zeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag	63
Abb. 4.3	Halbmonatssummen des Niederschlages der Station „St. Wilhelm“ als Funktion der Halbmonatssummen des Niederschlages der Station "Zastler"	65

Abb. 4.4	Tägliche mittlere bodennahe Lufttemperatur der Station „St. Wilhelm“ als Funktion der täglichen mittleren bodennahen Lufttemperatur der Station „Zastler“	67
Abb. 4.5	Empirische Meteoric Water Line für die Klimastation „St. Wilhelm“	69
Abb. 4.6	$\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag (als Eingangsdaten für die Spektralanalyse)	70
Abb. 4.7	$\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss (als Eingangsdaten für die Spektralanalyse)	70
Abb. 4.8	Niederschlags- und Abflussmengen als Eingangsdaten für die Spektralanalyse	71
Abb. 5.1	$\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages im Zeitraum 1971 bis 2002	73
Abb. 5.2	Zeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ - Halbmonatsmittel im Niederschlag im Bruggagebiet für den Zeitraum 1993-2002	75
Abb. 5.3	$\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss am Pegel „Oberried“ (OB) und an der Quelle „Zipfeldobel“ (ZI)	77
Abb. 5.4	$\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte und angepasste Sinusfunktion für den Zeitraum 1995-2002	79
Abb. 5.5	Modellierungsergebnis des Probedurchgangs (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 25 Monaten)	80
Abb. 5.6	Modellierungsergebnisse unter Verwendung der saisonalen Infiltrationsparameter 1 bzw. 0 (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 25 Monaten)	81
Abb. 5.7	Mittlere unkorrigierte monatliche Niederschlags- und Abflusssummen der Messstation „St. Wilhelm“ des Zeitraums 1975 bis 1993	82
Abb. 5.8	Modelleffizienz und mittlere Verweilzeit als Funktion des Infiltrationsparameters für den Gesamtzeitraum 07/1995 bis 06/2000	86
Abb. 5.9	Modelleffizienz und mittlere Verweilzeit als Funktion des Infiltrationsparameters für die Periode 10/1998 bis 06/2000	87
Abb. 5.10	Modellierungsergebnisse unter Verwendung des saisonalen Infiltrationsparameters in monatlicher bzw. halbmonatlicher Auflösung (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 25 Monaten)	89
Abb. 5.11	Verlauf der mit HBV modellierten Infiltrationskoeffizienten (nach UHLENBROOK 1999)	89
Abb. 5.12	Modellierungsergebnisse mithilfe des saisonalen Infiltrationsparameters bzw. mithilfe der mittleren halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 23 Monaten)	90
Abb. 5.13	Modellierungsergebnisse bei Rückwärtsextrapolation mithilfe der ursprünglichen bzw. der modifizierten Temperaturregression (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)	91
Abb. 5.14	Sensitivitätsanalyse: Modelleffizienzen für verschiedene Parameterkombinationen des Exponential-Piston-Flow-Modells für das Bruggagebiet	92
Abb. 5.15	Verlauf der potentiellen und der aktuellen Evapotranspiration im Bruggagebiet im Zeitraum Mai 1995 bis Juli 1999 sowie der mittleren potentiellen Evapotranspiration des Zeitraums 1970 bis 1990.	94

Abb. 5.16	Verlauf der potentiellen und der winterlichen mittleren aktuellen Evapotranspiration im Bruggagebiet sowie der mittleren potentiellen Evapotranspiration des Zeitraums 1970-1990	95
Abb. 5.17	Verlauf der mittleren halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten	96
Abb. 5.18	Modellierungsergebnisse unter Verwendung der aufgrund der HBV-Modellierung bzw. der Evapotranspirationsverhältnisse erstellten halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)	97
Abb. 5.19	Modellierungsergebnisse unter Verwendung der auf der Basis des HBV-Modells erstellten halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten, mit und ohne die Modifikation durch die Evapotranspirationsbedingungen (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)	98
Abb. 5.20	Klassifizierung der $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte am Pegel „Oberried“ bezüglich ihrer Beeinflussung durch direkte Abflusskomponenten	99
Abb. 5.21	Klassifizierung der $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte an der Quelle „Zipfeldobel“ bezüglich ihrer Beeinflussung durch direkte Abflusskomponenten	100
Abb. 5.22	Sensitivitätsanalyse: Modelleffizienzen für verschiedene Parameterkombinationen für die Quelle „Zipfeldobel“ unter Berücksichtigung aller Werte	101
Abb. 5.23	Sensitivitätsanalyse: Modelleffizienzen für verschiedene Parameterkombinationen für die Quelle „Zipfeldobel“ unter Berücksichtigung der nicht durch Direktabfluss beeinflussten Messwerte	101
Abb. 5.24	Modellierungsergebnisse der jeweils besten Parameterkombinationen für zwei Messwertreihen der Quelle „Zipfeldobel“	102
Abb. 5.25	Flächenanteile auf verschiedenen Höhenstufen unter Berücksichtigung der Abflussbildung	104
Abb. 5.26	Tageswerte des Niederschlages und des Abflusses im Bruggagebiet, Pegel „Oberried“ (UHLENBROOK ET AL. 1999)	107
Abb. 5.27	Tageswerte der mittleren Lufttemperatur im Bruggagebiet und des Abflusses am Pegel „Oberried“ (UHLENBROOK ET AL. 1999)	108
Abb. 5.28	Wasseräquivalent der Schneedecke an der Schneestechstelle beim Klimaturm St. Wilhelm (HILDEBRAND 1996)	108
Abb. 5.29	$\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag und in der Schneedecke am Klimaturm „St. Wilhelm“ sowie im Abfluss am Pegel „Oberried“ (HILDEBRAND 1996)	109

Abb. 5.30	Modellierungsergebnisse unter Verwendung der auf der Basis des HBV-Modells erstellten halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten, mit und ohne Berücksichtigung der Schneeschmelze (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)	110
Abb. 5.31	Leistungsdichtespektren der Wasserflüsse im Bruggagebiet	111
Abb. 5.32	Leistungsdichtespektrum der Übertragungsfunktion der Wasserflüsse im Bruggagebiet	112
Abb. 5.33	Leistungsdichtespektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages und des Abflusses im Bruggagebiet	113
Abb. 5.34	„Wavelet“-Spektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages und des Abflusses im Bruggagebiet	115

Verzeichnis der Tabellen

Tab. 2.1 Übersicht über wichtige Eigenschaften der Hauptabflusskomponenten im Bruggagebiet (nach UHLENBROOK 1999, 88)	12
Tab. 2.2 Gewässerkundliche Hauptzahlen von Dreisam (1941-1995) und Brugga (1934-1979) (UHLENBROOK 1999)	13
Tab. 3.1 Stabile Isotopen-Kombinationen des Wassers	16
Tab. 3.2 Zusammenfassung des Modellierungsvorgehens	42
Tab. 4.1 Niederschlags-Korrekturfaktoren für freie Gipfelstationen über 700 m NN	58
Tab. 4.2 Übersicht über die zur Verfügung stehenden GNIP-Stationen	60
Tab. 4.3 Ergebnisse der linearen Regression für die verschiedenen GNIP-Stationen	61
Tab. 4.4 Anpassungsgüte der verschiedenen Modell-Kombinationen	62
Tab. 4.5 Niederschlags-Korrekturfaktoren für mäßig geschützte Stationen unter 700 m NN	64
Tab. 4.6 Langjährige Monatsmittelwerte des Lufttemperaturhöhengradienten (UHLENBROOK 1999)	67
Tab. 5.1 Standardabweichungen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der Inputfunktion für verschiedene Zeitabschnitte	74
Tab. 5.2 Übersicht über die Modellierungszeiträume	80
Tab. 5.3 Zusammenfassung der besten Modellierungsergebnisse mit aufgrund der verschiedenen saisonalen Infiltrationsparameter gewichteten und monatlich aufgelösten Inputfunktionen	84
Tab. 5.4 Zusammenfassung der Verbesserungen der Modellgüte aufgrund verschiedener Modellierungsansätze	91
Tab. 5.5 Notwendige Korrekturen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zur Berücksichtigung der Flächen- und Niederschlagsverteilung	105

Verzeichnis der Abkürzungen und Symbole

A	[‰]	Gesamtamplitude einer regelmäßigen Schwingung
A_{in}	[‰]	Amplitude der angepassten Sinusfunktion der Inputfunktion
A_{out}	[‰]	Amplitude der angepassten Sinusfunktion der Outputfunktion
$C_{gew}(t)$	[‰]	Gewichtete Inputfunktion zum Zeitpunkt t
$C_{in}(t-t')$	[z.B. ‰]	Tracerkonzentration im Input zum Zeitpunkt $t-t'$
$C_{out}(t)$	[‰]	Tracerkonzentration im Output zum Zeitpunkt t
c	[‰]	Halbmonatsmittel der Messwerte der Isotopenkonzentration
c_i	[‰]	Ungewichteter Einzelmesswert der Isotopenkonzentration im Intervall i
$c_{i, ber}$	[‰]	Berechnete Konzentration im Intervall i
$\bar{c}_{in}$	[‰]	Gewichtete Inputkonzentration im Messintervall i
$\bar{c}_{out}$	[‰]	Gewichtete mittlere Outputkonzentration im Messintervall i
$\bar{c}_s$	[‰]	Mittlere sommerliche Outputkonzentration (Mai bis Okt)
$\bar{c}_w$	[‰]	Mittlere winterliche Outputkonzentration (Nov bis Apr)
D_L	[m ² s ⁻¹]	Longitudinaler Dispersionskoeffizient
$E(t)$	[-]	Altersverteilungsfunktion
$ETP_{Turc-Wendling}$	[mm d ⁻¹]	Potentielle Evapotranspiration nach TURC-WENDLING
f_k	[-]	Küstenfaktor, hat im Binnenland den Wert 1
$g(t')$	[-]	Verweilzeitverteilung (<i>residence time distribution</i>)
HHQ	[m ³ s ⁻¹]	Höchster Hochwasserabfluss
h	[m]	Höhenlage
M	[kg]	Masse des Tracers
MHq	[l s ⁻¹ km ⁻²]	Mittlere Hochwasserspende
MHQ	[m ³ s ⁻¹]	Mittlerer Hochwasserabfluss
MNq	[l s ⁻¹ km ⁻²]	Mittlere Niedrigwasserspende
MNQ	[m ³ s ⁻¹]	Mittlerer Niedrigwasserabfluss
Mq	[l s ⁻¹ km ⁻²]	Mittlere Abflussspende
MQ	[m ³ s ⁻¹]	Mittlerer Abfluss
n	[-]	Gesamtzahl der Messintervalle
N_i	[mm]	Niederschlagsmenge im Messintervall i
NNQ	[m ³ s ⁻¹]	Niedrigster Niedrigwasserabfluss
P_D	[-]	Dispersionsparameter
Pe	[-]	Peclet-Zahl
Q	[m ³ s ⁻¹]	Durchflussrate
R_{eff}	[-]	Modelleffizienz
R_G	[W m ⁻²]	Globalstrahlung
T	[°C]	(bodennahe) Lufttemperatur
t	[a]	Zeitpunkt der Probenahme
t'	[a]	Aufenthaltszeit, Laufparameter der Integration

t_w	[a]	Umsatzzeit des Wassers
t_t	[a]	Mittleres Alter des Tracers, mittlere Verweilzeit
v	[m s ⁻¹]	Fließgeschwindigkeit
V_i	[mm]	Aktuelle Verdunstung im Niederschlagsintervall
V_m	[m ³]	Volumen des mobil gespeicherten Wassers
$W(t-t')$	[-]	Gewichtungsfunktion
x	[m]	Fließstrecke
$\bar{x}$	[‰]	Mittelwert aller gemessener x_i
x_i	[‰]	Gemessener Wert, hier der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert im Abfluss
y_i	[‰]	Simulierter Wert, hier der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert im Abfluss
α	[-]	Formparameter, Infiltrationsparameter
α_i	[-]	Infiltrationskoeffizient im Messintervall i
α_s	[-]	Infiltrationskoeffizient für das Sommerhalbjahr (Mai bis Oktober)
α_w	[-]	Infiltrationskoeffizient für das Winterhalbjahr (November bis April)
β	[-]	Skalierungsparameter
δ	[-]	DIRAC'sche Deltafunktion
$\delta^{18}\text{O}$	[‰]	Abweichung des Isotopenverhältnisses $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ vom Standard
$\Gamma(\alpha)$	[-]	Wert der Gammafunktion von α
γ	[-]	Ortsparameter
η	[-]	Aufteilungsparameter
ω	[a ⁻¹]	Frequenz, Kehrwert der Periode

Zusammenfassung

Die mittlere Verweilzeit des Wassers im Einzugsgebiet ist ein zentraler Parameter zur Beschreibung von Aufenthaltsräumen und Abflussbildungsprozessen sowie zur Einschätzung des Einzugsgebietes bezüglich des internen Stofftransportes. Dabei kann die mittlere Verweilzeit nicht allein aus der Abflussganglinie ermittelt werden. Um auch die bei der Ganglinienanalyse nicht berücksichtigten immobilen Teile des Wasserkörpers zu erfassen, bedarf es eines sich mit dem Wasser bewegenden Tracers. In der vorliegenden Arbeit wurden im Rahmen des Bündelprojektes „Abflussbildung und Einzugsgebietsmodellierung“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) von 1995 bis 2002 reichende Zeitreihen der $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte im Niederschlag und im Abfluss verwendet, um daraus die mittlere Verweilzeit des Wassers im Bruggagebiet sowie in einem seiner Teilsysteme zu ermitteln.

Die einfachste verwendete Methode zur Berechnung der mittleren Verweilzeit aus den gesammelten Daten basiert auf einer exponentiellen Fließzeitverteilung und leitet die mittlere Verweilzeit aus der Amplitudendämpfung der $\delta^{18}\text{O}$ -Fluktuation im Abfluss gegenüber der Fluktuation im Niederschlag her. Als klassische Herangehensweise gilt die Lösung des sogenannten „inversen Problems“ mithilfe der Lumped-Parameter-Modelle (z.B. MALOSZWESKI & ZUBER 1982). Diese mathematisch-deterministischen Modelle beschreiben das Einzugsgebiet als homogene und eindimensionale Einheit und stellen eine mathematische Umsetzung bestimmter Hypothesen bezüglich der Randbedingungen und Fließzeitverteilungen im Einzugsgebiet dar.

Da die für das Modell charakteristischen Unsicherheiten durch direkte Fehlerfortpflanzungsrechnungen nur schwer zu quantifizieren sind, wurden die Lumped-Parameter-Modelle selber zur Unsicherheitsabschätzung verwendet, indem die Modellergebnisse verschiedener Modellierungsansätze untereinander verglichen wurden. Weiterhin wurde untersucht, in wieweit die Lumped-Parameter-Modelle in der Lage sind, das vorliegende räumliche Prozessverständnis in die Modellierung zu integrieren. Modell- und datentechnische Limitationen wurden aufgezeigt und Ansätze zur Verbesserung des Modells getestet.

Im Gegensatz zu dieser prozessorientierten Betrachtung steht die zunächst rein mathematisch-stochastische Auswertung der Ganglinien unter Verwendung der Spektralanalyse. Aus dem Vergleich der erstellten Leistungsdichtespektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen in Niederschlag und Abfluss schlossen KIRCHNER ET AL. (2000) auf die Dämpfung der Inputfunktion durch das System. Dieses Dämpfungsmuster konnte dann hinsichtlich einer Verweilzeitverteilung des Wassers gedeutet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde untersucht, in wieweit diese Methode auch im Bruggagebiet angewandt werden kann und welche neuen Erkenntnisse mit ihrer Hilfe gewonnen werden können.

Über eine Optimierung der Modelleffizienz für den Zeitraum 1995 bis 2000 wurden mithilfe verschiedenster Ansätze für das Einzugsgebiet der Brugga am Pegel „Oberried“ mittlere Verweilzeiten von 19 bis 30 Monaten ermittelt. Die beste Modellanpassung ergab sich für das Exponentialmodell mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten. Unter Verwendung der Methode der Amplitudendämpfung wurden im Zeit- bzw. Frequenz-Raum mittlere Verweilzeiten von 25 bzw. 22 Monaten ermittelt. In der Zusammenschau dieser Ergebnisse wird angenommen, dass die wahre mittlere Verweilzeit bei ca. 25 Monaten liegt. Für das am Quellaustritt „Zipfeldobel“ untersuchte Teilgebiet ergab sich die beste Modellanpassung für eine mittlere Verweilzeit von 39 Monaten. Für beide Systeme lag die aufgrund der verlängerten Zeitreihe bestimmte mittlere Verweilzeit in derselben Größenordnung wie die von UHLENBROOK (1999) für den Zeitraum 1995 bis 1998 bestimmten Werte.

Aus der Spannweite der plausiblen Modellergebnisse sowie aus der Betrachtung der Sensitivität der mittleren Verweilzeit als Modellparameter konnte ein Unsicherheitsbereich von ± 6

Monaten abgeleitet werden. Aufgrund der verlängerten Zeitreihe konnte die Bestimmung der mittleren Verweilzeit zwar auf eine breitere Basis gestellt, der Unsicherheitsbereich aber nicht verringert werden. Er führt, zusammen mit einigen praktischen Probleme bei der Modellierung, zu Einschränkungen in der Anwendbarkeit und der Aussagekraft des Modells. Für den Fall, dass dem System exponentiell verteilte Fließzeiten unterstellt werden können, sollte die Methode der Amplitudendämpfung als Alternative in Erwägung gezogen werden, da sie hierbei vergleichbar gute Ergebnisse bei geringerem Mess- und Rechenaufwand liefert.

Bei der Analyse der Schwachstellen der Lumped-Parameter-Modellierung wurden die Modellunsicherheiten auf (1) die Eingangsdaten, (2) die Gewichtungsprozedur zur Modellierung der Grundwasserneubildung sowie (3) die Fließzeitverteilung zurückgeführt. Bei der Erstellung des Gebietsmittels für die Inputfunktion stellt die korrekte Erfassung des festen Niederschlages eine besondere Herausforderung dar. Aus diesem Grund sollte im Rahmen zukünftiger Forschung durch Verknüpfung von Fernerkundungsmethoden und Vor-Ort-Messungen ein Verfahren entwickelt werden, mit dessen Hilfe die Schneeverteilung im Bruggagebiet bestimmt werden kann. Weiterhin konnte die Notwendigkeit der Einrichtung eines Schneelysimeters zur Bestimmung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der Schneeschmelze im Untersuchungsgebiet aufgezeigt werden.

Die Gewichtungsprozedur zur Modellierung der Grundwasserneubildung ist aufgrund ihrer sehr simplen Konzeption in zweifacher Weise beschränkt: Zum einen können die komplexen Wasserbewegungen im Boden sowie die isotopisch relevanten Wechselwirkungen mit der Atmosphäre nicht adäquat nachvollzogen werden. Zum anderen ist das Modell nicht in der Lage, Niederschlagswasser über das betrachtete Zeitintervall hinaus zu speichern. Als zukünftige Forschungsrichtung wird deshalb vorgeschlagen, durch die Kopplung dieses Modells mit einem prozessbasierten modularen Niederschlag-Abfluss-Modell prozessorientierte und ggf. auch räumlich differenzierte Daten in das Lumped-Parameter-Modell zu integrieren. Weiterhin sollte das Lumped-Parameter-Modell um Speicherglieder für den Schnee- und den Bodenspeicher erweitert werden.

Mithilfe der Spektralanalyse konnte zum ersten Mal eine Abschätzung der mittleren Laufzeiten der hydraulischen Impulse im Bruggagebiet vorgenommen werden. Diese betragen 20 Tage im Grundwasserkörper bzw. 8 Stunden im Gerinnespeicher. Es konnte gezeigt werden, dass die Dämpfung der hydraulischen Impulse einen fraktalen Prozess darstellt. Für die Variation der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte in Niederschlag und Abfluss konnte der fraktale Prozesscharakter nicht nachgewiesen werden. Aufgrund des fast konstanten Dämpfungsmusters war somit auch keine Ableitung der mittleren Verweilzeit des Wassers nach der von KIRCHNER ET AL. (2000) vorgeschlagenen Methode möglich.

In einem nächsten Schritt könnten die Ergebnisse der Spektralanalyse dazu genutzt werden, die bestehenden Hypothesen bezüglich der drei Hauptabflusskomponenten im Bruggagebiet (UHLENBROOK ET AL. 2002) zu überprüfen und ggf. zu modifizieren, indem aufgrund der Modellvorstellungen theoretische Leistungsdichtespektren berechnet, kombiniert und mit dem experimentellen Spektrum verglichen werden. Somit könnte eine Verringerung der dritten Modellunsicherheit, welche in der abgeschätzten Fließzeitverteilung des Wassers begründet ist, erreicht werden.

Stichworte: Lumped-Parameter-Modelle, Spektralanalyse, mittlere Verweilzeit, Sauerstoff-18, Modellunsicherheiten, prozessorientiert

Extended Summary

The mean residence time of water in a catchment is a central parameter for the description of flow paths and runoff formation as well as for the evaluation of a catchment regarding its internal solute transport. It is, however, impossible to determine the mean residence time from runoff time series alone. In order to also account for the immobile water fraction a tracer is needed which moves along with the water. The presented thesis was performed as part of the project "Runoff formation and catchment modeling", which is funded by the German Research Association (Deutsche Forschungsgemeinschaft, DFG). The research was aimed at deducing mean residence times for the Brugga catchment and one of its sub-systems from $\delta^{18}\text{O}$ time series in precipitation and runoff, which were collected between 1995 and 2002. Various methods of deduction and modeling approaches were tested in order to also evaluate model uncertainties.

The most basic method used for the computation of mean residence times from the collected data is based on an exponential residence time distribution and deduces the mean residence time from the amplitude dampening of the $\delta^{18}\text{O}$ fluctuation in runoff relative to its fluctuation in precipitation. The classic approach is considered to be the solution of the "inverse problem" by means of lumped-parameter-models (e.g. MALOSZWESKI & ZUBER 1982). These deterministic models describe the catchment as a homogeneous and one-dimensional unit and represent a mathematical realization of certain hypotheses regarding the boundary conditions and residence time distribution of the catchment.

Since it is difficult to determine the model uncertainties by calculating error propagation directly, lumped-parameter models themselves were used for these estimations by comparing model results from different modeling approaches. Furthermore, it was tested to which extent lumped-parameter models are capable of incorporating the available knowledge about spatial processes. Model and data limitations were presented and starting points for model improvements were tested.

In contrast to this process-oriented perspective, spectral analyses represent a procedure for the interpretation of time series, which in itself is purely mathematical and stochastic. From power spectra, which are created by means of Fourier transforms, the predominance of oscillations at different periods can be deduced. Comparing power spectra of $\delta^{18}\text{O}$ time series in precipitation and runoff KIRCHNER ET AL. (2000) inferred the dampening caused by the system. They interpreted the dampening pattern as reflection of the catchment's residence time distribution. It was explored to which extent this method could be used in the Brugga catchment and how it could contribute new insights.

Through the process of optimizing model efficiency for the period from 1995 to 2000 by means of different modeling approaches, mean residence times for the Brugga catchment (gauge "Oberried") ranged between 19 and 30 months. The best fit was accomplished for an exponential model with a mean residence time of 26.5 months. Using the method of amplitude dampening, mean residence times of 25 and 22 month were computed in the time and frequency domain respectively. In synthesis, the true mean residence time is estimated to be around 25 months. For the sub-system "„Zipfeldobel", the best model fit was found for a mean residence time of 39 months. For both systems, the mean residence times, which were deduced on the basis of the extended time series, were of the same magnitude as the values that UHLENBROOK (1999) determined for the time series from 1995 to 1998.

From both the range of plausible model results and a sensitivity analysis of the mean residence time as model parameter, an uncertainty interval of ± 6 months was deduced. Due to the extended time series, the determination of the mean residence time could be stood on a wider base than before. Nevertheless, the uncertainty range could not be decreased. Both the uncertainty range

as well as several practical problems that arose with the modeling constrict the applicability and the explanatory power of the model. In case of exponentially-distributed residence times the method of amplitude dampening should be considered as it gives comparatively good results at lower measuring and computational efforts.

In the process of exploring the weaknesses of lumped-parameter models its uncertainties were ascribed to (1) the input data, (2) the weighting procedure for the modeling of groundwater recharge, and (3) the residence time distribution. The correct recordation of solid precipitation proved to be a particular challenge. For this reason, future research should aim to develop a procedure, which could help in the estimation of the snow distribution in the catchment based on a combination of remote sensing and local measurements. Furthermore, the installation of at least one snow lysimeter for the measurement of snowmelt- $\delta^{18}\text{O}$ is recommended.

Due to its simple design, the weighting procedure for the modeling of groundwater recharge is subject to two-fold limitations. First, the complex water movements in the soil as well as the isotopically relevant interactions with the atmosphere cannot be adequately reproduced. Secondly, the lumped-parameter model is unable to store water beyond the current modeling interval. As a future research direction, it is suggested to combine this model with a process-based modular precipitation-runoff model in order to incorporate process-oriented and possibly spatially-distributed data into the lumped-parameter model. In addition, the model should be enhanced through an element that accounts for water storage in snow and soil.

With the aid of spectral analysis it was possible to estimate mean travel times of hydraulic impulses in the Brugga catchment for the first time. Their mean travel times in the aquifer and the channel are about 20 days and 8 hours respectively. It could be demonstrated that the dampening of the propagation of the hydraulic potentials represents a fractal process. For the $\delta^{18}\text{O}$ time series in precipitation and runoff fractal scaling could not be verified. The almost constant dampening pattern did not allow for a deduction of the mean residence time of the water itself according to the method proposed by KIRCHNER ET AL. (2000).

In a subsequent step, the results of the spectral analysis could be used to check and possibly modify the existing hypotheses regarding the three main runoff components in the Brugga catchment (UHLENBROOK ET AL. 2002). The conceptions regarding these runoff components could be transferred to theoretical power spectra, which could then be combined and compared to the experimental spectrum. This could lead to a reduction of the third source of model uncertainties, which is founded in the estimation of the residence time distribution.

Key words: lumped-parameter models, spectral analysis, mean residence time, oxygen-18, model uncertainties, process-oriented

1 Einleitung

1.1 Bedeutung der Verweilzeiten

Fundamentales Interesse der Hydrologie ist es, den natürlichen Wasserkreislauf und die Eigenschaften und Prozesse der verschiedenen hydrologischen Systeme zu verstehen. Dabei kommt der Systemeinheit des Einzugsgebietes große Bedeutung zu. Hier bietet besonders die Mesoskala die Möglichkeit, die Abflussbildung zu erforschen, um die relevanten hydrologischen Prozesse verstehen und simulieren zu können.

Über eine grundsätzliche Neugier der Naturwissenschaft hinausgehend ist das Wissen über die hydrologischen Vorgänge von grundlegender Bedeutung: So bildet dieses Prozessverständnis die Basis für den Schutz und die Zukunftssicherung des Menschen durch nachhaltige und verantwortungsvolle Nutzung und Regulierung der Ressource Wasser.

Ein zentraler Parameter in der Beschreibung eines hydrologischen Systems ist die mittlere Verweilzeit. Das Wissen über die Aufenthaltsdauer von Wasser in einem Einzugsgebiet erlaubt einerseits Rückschlüsse auf die Aufenthaltsräume des Wassers sowie auf die dominierenden Abflussbildungsprozesse (MALOSZEWSKI & ZUBER 1982). Andererseits bietet eine solche Betrachtung den Ansatz für ein nachhaltiges Ressourcenmanagement. Dazu ist es wichtig, ein Einzugsgebiet hinsichtlich seines Verhaltens in Bezug auf Katastrophen bzw. langfristige Schadstoffeinträge zu beurteilen (SOULSBY ET AL. 1999). Als Beispiele seien hier Chemieunfälle, der Eintrag sauren Regens bzw. die Anlage eines Endlagers von Abfällen genannt. In der langfristigen Planung kann es z.B. von Interesse sein, Vorhersagen zu treffen, in welchen zeitlichen Größenordnungen sich Landnutzungsänderungen bemerkbar machen oder innerhalb welchen Zeitrahmens die angestrebte Rehabilitation eines Einzugsgebietes zu erwarten ist.

Neben der *mittleren* Verweilzeit ist die *Verweilzeitverteilung* von Bedeutung, die sich aus der Heterogenität der Fließwege und der Interaktion von mobilem und immobilem Wasser ergibt. Mit verbesserter Kenntnis über diese Verteilung kann eine genauere Beurteilung des Stofftransportes und der Rückhaltdauer von eingebrachten Schadstoffen vorgenommen werden (KIRCHNER ET AL. 2000).

MARGRITA ET AL. (1984) und BERGMANN ET AL. (1986, zit. in VITVAR 1998, 4) zeigten, dass die mittlere Verweilzeit nicht allein aus der Analyse einer Abflussganglinie ermittelt werden kann, da diese keine Aussage über die Altersstruktur des Wassers enthält. Solche Rezessionsanalysen lassen allein auf das Abflussverhalten des Wassers in den mobilen Bereichen des Aquifers, z.B. in Klüften, schließen, während das in Gesteinsmatrix und Mikroklüften gespeicherte Wasser nicht erfasst wird (MALOSZEWSKI & ZUBER 1985).

Da ein Teil des Wasserkreislaufs in unseren Breiten lange Zeit unterirdisch verläuft und damit nicht direkt zu verfolgen ist, bietet sich die Methode der Wassermarkierung durch Tracer an. Durch den Mechanismus des diffusiven Austausches zwischen mobiler und mobiler Phase werden durch diesen Ansatz auch die immobilen Bereiche erfasst, so dass eine Aussage über den Gesamt-Wasserkörper möglich wird.

Für die Betrachtung der Wasserflüsse auf Einzugsgebietsebene erwiesen sich u.a. die stabilen Umweltisotope Sauerstoff-18 und Deuterium als vorteilhaft. Als natürliche Tracer werden sie mit dem Niederschlag als Bestandteile der Wassermoleküle flächenhaft eingetragen. Aufgrund von verschiedenen Fraktionierungsprozessen zeichnet sich die Isotopenkonzentration der Niederschläge durch einen zeitlich und räumlich variablen „Fingerabdruck“ aus (MOSER & RAUERT 1980). Die Isotopenkonzentrationen im Niederschlag und im Abfluss aus dem Gebiet können gemessen und unter Verwendung geeigneter Übertragungs- und Gewichtungsfunktionen zu einer Input- bzw. Outputfunktion zusammengestellt werden.

1.2 Stand der Forschung

Die klassische und seit mehreren Jahrzehnten angewandte Herangehensweise an die Ableitung der mittleren Verweilzeit aus den gesammelten Daten ist die Lösung des sogenannten „inversen Problems“ mithilfe der Lumped-Parameter-Modelle (z.B. MALOSZEWSKI & ZUBER 1982). Diese mathematisch-deterministischen Modelle beschreiben das Einzugsgebiet als homogene und eindimensionale Einheit und beruhen auf der mathematischen Umsetzung bestimmter Hypothesen bezüglich der Randbedingungen und Fließzeitverteilungen im Einzugsgebiet. Die Auswahl eines Fließmodells trifft der Modellierer entweder im vorhinein aufgrund der Gebietskenntnis oder im nachhinein durch den Vergleich der Güte der Modellergebnisse untereinander.

Durch die Kalibrierung des Modells wird angestrebt, die Inputfunktion möglichst optimal in die Outputfunktion zu überführen, wobei die mittlere Verweilzeit (und ggf. noch ein anderer oder mehrere andere Parameter) als Anpassungsgrößen verwendet werden. So wird durch diesen „Rückwärtsschritt“ die mittlere Verweilzeit bestimmt. Dieser Ansatz wird seit mehreren Dekaden weitgehend unverändert angewandt. Obwohl es im Bereich der Prozessforschung und Modellierung das Bestreben gibt, die natürliche Heterogenität des Systems detaillierter zu modellieren, limitiert die unzureichende Datenlage meist eine höhere räumliche und zeitliche Auflösung.

Diese Einschränkung gilt auch für das im südlichen Schwarzwald gelegene Bruggagebiet, auch wenn es seit mehreren Jahren Studienobjekt zur intensiven Erforschung von Abflussprozessen ist. Aufbauend auf den Arbeiten von LINDENLAUB ET AL. (1997) und LINDENLAUB hat UHLENBROOK (1999, 80) mithilfe von Lumped-Parameter-Modellen drei langfristige Abflusskomponenten im Bruggagebiet differenziert und deren Bildungsräume beschrieben.

- Direktabfluss wird auf Sättigungsflächen, versiegelten Flächen und Blockschutthalden gebildet und zeichnet sich durch eine hohe Abflussdynamik und eine mittlere Verweilzeit von Stunden bis Tagen aus. Es trägt langfristig mit ca. 11 % zum Gesamtabfluss bei.
- Das indirekte Fließsystem-1 bezeichnet die Kluft-Grundwasserspeicher und die tiefere Zirkulation der Verwitterungsdecken der Hochlagen. Für einige als repräsentativ eingestufte Quellen wurde anhand von Tritium-Zeitreihen mit dem Dispersionsmodell ($P_D=0,086$) eine mittlere Verweilzeit von 7,6 Jahren berechnet. 20 % des langjährigen Abflusses wurden als aus diesem Fließsystem-1 kommend modelliert.
- Das im Vergleich dazu dynamischere Fließsystem-2 kann den Grundwasserkörpern der Hangschuttdecken und der periglazialen Deckschichten zugeordnet werden. Das Fließverhalten konnte mit Sauerstoff-18-Zeitreihen am besten durch ein Exponential-Piston-Flow-Modell ($\eta=1,04$) beschrieben werden. Damit ergab sich eine mittlere Verweilzeit von 32 Monaten und ein langfristiger Anteil am Gesamtabfluss von 69 %.

Aufgrund der Dominanz des Fließsystems-2 wurde auch für den Gebietsauslass die beste Anpassung mithilfe des Exponentialmodells gefunden. UHLENBROOK (1999, 80ff) modellierte das Gesamtsystem mit einer mittleren Verweilzeit von 24 Monaten. Zur Berücksichtigung des älteren Fließsystems der Hochlagen wurde eine weitere Komponente hinzugefügt. Diese trägt in dem Modell mit 15-20 % zum Gesamtabfluss bei und hat einen konstanten $\delta^{18}\text{O}$ -Wert von $-10,5\text{‰}$.

Da es im Einzugsgebiet zu einer Überlagerung verschiedener Abflussbildungsprozesse kommt, muss die Vereinfachung des Systems als ein- oder zweiparametrische Verteilungsfunktion in den meisten Fällen als nicht ausreichend angesehen werden. UHLENBROOK (1999, 80) kam in seiner Dissertation zu dem Ergebnis, dass die Modellierung des Abflusses am Gebietsauslass durch ein

Modell immer schlechter war als die Modellierung der von ihm untersuchten Quellen. Dies begründete er dadurch, dass es am Gebietsauslass zu einer Überlagerung von verschiedenen Fließsystemen kommt, die mit einem einzigen Modell nicht adäquat erfasst werden können. Eine Berechnung der mittleren Verweilzeiten für die indirekten Fließsysteme, bei der die vermutlich durch Direktabfluss modifizierten Messwerte von der Berechnung ausgenommen waren, führte zu einer Verbesserung der Modellgüte.

Um der beobachteten Überlagerung von Abflussbildungsprozessen Rechnung zu tragen, führten MALOSZEWSKI ET AL. (1983) sowie HERRMANN ET AL. (1986, 1989) im Lainbachtal (Alpen) bzw. im Einzugsgebiet der Langen Bramke (Oberharz) parallele Modellierungen verschiedener Speicher- und Fließsysteme durch. UHLENBROOK (1999, 81) beurteilte die Datenlage im Bruggagebiet für diesen Ansatz als ebenfalls ausreichend und grenzte, basierend auf bestimmten Voruntersuchungen und mithilfe einer Linearkombination von Lumped-Parameter-Modellen, die oben genannten verschiedenen Fließsysteme voneinander ab.

Im Gegensatz zu dieser prozessorientierten Betrachtung steht die zunächst rein mathematisch-stochastische Auswertung der Ganglinien mithilfe der Spektralanalyse, wie sie von KIRCHNER ET AL. (2000) vorgeschlagen wurde. Hierbei werden die Fluktuationen hydrochemischer Tracer in Niederschlag und Abfluss jeweils als Überlagerungen von Schwingungen aufgefasst. In einer im küstennahen walisischen Hafren-Quellgebiet durchgeführten Studie überführten sie unter Verwendung der Fourier-Transformation Zeitreihen der Chloridkonzentrationen im Niederschlag und im Abfluss in ein sogenanntes Leistungsdichtespektrum. Aus diesem ist ersichtlich, wie dominant die einzelnen Schwingungen verschiedener Wellenlängen sind. Aus dem Vergleich der erstellten Leistungsdichtespektren von Input und Output konnte auf die Dämpfung der Inputfunktion durch das System geschlossen werden.

KIRCHNER ET AL. (2000) zeigten, dass mit zunehmender Frequenz der hydrochemischen Signale diese immer stärker gedämpft werden und schrieben dieses Phänomen der Fließzeitverteilung im Einzugsgebiet zu. Sie passten eine zweiparametrische Gammaverteilung an das gemessene Leistungsdichtespektrum des Outputs an und kamen zu dem Schluss, dass die Verweilzeiten in ihrem Untersuchungsgebiet potenzverteilt sind. Somit reagiert das Einzugsgebiet einerseits sehr rasch und heftig auf einen hydrochemischen Impuls, während es andererseits auch ein anhaltendes Rückhaltevermögen besitzt, das sich durch ein langes „Tailing“ auszeichnet. Nach der Einschätzung von KIRCHNER ET AL. (2000) sind die klassischen Fließmodelle nicht in der Lage, dieses charakteristische Verhalten adäquat zu beschreiben. In einem zweiten Schritt leiteten KIRCHNER ET AL. (2001) eine prozesstechnische Deutung der Potenzverteilung her, indem sie die bekannte Dispersionsgleichung nach KREFT & ZUBER (1978) flächenhaft integrierten.

1.3 Problemstellung

Im Rahmen des Bündelprojektes „Abflussbildung und Einzugsgebietsmodellierung“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) wurde im Jahr 1995 das im südlichen Schwarzwald gelegene, mesoskalige Brugga-Einzugsgebiet für eine noch andauernde Messkampagne ausgewählt. In diesem Rahmen wurden Niederschläge sowie der Abfluss am Gebietsauslass und an einigen Quellen regelmäßig beprobt. Während die Daten von Juli 1995 bis Juli 1998 von UHLENBROOK (1999) mithilfe des Lumped-Parameter-Ansatzes auf Monatsbasis ausgewertet wurden, fehlt bislang eine Auswertung der gesamten, nunmehr sechsjährigen Zeitreihe bis Februar 2002.

Neben der erneuten Berechnung der mittleren Verweilzeiten aufgrund des vergrößerten Datensatzes befasst sich diese Arbeit intensiver mit den sich aus der Modellstruktur und den

Randbedingungen ergebenden Unsicherheiten des Lumped-Parameter-Modells. Im folgenden werden einige Fehlerquellen, die sich einerseits aus den Methoden zur Ableitung der Eingangsdaten und andererseits aus der Modellstruktur der Lumped-Parameter-Modelle ergeben, dargestellt.

Aufgrund der räumlichen Variabilität der Grundwasserneubildung und der Isotopenkonzentration des perkolierenden Bodenwassers ist eine flächenkonzentrierte Ableitung der Inputfunktion grundsätzlich schwierig. Unsicherheiten ergeben sich bei der Übertragung der gebietsinternen Punktinformationen von Niederschlagshöhe und Isotopenkonzentration auf die Gesamtfläche bzw. bei der räumlichen Übertragung von Messwerten, die von gebietsfremden Stationen stammen. Die zur Interpolation verwendeten Höhengradienten der Niederschlagshöhe und der Isotopenkonzentration sind zeitlich nicht konstant.

Bei der Simulation des tatsächlichen Übergangs des gefallen Niederschlages ins Grundwasser tritt eine weitere modelltechnische Schwachstelle auf, da es schwierig ist, die räumlich und zeitlich komplex differenzierten Speicher- und Anreicherungsprozesse im Schnee- und Bodenspeicher in einem flächenkonzentrierten zeitlich invarianten Modell nachzubilden. Die einfachen Lumped-Parameter-Modelle enthalten ein bis zwei Parameter, die durch Kalibrierung ermittelt werden und ebenfalls als zeitlich und räumlich konstant angesehen werden. Es muss allerdings davon ausgegangen werden, dass die Antwortfunktion eines hydrologischen Systems zeitvariant ist (BARNES & TURNER 1998, 743) und dass es sowohl in der ungesättigten als auch in der gesättigten Zone ein hohes Maß an Heterogenität gibt (ROHDE ET AL. 1996).

Die Simulation der Grundwasserneubildung aus dem Niederschlag wird im allgemeinen mit der Niederschlagshöhe und dem Infiltrationskoeffizienten α vorgenommen. Der Infiltrationskoeffizient bezeichnet den Anteil des Niederschlages, der nach Infiltration als Grundwasserneubildung wirksam wird. In vielen Arbeiten ist der Infiltrationskoeffizient als 1 angenommen (z.B. MALOSZEWSKI ET AL. 1983) oder die Grundwasserneubildungsprozesse sind durch einen saisonalen Infiltrationsparameter beschrieben worden. Letzterer charakterisiert das saisonal als konstant angenommene Verhältnis zwischen sommerlichem und winterlichem Beitrag zur Grundwasserneubildung und wurde teilweise geschätzt oder mitkalibriert (z.B. HERRMANN ET AL. 1984). Eine unabhängige Quantifizierung des zeitlichen Verlaufs des Infiltrationskoeffizienten ist über Messungen im Gelände (z.B. VITVAR 1998) oder durch Anwendung von modularen hydrologischen Modellen möglich (UHLENBROOK 1999, 68). Allgemein ist über die mit dem Infiltrationskoeffizienten verknüpfte Modellunsicherheit noch wenig bekannt. Detailliertere Erläuterungen zum Infiltrationskoeffizienten sind im Abschnitt 3.2.4 zu finden.

Der zweite Teilbereich der Unsicherheiten ist in der Modellstruktur selber begründet. Die Lumped-Parameter-Modelle stellen eine mathematische Umsetzung verschiedener idealisierter Hypothesen zur Verweilzeitverteilung des Wassers und der entsprechenden Randbedingungen dar. Sie setzen voraus, dass ein konservativer Tracer unter ständigem Fließen ins System hinein und aus dem System heraus transportiert wird und dass es keine Bereiche gibt, in denen die Wasserbewegung stagniert. Die ersten beiden Annahmen sind für die stabilen Umweltisotope des Wasserstoffs und des Sauerstoffs erfüllt. Eine Stagnation von Wasserbewegungen lässt sich in den allermeisten Fällen allerdings nicht ausschließen. Mögliche Bereiche, in denen Stagnation der Fließbewegung auftritt, sind die ungesättigte Bodenzone sowie die Gesteinsmatrix eines Aquifers.

Durch die flächenkonzentrierte Betrachtung des Inputs und die zeitlich und räumlich invariante Systemstruktur mit ihren idealisierten Randbedingungen ergibt sich eine starke Vereinfachung der komplexen natürlichen Prozesse. Angesichts dieser Vereinfachungen stellt sich die Frage, ob die dominanten Fließprozesse auf diese Weise adäquat beurteilt und erforscht werden können. Wie bei allen Modellen muss hier eine Balance zwischen zwei unerwünschten Extremen gefunden werden: Bei einer zu starken Vereinfachung des komplexen Systems kann keine Information gewonnen werden, da die einzelnen dominanten Faktoren, Prozesse und Eigenschaften des Systems nicht

erfasst und dargestellt werden können. Andererseits führt eine zu große Anzahl von Freiheitsgraden zum sogenannten *Overfitting*, wodurch die Aussagekraft des Gesamtmodells durch seine vieldeutige Lösbarkeit bis auf null sinken kann. Im Hinblick auf die Anwendbarkeit eines Modells müssen zudem Datenerfordernisse und Rechenaufwand dem zu erwartenden Nutzen angemessen sein.

Aus diesem Grund sollen die Lumped-Parameter-Modelle in dieser Arbeit so verwendet werden, dass durch die Modellierungsergebnisse indirekt eine Aussage über die mit ihnen verbundenen Unsicherheiten gemacht werden kann. Es soll aufgezeigt werden, welche Spannweite an Modellergebnissen mit verschiedenen vom Ansatz her plausiblen Modellen erreicht werden kann. Dabei sollen die Länge der Zeitreihe, der Modellierungszeitschritt, der Ansatz zur Bestimmung des Infiltrationskoeffizienten sowie die Ableitungsprozeduren der Input- und Outputfunktion variiert werden.

Einen innovativen Ansatz zur Ableitung mittlerer Verweilzeiten aus den Zeitreihen hydrochemischer Tracer brachten KIRCHNER ET AL. (2000) mithilfe von Spektralanalysen in die Forschung ein. Diese Herangehensweise steht in Kontrast zu den ansonsten gängigen und bislang im Bruggagebiet angewendeten prozessorientierten und deterministischen Modellierungsmethoden. Auch diesem grundlegend neuen Ansatz stellt sich diese Arbeit. Es soll getestet werden, ob die vorhandenen Daten ausreichen, um den neuen Ansatz auf das Bruggagebiet zu übertragen und welcher Wissensgewinn über die Fließsysteme dadurch erzielt werden kann.

1.4 Zielsetzungen und Vorgehensweise

Aus den beschriebenen Problemstellungen ergeben sich für diese Diplomarbeit folgende Fragestellungen:

1. Welche mittleren Verweilzeiten können für das Einzugsgebiet der Brugga und das Teilsystem „Zipfeldobel“ aufgrund der neuen verlängerten Messreihe ermittelt werden?

Dazu sollen verschiedene Lumped-Parameter-Modelle getestet und Modellergebnisse und Anpassungsgüte untereinander und mit früheren Ergebnissen (UHLENBROOK 1999) verglichen werden.

2. Welche Modellunsicherheiten lassen sich aus der Brugga-Messreihe von 1995 bis 2002 für die Lumped-Parameter-Modelle ableiten?

Insbesondere soll untersucht werden, welchen Einfluss die Länge des Datensatzes, der Modellierungszeitschritt, die Bestimmungsmethode des Infiltrationskoeffizienten sowie die Ableitungsprozeduren der Eingangsdaten auf das Modellergebnis und die Anpassungsgüte haben.

3. In wieweit sind die Lumped-Parameter-Modelle in der Lage, das räumliche Prozessverständnis modelltechnisch umzusetzen?

Nach einer Untersuchung der Schwachstellen des Modellierungsansatzes soll getestet werden, in wieweit dieser simple Ansatz durch die gewonnenen Erkenntnisse und die Berücksichtigung des räumlichen Prozessverständnisses verbessert werden kann.

4. *Wie lassen sich die Modellansätze von KIRCHNER ET AL. (2000) bezüglich der Analyse der wellenlängenabhängigen Dämpfung der Chloridzeitreihen des Niederschlages auf das Bruggagebiet übertragen?*

Neben regionalen und tracerhydrologischen Unterschieden zwischen dem Hafren- und dem Bruggagebiet gilt es, die geringere zeitliche Auflösung der Messungen im Bruggagebiet zu berücksichtigen. Die so gewonnenen Ergebnisse sollen auch für die Beurteilung der Lumped-Parameter-Modelle (Frage 2) verwendet werden.

1.5 Arbeitsschritte und Aufbau der Diplomarbeit

Die Diplomarbeit ist entsprechend der durchgeführten Arbeitsschritte gegliedert. Da die Gebietskenntnis als Grundlage für Entscheidungen in der Modellierung und der Bewertung der Ergebnisse unentbehrlich ist, folgt dieser Einleitung eine Beschreibung des Untersuchungsgebietes (Kapitel 2).

Das darauffolgende Kapitel 3 ist der Betrachtung des theoretischen Hintergrundes gewidmet. Dabei befasst sich der erste Abschnitt mit dem Umweltisotop Sauerstoff-18 (^{18}O) allgemein, während das Augenmerk in den beiden folgenden Abschnitten auf der Modellierung unter Verwendung von Fließmodellen bzw. der Spektralanalyse liegt. Neben grundlegender Modelltheorie wird auch die konkrete in dieser Arbeit angewandte Methodik erläutert. In jeweils eigenen Abschnitten werden die für die Modellierung relevanten Prozesse sowie die Methode zur Korrektur der Niederschlagsmenge in Hinblick auf eine prozessorientierte Simulation der Grundwasserneubildung mithilfe des Infiltrationskoeffizienten diskutiert.

Das vierte Kapitel beschreibt die Beschaffung und Aufbereitung der Eingangsdaten. Die detaillierten Ausführungen sollen die Transparenz dieser Arbeit fördern und verdeutlichen, welche praktischen Probleme im Zuge der Zusammenstellung der Eingangsdaten angegangen wurden. Es wurde weiterhin beabsichtigt, im einzelnen zu zeigen, welche Vereinfachungen, Extrapolationen und Übertragungen vorgenommen werden mussten, um aus den vorhandenen Daten die benötigten Zeitreihen zusammenzustellen.

Schließlich werden die Ergebnisse zu den eingangs gestellten Fragen in Kapitel 5 präsentiert und diskutiert. Da diese Arbeit zum Ziel hat, die Methodik selber zu untersuchen, sollte die weitere Vorgehensweise der Untersuchung jeweils mit den zuvor erzielten Ergebnissen abgestimmt werden. Aus diesem Grund wechseln sich Ergebnis- und Diskussionsteil in diesem Kapitel ab.

Das sechste Kapitel rundet die vorliegende Arbeit mit den Schlussfolgerungen und einem Ausblick ab.

2 Untersuchungsgebiet

Im folgenden soll im Rahmen eines Überblicks das Bruggagebiet charakterisiert werden. Eine detailliertere Beschreibung der Gebietseigenschaften ist in der Arbeit von UHLENBROOK (1999, 8ff) zu finden. Diese Zusammenfassung folgt in weiten Teilen und soweit nicht anders gekennzeichnet seiner Literaturstudie.

2.1 Morphologie

Das Bruggagebiet liegt etwa 10 km südöstlich von Freiburg im Südschwarzwald und erstreckt sich vom Gipfel des Feldbergs als höchstem Punkt (1493 m NN) bis zum Gebietsauslass am Pegel Oberried (434 m NN). Die mittlere Gebietshöhe beträgt 986 m. Das Untersuchungsgebiet bedeckt eine Fläche von 39,9 km² und ist damit der oberen Mesoskala zuzuordnen. Die Topographie bzw. das Gewässernetz sowie relevante Messstellen des Bruggagebietes sind in den Abbildungen 2.1 bzw. 2.2 dargestellt.

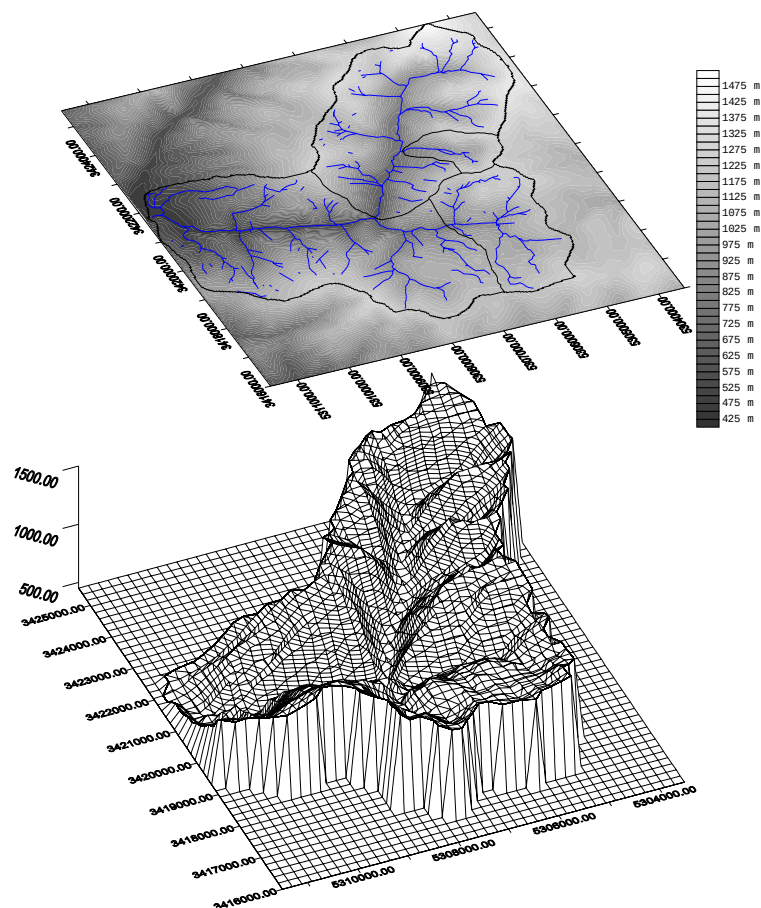


Abb. 2.1 Topographie des Bruggaeinzugsgebietes (UHLENBROOK 1999, 8)



Abb. 2.2 Gewässernetz des Brugggebietes sowie relevante Messstellen (verändert nach ROSER 2001)

Das Einzugsgebiet ist morphologisch geprägt durch die exogenen Kräfte Eis und Wasser. Während des Pleistozäns kam es zur glazialen bzw. periglazialen Formenbildung. Beispiele hierfür sind das Katzensteigkar und das Trogtal des St. Wilhelmer Talbaches bzw. die an Hängen weit verbreiteten Solifluktionsschutte. Daneben findet sich im Untersuchungsgebiet aufgrund der hohen oberirdischen Abflussmenge und der großen Reliefenergie ebenfalls ein prägnanter fluvialer Formenschatz, der sich z.B. in den erodierten Kerbtälern und Bacheinschnitten (Dobel) ausdrückt.

Drei Viertel des Einzugsgebietes lassen sich morphologisch als Hangbereich mit mittlerem bis starkem Gefälle (z.T. bis 50 %) charakterisieren. Weiterhin wird ein Flächenanteil von 20 % durch kuppige Hochlagen mit nur geringem Gefälle geprägt. 5 % des Einzugsgebietes besteht aus schwach entwickelten ebenen Talböden. Das mittlere Gefälle im Einzugsgebiet beträgt 19,5 % (WENNINGER 2002).

2.2 Klima

Der Schwarzwald liegt im Bereich der gemäßigten Übergangsklimate, die sich durch eine Interaktion subtropischer Warmluft und polarer Kaltluft auszeichnen. Im Wechsel kommt die Region dadurch unter den Einfluss von maritim-atlantischen und kontinental geprägten Luftmassen, die das Wettergeschehen bestimmen. Aufgrund der zyklonalen Westwinddrift wird die Niederschlagsverteilung deshalb hauptsächlich durch frontale Niederschläge bestimmt. Diese werden allerdings orographisch modifiziert und durch (vorwiegend sommerliche) konvektive Niederschlagsereignisse ergänzt.

Das mittlere jährliche Niederschlagsangebot zeigt einen bimodalen Verlauf. Das primäre Maximum der monatlichen Niederschlagssummen liegt in den niederen Lagen in den Sommermonaten, während ein sekundäres Maximum im Zeitraum November bis Februar auftritt. Nach Untersuchungen von WEISCHET (1979, zit. in UHLENBROOK 1999, 10) verringert sich der Anteil der Sommerniederschläge zugunsten eines Wintermaximums mit zunehmender Höhe. Für die auf 780 m NN liegende Station „St. Wilhelm“ übertrifft das winterliche Maximum das des Sommers, wie Abbildung 2.3 zeigt.

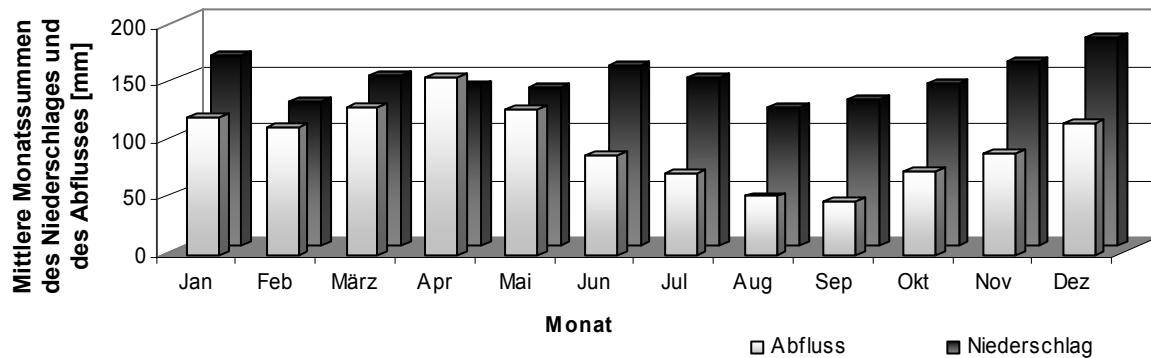


Abb. 2.3 Mittlere Monatssummen des Niederschlages und des Abflusses im Bruggaeinzugsgebiet (aus unkorrigierten Daten der Messtation „St. Wilhelm“ von 1975 bis 1993)

Die jährliche räumliche Variabilität des Niederschlages (unkorrigierte Messdaten der Periode 1931-60) reicht von 944 mm an der Station "Freiburg-Ebnet" (308 m NN), welche außerhalb des Brugga-Einzugsgebietes liegt, bis zu 1791 mm an der Station "Hofsgrund" (1030 m NN im Lee des Schauinsland). Der mittlere korrigierte Gebietsniederschlag wird auf 1750 mm geschätzt, wobei der Schneeanteil zwischen einem und zwei Dritteln, je nach Höhenlage und Exposition, variiert. Oberhalb von 900 m NN findet sich an 85 bis 95 Tagen im Jahr eine Schneedecke von mindestens 20 cm. (PARLOW & ROSNER 1992, zit. in UHLENBROOK 1999, 10). Die Bedeutung des Schneespeichers ist z.B. daraus abzulesen, dass, wie in Abbildung 2.3 ersichtlich, durch das Abschmelzen der Schneedecke im April die mittlere monatliche Abflusssumme die des Niederschlages übersteigt. Im Mittel steigt die jährliche Niederschlagssumme um 66,5 mm pro 100 m Höhenzunahme. Dieser Gradient ist in den Wintermonaten aufgrund des Vorherrschens zyklonalen Niederschlagsbildung ausgeprägter als im Sommerhalbjahr, wo er durch konvektive Niederschlagsereignisse abgeschwächt wird. Durch ausgeprägte Staueffekte an Hängen wird der Höhengradient der Niederschläge bei entsprechenden Westwind-Wetterlagen lokal erhöht.

Des weiteren zeigt sich ein eindrucksvoller Luv-Lee-Effekt: Während die Messtation "Schauinsland" (1218 m NN) 1585 mm Jahresniederschlag erhält, werden in der Station "Hofsgrund" (1030 m NN), die im Lee des Schauinslands liegt, 1791 mm gemessen. Der Grund für diesen Effekt

ist die Verdriftung des Niederschlages in die weniger windexponierten Lagen (KLEIN 1994, zit. in UHLENBROOK 1999, 10). Dieser Unterschied zeigt ist bei festem Niederschlag am ausgeprägtesten.

Aufgrund der Überlagerung der verschiedenen Effekte ergibt sich eine komplexe räumliche Verteilung der Niederschlagshöhen. Die korrigierten mittleren jährlichen Niederschlagshöhen verschiedener Stationen sind in Abbildung 2.4 aufgeführt. Daraus wird deutlich, dass für den Niederschlagshöhengradienten im Untersuchungsgebiet keine Linearität gegeben ist. Die beste Anpassung an die vorliegenden Daten wurde durch eine e-Funktion erreicht.

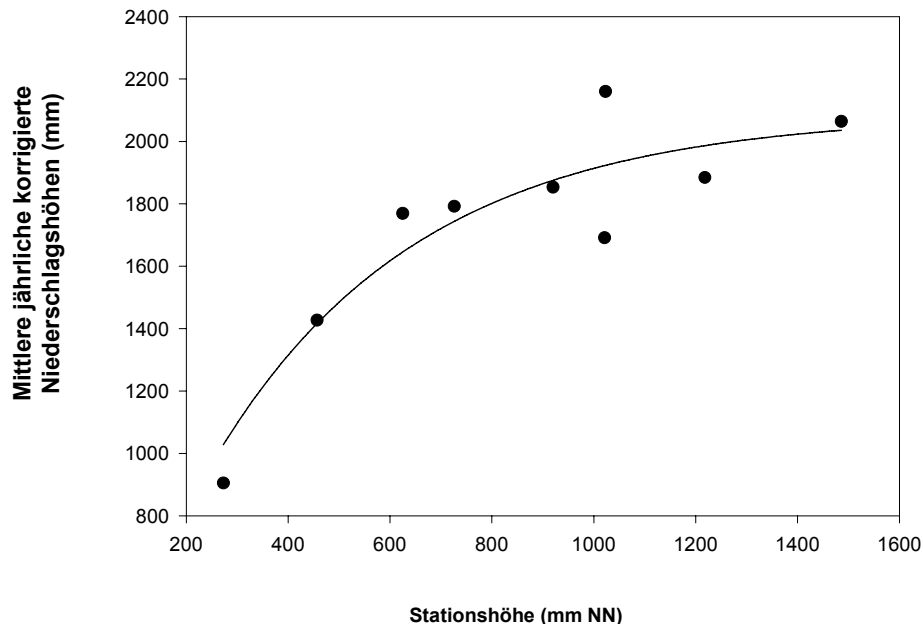


Abb. 2.4 Jährliche mittlere korrigierte Niederschlagshöhen verschiedener Messstationen im Bruggaeinzugsgebiet und der Station "Freiburg"

Die mittlere Lufttemperatur des Einzugsgebietes beträgt ca. 6,2 °C. Ein typisches Phänomen der Wintermonate ist eine Inversionswetterlage, wobei sich bodennah eine Kaltluftmasse festsetzt. Daraus ergibt sich eine saisonal unterschiedliche Ausprägung des Temperaturhöhengradienten. Dieser beträgt im Winter -0,3 °C/100m und im Sommer -0,75 °C/100m.

Aufgrund der Variabilität von Relief, Höhe, Exposition und Landnutzung zeigen auch die anderen klimatischen Faktoren, wie z.B. Windgeschwindigkeit und -richtung sowie Luftfeuchtigkeit und Strahlungsbilanz, eine erhebliche Heterogenität. Sie bedingen eine mittlere jährliche Gebietsverdunstung von 550 mm. Lokal werden aber auch Werte von bis zu 900 mm erreicht. Aufgrund der im allgemeinen ganzjährig guten Wasserverfügbarkeit liegen die Werte der aktuellen nur wenig unter denen der potentiellen Evapotranspiration (VON WILPERT ET AL. 1996, zit. in UHLENBROOK 1999, 11). Einen Überblick über die klimatischen Gegebenheiten bietet der Klimaatlas „Region-Klima-Projekt Oberrhein Mitte-Süd“ (REKLIP 1995, zit. in WENNINGER 2002).

2.3 Hydrogeologie

Das gesamte Einzugsgebiet besteht im Untergrund aus Massengestein. Paragneise und Orthogneise entstanden durch Metamorphose aus klastischen Sedimenten bzw. aufgestiegenen Granitschmelzen. Bei erneutem Aufschmelzen und partieller Mobilisierung von Gesteinsschmelzen wurden Anatexite erzeugt. Schließlich finden sich im Untergrund ein geringer Anteil von Ganggesteinen und vereinzelt Amphibolite.

Aufgrund von tektonischen Störungszonen und Grenzflächen zwischen unterschiedlichen Gesteinen ist ein weit verzweigtes, räumlich relativ einheitliches Kluftnetz mit einem Hohlraumanteil zwischen 0,1 und 2,1 % entstanden, welches den größten Teil des Wassertransportes innerhalb des Festgesteins leistet. Die Durchlässigkeiten im Gneis liegen zwischen 10^{-10} und 10^{-5} m/s (STOBER 1995, zit. in UHLENBROOK 1999, 13). Die Gesteinsmatrix trägt wegen ihrer viel geringeren Durchlässigkeit nur gering zum Gesamtwassertransport bei. In ihr befinden sich immobile Wasseranteile, die allerdings durch Diffusion an der Gesamtwasserbewegung beteiligt werden können. Allgemein lässt sich eine Abnahme der Durchlässigkeit mit der Tiefe feststellen. Durch eine dichte Materialeinlagerung wirken einige Erzgänge als Aquicluden. Die zum Abbau der Erzgänge ins Gestein getriebenen Stollen erhöhen wiederum die Durchlässigkeit, so dass die Gebirgsdurchlässigkeit, welche die Summe von Kluft- und Matrixdurchlässigkeit beschreibt, in der Größenordnung von 10^{-6} bis 10^{-7} m/s liegt (BIEHLER 1995, zit. in UHLENBROOK 1999, 13).

Außer an sehr steilen Hängen, wo das kristalline Grundgebirge an die Oberfläche tritt, ist es im Einzugsgebiet fast durchgängig von Deckschichten überlagert. Sie sind neben dem kristallinen Grundgebirge für die hydrogeologische Charakterisierung des Bruggagebietes von besonderer Bedeutung und können in verschiedenen Ausprägungen auftreten. Dabei entsteht zunächst auf dem Festgestein durch physikalische und chemische Verwitterung ein lagiger autochtoner Aufbereitungsbereich, der Zerfallszone bzw. (wenn die Zerkleinerung weiter fortgeschritten ist) Zersatzzone genannt wird.

Nach UHLENBROOK (1999, 85) tragen der kristalline Kluftgrundwasserspeicher und die Verwitterungsdecken 20 % zum langfristigen Gesamtabfluss bei. Die mittlere Verweilzeit in diesem Umsatzraum beträgt ca. 7,6 Jahre. Diese von LINDENLAUB (1998, zit. in UHLENBROOK 1999, 87) und UHLENBROOK (1999, 87) als „Fließsystem-1“ benannte Abflusskomponente zeichnet sich durch eine konstante Quellschüttung aus. Die Wassertemperatur schwankt nur gering und ist der Lufttemperaturschwankung um zwei Monate phasenverschoben. Bezogen auf seine Temperatur hat das Wasser aufgrund der langen Kontaktzeit einen relativ hohen Silikatgehalt.

In Hanglagen findet ein rascher Abtrag des verwitterten Materials statt, so dass Schutthalden entstehen, die nach ihrer Korngrößenverteilung als lehmig-steinig, schluffig-sandig oder steinig anzusprechen sind. Durch den periglazialen Prozess der Solifluktion wurden während der letzten Kaltzeit im besonderen lehmig-steinige Schuttdecken nach folgendem Muster umgelagert: Auf der Zerfalls- bzw. Zersatzzone bilden eingeregeltere Steine die Basisfolge. Hier beträgt der Skelettanteil bis zu 90 %. Die darauf folgende Hauptfolge zeigt eine unregelmäßige Lagerung (mit 10-40 % Skelett). Den Abschluss bildet die Deckfolge, die aus durch Kammeis gerollten Blöcken besteht. Schließlich wurde in Moränen unsortiertes glazial bewegtes Geschiebe abgelagert, und durch fluviatile Sedimentation wurden die Talauen im Holozän mit feinem Material verfüllt.

Wegen der günstigeren Durchlässigkeiten und Hohlraumanteile sowie wegen ihrer Mächtigkeiten findet in den periglazialen Hangschuttdecken und den Hangfußbereichen der Großteil des Wasserumsatzes statt. Dieses "Fließsystem-2" macht nach UHLENBROOK (1999, 85) 69 % des langfristigen Gesamtabflusses aus. Die mittlere Verweilzeit des Wassers in diesem Speicher beträgt 32 Monate. Häufig sind Hanggrundwasserleiter auf dem Grundgebirge anzutreffen. Bei hoher Niederschlagsintensität können sich auch aufgesetzte Grundwasserkörper („*perched aquifers*“) am Übergang zu einer weniger durchlässigen Schicht bilden. Das "Fließsystem-2" zeichnet sich durch eine höhere zeitliche Abflussdynamik und höhere Temperaturschwankungen aus. Der Gehalt an gelöstem Silikat ist in diesen Wassern gering.

Die Quelle „Zipfeldobel“ (siehe Abb. 2.2) wird als repräsentativ für das „Fließsystem-2“ angesehen (UHLENBROOK 1999, 63). Sie befindet sich auf 530 m NN am Fuße eines ca. 220 m langen Nordhanges mit einem mittleren Gefälle von 25°. Während das obere Drittel des Hanges mit Fichten bestanden ist, wird der untere Bereich als extensives Grünland, vorzugsweise als Mähwiese, genutzt.

Der Hang ist aufgebaut aus einer periglazialen Deckschicht mit vorwiegend lehmig-steiniger Deckschicht. Die Hauptfolge ist gut leitend.

Die Abgrenzung des Quelleinzugsgebietes erweist sich als problematisch, da eine allein topographische Betrachtung ungenügend ist. (DIDSZUN 2000). FREY (1999) schätzte die Größe des Einzugsgebietes mithilfe der Niedrigwasserspense auf 0,11 km². Dieser Fläche ist kleiner als das oberirdische Einzugsgebiet, dessen mittlere Höhe von ihm mit 685 m NN angegeben wird.

Schließlich werden 11 % des langfristigen Abflusses durch schnelle Komponenten geleistet, die als Direktabfluss auf Sättigungsflächen, versiegelten Flächen und makroporendominierten Blockschutthalden gebildet werden. Kurzfristig kann der Anteil dieser Komponente am Abfluss bis auf 50 % ansteigen. Tabelle 2.1 fasst die Eigenschaften der oben beschriebenen Hauptabflusskomponenten zusammen.

Tab. 2.1 Übersicht über wichtige Eigenschaften der Hauptabflusskomponenten im Bruggagebiet (nach UHLENBROOK 1999, 88)

	Langfristiger Anteil [%]	mittlere Verweilzeit	Gespeichertes Wasservolumen [m ³]	Abfluss-dynamik
Direktabfluss	11,1	Stunden bis Tage		hoch
Fließsystem-2	69,4	2-3 Jahre	8,8 * 10 ⁷	mittel
Fließsystem-1	19,5	6-9 Jahre	6,6 * 10 ⁷	gering

2.4 Böden, Vegetation und Landnutzung

Die vorwiegend aus Silikaten bestehenden Deckschichten stellen das Ausgangsmaterial der Bodenbildung dar, so dass die Böden der Silikatserie vorherrschen. Der häufigste Bodentyp ist die durch Verbraunung und Verlehmung aus silikatischem Material hervorgegangene Braunerde. Anhand der Höhenstufen lassen sich drei Zonen der Bodenbildung, Vegetation und Landnutzung abgrenzen (HÄDRICH & STAHR 1992, zit. in UHLENBROOK 1999, 18):

- In den niederen Hanglagen unter 600 m NN wurde während der letzten Kaltzeit Löss abgelagert. Nach der Entkalkung und vor der weiter fortschreitenden pH-Absenkung fand in diesen Böden Tonverlagerung statt, so dass an diesen Stellen heute Parabraunerde-Braunerden zu finden sind. Die typische Vegetation in dieser submontanen Hangfußzone sind Tannen-Buchen-Gesellschaften.
- Darauf folgt in der montanen Stufe zwischen 600 und 900 m NN ein Buchen-Tannen-Bestand. Ausgangsmaterial für die Bodenbildung ist hier meist die steinig-lehmige Hauptfolge der periglazialen Deckschicht. Die typische Bodenart ist die Braunerde. Dank der hohen biologischen Leistung des Riesenregenwurm *Lumbricus badensis* findet sich hier trotz nicht optimaler Bedingungen für den Streuabbau die Humusform Mull (LAMPARSKI 1985).
- In den höchstgelegenen und ehemals vergletscherten Bereichen des Einzugsgebiets über 900 m findet man Mullbraunerden sowie Podsole auf sandigen Endmoränen oder Terrassen. Die hochmontane Stufe ist vorwiegend durch Fichtenwälder genutzt.

Allgemein kommen in Erosionslagen aller Höhenstufen Syrosete und Ranker und an Hangfüßen Kolluvien vor. In grund- bzw. stauwasserbeeinflussten Bereichen sind Gleye bzw.

Pseudogleye (z.T. mit Übergang zu Mooren) und in Vorfluternähe Auenböden anzutreffen. Die an fast allen Stellen (mit Ausnahme der eben erwähnten hydromorphen Böden) hohe Infiltrationskapazität der Böden wird von den Niederschlagsintensitäten kaum übertroffen. An einigen Stellen erreicht die ungesättigte Zone in den Deckschichten eine Mächtigkeit von mehreren Metern und bietet eine erhebliche Speicherkapazität zur Versorgung der Pflanzen in Trockenzeiten (HÄDRICH & STAHR 1992, zit. in UHLENBROOK 1999, 18).

Während insgesamt drei Viertel der Einzugsgebietsfläche von Wald bedeckt wird, werden die Hochflächen und Talböden (ca. 22 %) als Hochweiden genutzt. 3 % des Bruggagebietes besteht aus lockeren Siedlungsflächen.

2.5 Hydrologie

Die Brugga wird durch den Zusammenfluss des Steinwasenbaches und des St. Wilhelmer Talbaches gebildet. Sie ist ein Quellfluss der Dreisam, welche wiederum dem Oberrhein zufließt. Ihr Gewässernetz hat eine dendritische Form und orientiert sich wie auch das Grundwasser an tektonischen Störungen oder Kontaktlinien verschiedener Gesteinsformationen. Seine Flusssichte ist mit über 2 km/km² (FORSCHUNGSGRUPPE FLIEßGEWÄSSER 1994, zit. in UHLENBROOK 1999, 22) sehr hoch. In Tabelle 2.2 sind einige gewässerkundliche Hauptzahlen der Brugga und der Dreisam gegenübergestellt.

Tab. 2.2 Gewässerkundliche Hauptzahlen von Dreisam (1941-1995) und Brugga (1934-1979) (UHLENBROOK 1999)

Gewässer	Dreisam	Brugga
Einzugsgebietsgröße [km ²]	258	39,9
HHQ [m ³ s ⁻¹]	233 (22.12.1991)	51,0 (23.11.1944)
MHQ [m ³ s ⁻¹]	64,4	17,6
MQ [m ³ s ⁻¹]	5,63	1,56
MNQ [m ³ s ⁻¹]	0,53	0,36
NNQ [m ³ s ⁻¹]	0,02 (03.12.1964)	0,10 (03.09.1964)
MHq [l s ⁻¹ km ⁻²]	250	442
Mq [l s ⁻¹ km ⁻²]	21,9	39,1
MNq [l s ⁻¹ km ⁻²]	2,07	9,03

Im Vergleich mit der Dreisam zeichnet sich die Brugga durch eine hohe mittlere Abflussspende (Mq) aus. Der Grund hierfür liegt zum einen darin, dass sich das Bruggagebiet aufgrund seiner Höhenlage durch eine höhere Niederschlagsmenge und geringere Verdunstung pro Fläche als die Dreisam auszeichnet. Des weiteren ist zu beachten, dass zur Trinkwassernutzung dem oberhalb des Pegels Ebnet gelegenen Talaquifer eine mittlere Wassermenge von 0,4 m³/s entzogen wird und dass aufgrund der Mächtigkeit des Talaquifers an der Pegelstelle zusätzlich ein mittlerer Grundwasserabstrom von 0,5 m³/s stattfindet (UHLENBROOK 1999, 20).

Sowohl Dreisam als auch Brugga sind durch ein hohes Verhältnis von mittlerem Hochwasserabfluss zu mittlerem Abfluss (MHQ/MQ) ausgezeichnet. Dies deutet auf einen bedeutenden Anteil schneller Komponenten an der Abflussbildung hin, wodurch es zu einer raschen und starken Gebietsantwort auf ein Niederschlagsereignis kommt. Dies wird bedingt durch das wenig

durchlässige Grundgebirge sowie das relativ steile Relief. Die kurzfristige Variabilität des Abflusses ist im Bruggagebiet aufgrund der geringeren Einzugsgebietsgröße sowie des Fehlens eines bedeutenden Talaquifers, wie ihn die Dreisam mit dem Zartener Becken besitzt, ausgeprägter.

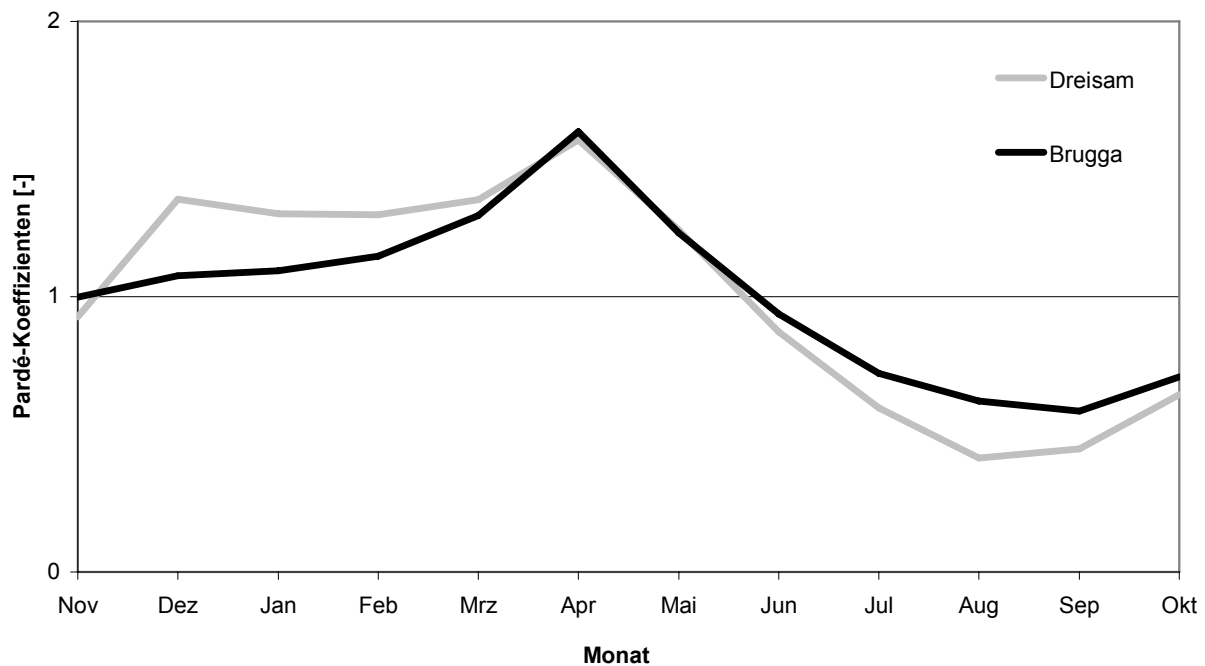


Abb. 2.5 Abflussregime der Dreisam (1941-1996) und der Brugga (1934-1994) (WENNINGER 2002)

Die Jahresverläufe der Abflüsse von Brugga und Dreisam (Abbildung 2.5) folgen einem komplexen Regime ersten Grades vom Typ "nivo-pluvial": Während der Wintermonate liegen die PARDÉ-Koeffizienten der Brugga unter denen der Dreisam, da im Bruggagebiet anteilmäßig mehr fester Niederschlag in der Schneedecke gespeichert wird. Zur Schneeschmelze erreichen beide Regime ihr Maximum im April. Im Verlauf des Jahres sinkt der Abflussanteil wieder, wobei sich die Dreisam infolge der höheren Infiltration und Evapotranspiration durch geringere PARDÉ-Koeffizienten auszeichnet als die Brugga.

2.6 Fazit

Das mesoskalige Einzugsgebiet der Brugga zeichnet sich durch folgende, für die angestrebte Untersuchung günstige Eigenschaften aus:

- Ausgehend von der Einzugsgebietsgröße sind mittlere Verweilzeiten von wenigen Jahren zu erwarten. Hierfür haben sich die natürlichen Isotope als geeignete Tracer erwiesen.
- Als Ergebnis langjähriger intensiver Forschung in diesem Einzugsgebiet sind Messdaten, vor allem über Niederschlagsmenge und ^{18}O -Gehalt im Niederschlag und Abfluss vorhanden.
- Aufgrund seiner Gebietseigenschaften sind im Bruggagebiet verschiedene Speicher – und Abflussbildungsprozesse zu erwarten, welche z.T. schon näher erforscht und hydrologisch quantifiziert sind. Sie können zur Analyse der modelltechnischen Schwachstellen des bisherigen Modells herangezogen werden.
- Als mesoskaliges Einzugsgebiet bietet das Untersuchungsgebiet zudem die Möglichkeit, das Zusammenwirken der einzelnen Abflussbildungsprozesse nachzuvollziehen und prozessorientiert zu modellieren. Die bisherige Forschung führte zur Ausweisung von drei langfristigen Abflusskomponenten. Dieses Hintergrundwissen soll als Grundlage für die angestrebte Verbesserung der prozessorientierten Modellierung mithilfe der Lumped-Parameter-Modelle Verwendung finden.

3 Theoretischer Hintergrund und Methoden

3.1 Umweltisotope

3.1.1 Umweltisotope im Wasserkreislauf

In der Natur kommen 92 Elemente vor. Diese sind durch ihre Protonenzahl eindeutig charakterisiert und durch das Elementsymbol definiert. Dem gegenüber stehen über 1000 Nuklide, die das Ergebnis verschiedener Kombinationen von Protonen und Neutronen im Atomkern sind. Atome mit gleicher Protonen- aber unterschiedlicher Neutronenzahl werden Isotope genannt (ισο τοπος, griechisch, „am selben Platz“ <im Periodensystem>) eines Elements (Mook 2000, 28).

So besitzt z.B. der Wasserstoff drei Isotope, die alle ein Proton aber kein, ein oder zwei Neutronen im Kern besitzen: ^1H (Protium), ^2H (Deuterium) und ^3H (Tritium). Der Index am Elementsymbol bezeichnet dabei die Anzahl der Kernteilchen, d.h. die Summe seiner Protonen und Neutronen.

Während Protium und Deuterium zeitlich in ihrer Atomstruktur stabil sind, ist Tritium radioaktiv. Ein radioaktives Element wandelt sich spontan, einem exponentiellen Zerfallsgesetz folgend, unter Aussendung radioaktiver Strahlung in ein anderes Element um. Sauerstoff kommt in elf Isotopen vor (^{12}O bis ^{22}O), wobei nur drei dieser Isotope (^{16}O bis ^{18}O) stabil sind. Während ^{16}O und ^{18}O in größeren Anteilen vertreten sind, ist ^{17}O sehr selten (CLARK & FRITZ 1997, 3). In Tabelle 3.1 sind die verschiedenen stabilen Isotopen-Kombinationen des Wassers und ihre jeweilige mittlere Häufigkeit aufgelistet (WAGNER & GEYH 1999).

Tab. 3.1 Stabile Isotopen-Kombinationen des Wassers

Masse	Molekül	Häufigkeit [ppm]
18	$^1\text{H}_2\ ^{16}\text{O}$	997,2
19	$^1\text{H}_2\text{H}\ ^{16}\text{O}$	320
20	$^1\text{H}_2\ ^{18}\text{O}$	2000
21	$^1\text{H}_2\text{H}\ ^{18}\text{O}$	6
22	$^2\text{H}_2\ ^{18}\text{O}$	<1

3.1.2 Messung und Angabe des Isotopengehaltes

Im allgemeinen werden in der Wissenschaft keine absoluten Isotopenverhältnisse angegeben. Ein Grund dafür liegt in der Analytik. Während die Messung des *absoluten* Isotopenverhältnisses sehr aufwendig ist, kann durch die Angabe der *relativen* Isotopenzusammensetzung (verglichen mit einem Standard) die Analyse vereinfacht werden. Die Angabe der relativen Isotopenverhältnisse ist auch deshalb sinnvoll, weil damit die Veränderungen in der Isotopenzusammensetzung als Ergebnis von Fraktionierungsvorgängen (siehe Abschnitt 3.1.3) klarer ausgedrückt werden. Letztlich ermöglicht diese Angabe eine internationale Vergleichbarkeit und macht es möglich, die umständlichere Schreibweise mit fünf bis sechs Nachkommastellen zu umgehen (Mook 2000).

Der allgemein verwendete relative Isotopengehalt beschreibt die Abweichung des Isotopenverhältnisses $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ vom Standard und wird mit folgender Gleichung errechnet:

$$\delta^{18}\text{O} = (R_{\text{Probe}}/R_{\text{Standard}} - 1) \cdot 1000 \text{ ‰} \quad (3.1)$$

mit R_{Probe} Anteil $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ in der Probe [-]
 R_{Standard} Anteil $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ im Standard [-]

Der derzeit meist gebräuchliche Standard ist der V-SMOW (Vienna Standard Mean Ocean Water), der von der IAEA (International Atomic Energy Agency) in Wien folgendermaßen für ^{18}O definiert ist (BAERTSCHI 1976, zit. in MOOK (2000, 207):

$$^{18}\text{O}/^{16}\text{O} = 2005,20 \pm 0,45 \cdot 10^{-6} \quad (3.2)$$

3.1.3 Isotopenfraktionierung

Die unterschiedlichen Anteile der Isotopenspezies im Wasser sowie deren räumlich-zeitliche Verteilung sind das Resultat von Fraktionierungsprozessen, die einerseits auf der nuklearen Struktur und andererseits auf den Masseverhältnissen beruhen. Letztere sollen hier näher erläutert werden.

Die isotopisch verschieden zusammengesetzten Wassermoleküle unterscheiden sich aufgrund ihrer unterschiedlichen Molekülmassen in ihrem physikalischen und teilweise - wenn auch nur ganz gering - in ihrem chemischen Verhalten. Dieses hat im wesentlichen zwei Auswirkungen (MOOK 2000, 32):

1. Die isotopisch schwereren Moleküle sind weniger mobil, d.h. sie haben eine geringere Diffusionsgeschwindigkeit und die Frequenz, mit der sie mit anderen Teilchen kollidieren (eine Voraussetzung für chemische Reaktionen) ist geringer als die von leichteren Isotopen. Deshalb reagieren sie träger und langsamer.
2. Die isotopisch schwereren Moleküle haben allgemein eine höhere Bindungsenergie. Dies bedeutet, dass isotopisch schwerere Moleküle einen geringeren Dampfdruck besitzen und z.B. weniger schnell aus einer Flüssigkeit verdunsten. Auch ihre Lösungsgeschwindigkeit ist geringer.

Der geringere Dampfdruck der isotopisch schwereren Moleküle ist für die Isotopenfraktionierung im Wasserkreislauf von herausragender Bedeutung. Hierdurch kommt es zu einer räumlichen und zeitlichen Änderung der Verteilungsfunktion der verschiedenen Isotopenspezies. Im Wasserkreislauf geschieht dies vor allem bei Phasenübergängen, wobei im Fall der Niederschlagsbildung ein Spezialfall der Isotopenfraktionierung eintritt. Diesen gleichgewichtsfernen Prozess, bei dem aus einem offenen System durch das Ausregnen des kondensierten Wassers kontinuierlich isotopisch angereichertes Material entfernt wird, nennt man RAYLEIGH-Fraktionierung (KENDALL & CALDWELL 1998, 61).

Beim Phasenübergang reichert sich das isotopisch leichtere Wasser infolge seines höheren Dampfdruckes in der energiereicheren, leichter flüchtigen Phase an. Dieser Effekt nimmt mit sinkender Temperatur und mit der Geschwindigkeit des Phasenübergangs zu (MOSER & RAUERT 1980, 25). Der Fraktionierungsprozess wurde von DANSGAARD (1954, 1964, zit. in VITVAR 1998, 32) mithilfe der RAYLEIGH-Gleichung und einem nicht-linearen, temperaturabhängigen

Fraktionierungsfaktor beschrieben, der das Verhältnis der Gehalte an isotopisch schwereren Molekülen zwischen der an- und der abgereicherten Fraktion quantifiziert.

3.1.4 Isotopeneffekte bei der Niederschlagsbildung

Aufgrund der zur Isotopenfraktionierung führenden Faktoren lassen sich in Bezug auf die Niederschlagsbildung folgende Effekte differenzieren (MOSER & RAUERT 1980, 25ff):

- Der Großteil des über den Kontinenten zirkulierenden Wassers stammt aus der Verdunstung aus dem Meer. Der dabei entstehende Wasserdampf ist isotopisch leichter als das Meereswasser. Mit zunehmender Entfernung zu Küste verringert sich das isotopische Gewicht nun weiter, weil im Laufe des Ausregens des Wasserdampfes aus den Wolken diese an isotopisch schwerem Wasser verarmen. Dieses Phänomen nennt man den *Kontinentaleffekt*. Das Ausmaß dieses Effektes ist abhängig von den topographischen und meteorologischen Gegebenheiten und schwankt beträchtlich von Region zu Region. Außerdem zeigt er einen jahreszeitlichen Verlauf (GAT ET AL. 2000, 50).
- Das gleiche Prinzip wie beim Kontinentaleffekt spiegelt sich auch auf einer räumlich und zeitlich kleineren Skala in dem *Mengeneffekt* wider: Innerhalb eines Niederschlagsereignisses kann man beobachten, dass der Gehalt an schweren Isotopen im Niederschlag mit der Niederschlagsdauer abnimmt. Bei tropischen konvektiven Niederschlägen in der Innertropischen Konvergenzzone bzw. bei Schauern in Nordwesteuropa sind Abnahmen des $\delta^{18}\text{O}$ -Werte um bis zu 15 ‰ festgestellt worden. Bei einer Untersuchung von Insel-Messstationen konnte ein Zusammenhang mit dem mittleren Monatsniederschlag in der folgenden Weise festgestellt werden: Mit einer Zunahme des Monatsniederschlags um 100 mm sinkt der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert um 1,5 ‰ (GAT ET AL. 2000). Im allgemeinen ist dieser Verlauf äußerst ereignisspezifisch und regional verschieden. Durch die Beteiligung von unterschiedlichen Luftmassen an einem Niederschlagsereignis kann es zu einem Zustrom von isotopisch anders zusammengesetztem Wasserdampf kommen. Hierdurch wird der Mengeneffekt verfälscht oder überdeckt.
- Mit steigender Temperatur beim Phasenübergang von flüssig zu gasförmig nimmt der Gehalt schwerer Isotope im Wasserdampf und folglich auch im Niederschlag zu. Dieser *Temperatureffekt* zeigt sich konkret in Form eines *Breiteneffektes* sowie eines *Jahreszeiteffektes*. Pro Zunahme der geographischen Breite um einen Breitengrad sinkt der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert in Europa und in den USA im Mittel um 0,6 ‰; eine Abnahme der Jahresmitteltemperatur um 1 °C bewirkt in höheren Breiten einen um ca. 0,5 ‰ niedrigeren $\delta^{18}\text{O}$ -Wert (GAT ET AL. 2000, 44).
- Kommt es an orographischen Hindernissen zu Steigungsregen, so überlagern sich Mengen- und Temperatureffekt zum sogenannten *Höheneffekt*. Bei einer Höhenzunahme von 100 m sinkt der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert im Mittel um ca. 0,2 ‰. (GAT ET AL. 2000, 54). Mit der Höhe nimmt tendenziell einerseits die verstrichene Niederschlagszeit zu, so dass der Niederschlag schon an isotopisch schweren Wassermolekülen stärker verarmt ist. Andererseits nimmt im allgemeinen die Lufttemperatur mit der Höhe ab. Somit tritt bei der Kondensation höhergelegener und kühlerer Luftmassen eine verstärkte Fraktionierung auf, und die schwereren Wassermoleküle gehen bevorzugt in die flüssige Phase über und

regnen aus. Schließlich spielt hier auch noch die Verdunstung des Niederschlages während des Fallens eine Rolle. Ein längerer Fallweg bedeutet eine verstärkte Verdunstung und eine Anreicherung der isotopisch schwereren Moleküle im Regentropfen. Dieser Prozess führt vor allem in Innentälern von Gebirgsmassiven und im Lee der Anströmrichtung zum sogenannten *Pseudo-Höheneffekt* (MOSER & STICHLER 1971 zit. in GAT ET AL. 2000, 54).

Im Vergleich der oben genannten Effekte werten MOSER & RAUERT (1980, 30) den Temperatureffekt als den dominierenden Faktor der *lokalen* Variationen des Isotopengehalts. Aufgrund von weltweiten $\delta^{18}\text{O}$ -Messstationen ergibt sich folgender Zusammenhang der mit dem Niederschlag gewichteten $\delta^{18}\text{O}$ -Werte [‰] mit der bodennahen Lufttemperatur T [°C] (CLARK & FRITZ 1997, 64):

$$\delta^{18}\text{O} = -11,99\text{‰} + 0,338 \cdot T, \quad R^2 = 0,815 \quad (3.3)$$

Das Bestimmtheitsmaß zeigt an, dass meist eine relativ starke Korrelation des $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes mit der Lufttemperatur in Bodennähe zu beobachten ist, obwohl der Phasenübergang in der Höhe stattfindet und der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert deshalb von der Kondensationstemperatur an der Wolkenbasis abhängt und zudem von anderen Faktoren überlagert werden kann. MOSER & RAUERT (1980, 30) führen dieses Phänomen auf die schnelle Gleichgewichtseinstellung des Wassers mit dem Wasserdampf der Atmosphäre während des Fallens des Niederschlages zurück.

Die oben differenzierten Vorgänge führen in der Natur aufgrund von Überlagerungen und Wechselwirkungen zu einem hohen Grad an Komplexität die durch die Anreicherungs- und Mischungsprozesse in den hydrologischen Speichern zusätzlich erhöht wird.

3.1.5 Prozesse in den Speichern

Sofern der Niederschlag nicht sofort zum Abfluss kommt, wird er in verschiedenen Speichern zurückgehalten. Die bedeutendsten Speicher im Bruggagebiet sind Schnee-, Interzeptions-, Boden- und Grundwasserspeicher, die sich durch folgende isopenhydrologisch relevanten Prozesse auszeichnen:

Der Schneespeicher hat im Bruggagebiet saisonal starke Bedeutung. In den niederen Lagen fallen ein Drittel, in den höheren Lagen bis zu zwei Drittel des Jahresniederschlages als Schnee (PARLOW & ROSNER 1992). Aufgrund der niedrigen Temperaturen bei der Niederschlagsbildung zeichnet sich der Schnee allgemein durch einen besonders negativen $\delta^{18}\text{O}$ -Wert aus.

In der Schneedecke kommt es durch Schmelzen und Wiedergefrieren sowie den Austausch zwischen Schnee, Schmelzwasser und atmosphärischem Wasserdampf zu einer komplexen Interaktion der verschiedenen Isotopenspezies. Die mittlere isotopische Zusammensetzung wird durch frisch fallenden Niederschlag stets verändert. Sofern es zu Phasenübergängen in der Schneedecke kommt, reichern sich die isotopisch schwereren Moleküle vornehmlich in der festen Phase an, während die isotopisch leichteren Moleküle eher in die flüssige bzw. gasförmige Phase übergehen und über Schneeverdunstung oder Abfluss den Schneespeicher verlassen. Abbildung 3.1 verdeutlicht die Anreicherung der schweren Moleküle in der Schneedecke im Laufe der Schneedeckendauer und besonders zum Zeitpunkt der intensiven Schneeschmelze.

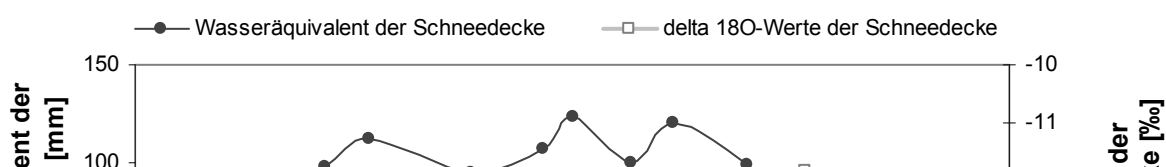


Abb. 3.1 **Wasseräquivalent und mittlerer $\delta^{18}\text{O}$ -Wert der Schneedecke am Klimaturm „St. Wilhelm“ (HILDEBRAND 1996)**

Durch diese Anreicherungsprozesse wird aber im allgemeinen nicht das isotopische Niveau des flüssigen Niederschlages erreicht. Dieses liegt für die Messstation „St. Wilhelm“ im Bereich von -10 ‰. Während der Schneeschmelzphase kann es u.U. zu einem signifikanten Beitrag von isotopisch leichtem Schneeschmelzwasser zum Direktabfluss und zur Infiltration kommen (CLARK & FRITZ 1997, 85; COOPER 1998, 119). Aus diesem Grund stellt die frühjährliche Schneeschmelzperiode im allgemeinen auch die Phase der geringsten $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss dar (ROHDE 1998, 398).

Besondere Aufmerksamkeit gebührt auch dem Bodenspeicher als Regler der Grundwasserneubildung (CLARK & FRITZ 1997, 80). Dort kommt es zu einer bedeutsamen Modifikation des auftreffenden Signals in Menge und Zusammensetzung. Die Perkolation durch die ungesättigte Zone bedingt Vermischungsprozesse von Wasser unterschiedlichen Alters und Isotopengehaltes. Daneben bewirkt ein ggf. vorhandener Konzentrationsgradient eine Diffusion und damit ebenfalls eine Vermischung von Wassern verschiedener Ereignisse. Daraus resultiert eine Dämpfung des Signals mit zunehmender Tiefe (BARNES & TURNER 1998, 137).

In der sogenannten kritischen Tiefe ist die jährliche Schwankung bis auf die zweifache Standardabweichung der Messungen (2σ) abgesunken. Nach CLARK & FRITZ (1997, 82) liegt die kritische Tiefe dieser Dämpfung in feinem Material bei drei bis fünf Metern. In geklüftetem Gestein kann diese Tiefe mehrere Zehnermeter betragen. In ihrer Untersuchung in einem kleinen Fichten- und Buchenbestand im Schwarzwald haben BRODERSEN ET AL. (2000) Niederschlagssignale der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte nur bis in 60 cm Bodentiefe nachverfolgen können. In 180 cm Bodentiefe herrschte dagegen ein fast konstanter $\delta^{18}\text{O}$ -Wert.

Durch Verdunstung wird dem System Wasser entzogen. Dabei kann die reine Evaporation von Bodenwasser oder interzipiertem Wasser von der durch Pflanzen bewirkten Transpiration unterschieden werden. Während die Evaporation isotopisch fraktionierend wirkt, findet bei der durch die Vegetation kontrollierten Transpiration eine Anreicherung der isotopisch schwereren Moleküle in der flüssigen Phase erst in den Stomata der Blätter statt (DAWSON & EHLENGER 1998, 165). BRODERSEN ET AL. (2000) stellten bei ihren Untersuchungen eine Anreicherung des Niederschlagswassers um 0,38 ‰ (bei Fichten) bzw. 0,36 ‰ (bei Buchen) infolge von Interzeptionsverdunstung und isotopischem Austausch mit atmosphärischem Wasserdampf fest. Die Verdunstung aus der Streuschicht und dem Boden ist bei Waldbeständen dagegen vernachlässigbar gering.

Das mit isotopisch schwereren Molekülen angereicherte und bezüglich seines Alters gemischte Wasser wird, abzüglich aller Zehrungen, durch Perkolation an die gesättigte Zone weitergeleitet. CLARK & FRITZ (1997, 80) weisen darauf hin, dass dieser Prozess räumlich ausgesprochen heterogen ist. Zudem variiert er in verschiedenen Zeitskalen: er ist vom

Einzelereignis, Jahreszeiten, zwischenjährlichen Schwankungen und Trends abhängig und bedarf eingehender Untersuchung.

Auch nach seinem Übergang in die gesättigte Zone kann das Wasser, sofern der Grundwasserspiegel sich nahe genug an der Erdoberfläche befindet, durch kapillaren Aufstieg und anschließende Verdunstung in seiner isotopischen Zusammensetzung beeinflusst werden. Durch tiefreichende Wurzeln kann die Grundwassermenge signifikant verändert werden.

3.1.6 Umweltisotope als natürliche Tracer in der Hydrologie

Ein Tracer (engl. *to trace*, nachspüren), in der deutschen Literatur auch Markierstoff genannt, ermöglicht die Erforschung der Beschaffenheit oder des Verhaltens eines Systems durch die Beobachtung einer Substanz (eines Tracers) in diesem System.

In den vergangenen vier Dekaden haben sich Isotope als geeigneter Tracer für die Hydrologie erwiesen, und die Isotopenhydrologie hat sich als wertvolles Instrument zur Untersuchung, Entwicklung und Bewirtschaftung der Wasserressourcen herausgebildet. Während künstliche Tracer speziell zu Untersuchungszwecken in das System eingebracht werden, gelangen die natürlichen Tracer über den Niederschlag flächenhaft in das System. Natürliche Tracer haben den Vorteil, dass sie in größeren Raum- und Zeitskalen angewandt werden können als künstlich injizierte Markierstoffe. Nach LEIBUNDGUT (1984, zit. in UHLENBROOK 1999) konvergieren alle im Abfluss enthaltenen Informationen am Gebietsauslass. Somit bietet die tracerhydrologische Untersuchung des Abflusses am Gebietsauslass die Möglichkeit der integralen Erforschung der Abflussprozesse in einem Einzugsgebiet.

Während Umweltisotope durch die Analyse kurzer Zeitabschnitte zur ereignisspezifischen Abflusskomponententrennung herangezogen werden können, dienen Zeitreihen von mehr als einem Jahr Länge u.a. zur Abschätzung von mittleren Verweilzeiten (SOULSBY ET AL. 2000).

Dabei bieten sich besonders die stabilen Isotope des Wasserstoffs und des Sauerstoffs als Tracer an, da sie die Wassermoleküle bilden und sich in Bezug auf Sauerstoff- und Wasserstoffisotope in organischem und geologischen Material konservativ verhalten (KENDALL & CALDWELL 1998, 79). Sie kommen somit nah an die Anforderungen an einen idealen Tracer heran. Zudem zeichnen sie sich aufgrund der Fraktionierungsprozesse durch eine zeitlich variable Inputfunktion aus (MOSER & RAUERT 1980), bieten durch ihren Eintrag mit dem Niederschlag die Möglichkeit der flächenhaften Betrachtung und sind in Hinblick auf Probenahme und -lagerung relativ leicht handhabbar (MCGUIRE ET AL. 2002). Aus diesen Gründen sind sie derzeit die mit am häufigsten verwendeten Tracer zur Modellierung von Fließprozessen im Einzugsgebiet (BARNES & TURNER 1998, 724).

3.1.7 Verschiedene Ansätze zur Bestimmung der mittleren Verweilzeit

MCGUIRE ET AL. (2002) fassen folgende Methoden zur Modellierung der mittleren Verweilzeit mithilfe von natürlichen Tracern zusammen:

- MALOSZEWSKI ET AL. (1983) und DEWALLE ET AL. (1997) ermittelten die mittlere Verweilzeit durch den Vergleich der Schwingungsamplitude von Input- und Outputzeitreihe. Mithilfe einer multiplen linearen Regressionsanalysen wurden beide Zeitreihen jeweils in die Form

$$\delta^{18}\text{O} = c_0 + a \cdot \cos(\omega t) + b \cdot \sin(\omega t) \quad (3.4)$$

mit a, b, c_0 Regressionskonstanten [-]
 t Zeit [z.B. Jahr]
 ω Frequenz [z.B. $2\pi/\text{Jahr}$]

überführt. Die Gesamtamplitude A berechnete sich dann als

$$A = (a^2 + b^2)^{0.5} \quad (3.5)$$

In dem von ihnen angewandten Black-Box-Modell wurde das Dämpfungsverhalten aufgrund der Annahme einer exponentiellen Verweilzeitverteilung mithilfe folgender Gleichung in eine mittlere Verweilzeit umgerechnet:

$$t_t = \frac{1}{2\pi} \left[\left(\frac{A_{\text{out}}}{A_{\text{in}}} \right)^{-2} - 1 \right]^{0.5} \quad (3.6)$$

mit T Mittlere Verweilzeit [z.B. Jahr]
 A_{in} Amplitude der angepassten Sinusfunktion der Inputfunktion [‰]
 A_{out} Amplitude der angepassten Sinusfunktion der Outputfunktion [‰]

Diese Methode wurde in dieser Arbeit den darauf folgenden Untersuchungen zur Abschätzung der mittleren Verweilzeit vorangestellt (siehe Kapitel 5.1).

- In verschiedenen Ansätzen wurden die Fließprozesse modelliert. MALOSZEWSKI & ZUBER (1982) benutzen das auch in dieser Arbeit verwendete Lumped-Parameter-Modell mit einem oder zwei Parametern. Dieser Ansatz wird in Kapitel 3.2 erläutert.
- Jeweils komplexere Modellierungsansätze entwickelten AMIN & CAMPANA (1996), die an spezielle Fließzustände und Randbedingungen angepasste Antwortfunktionen mit multiplen Parametern erstellten, sowie SIMIC & DESTOUNI (1999), die mithilfe eines stochastisch-deterministischen Modells konkrete Simulationen der Fließprozesse durchführten und somit die mittlere Verweilzeit bestimmten. Wie eingangs bereits erläutert, wird die Datenlage im Bruggagebiet in Bezug als nicht ausreichend für komplexere Modellierungen angesehen, so dass diese Ansätze in dieser Arbeit nicht aufgegriffen wurden.
- Schließlich benutzten KIRCHNER ET AL. (2000) die Spektralanalyse, um diese Fragestellung anzugehen. Auf diesen Ansatz wird in Kapitel 3.3 näher eingegangen.

3.2 Modellierung natürlicher Tracer mithilfe von Fließmodellen

3.2.1 Modelltheorie

Für die quantitative Auswertung von Umwelttracer-Untersuchungen werden allgemein meist deterministische Modelle verwendet, die eine feste Ursache-Wirkungs-Beziehung beschreiben. Dabei steht am Anfang der Modellierung eine auf Beobachtungen begründete Hypothese, die sich in einem konzeptionellen Modell ausdrückt. Dieses wird dann in ein mathematisches Modell übertragen, welches das Prozessverständnis in abstrahierter Form wiedergibt. Im vorliegenden Fall soll ein solches Modell die Verteilung des Tracers im System sowie die Beziehung zwischen Input und Output beschreiben.

Anhand der verfügbaren Daten wird das Modell kalibriert, d.h. die Modellannahmen und Parameter werden so variiert, dass der Systemoperator den Input möglichst optimal in den Output umsetzt. Die Modellanpassung anhand dieser gemessenen Konzentrations-Zeitverteilungen bezeichnet man auch als Lösung des inversen Problems. Dazu ist anzumerken, dass eine gute Anpassung zwar eine notwendige aber noch keine hinreichende Bedingung für die Richtigkeit der Ergebnisse darstellt. Sie wird durch den Prozess der Validierung überprüft, wobei untersucht wird, ob ein Modell den gewählten Aspekt der Realität mit erforderlicher Genauigkeit beschreibt (MALOSZEWSKI & ZUBER 1996). Hierzu ist es erforderlich, unabhängige Daten mit in die Bewertung einzubeziehen. Im Fall der Tracerversuche können solche Informationen z.B. aus geohydrologischen Kennwerten bestehen.

3.2.2 Auswahl des Fließmodell-Ansatzes

Zur Lösung des inversen Problems sind verschiedene Fließmodell-Ansätze in der Literatur beschrieben (z.B. YURTSEVER 1995; MALOSZEWSKI & ZUBER 1993). Die am häufigsten verwendeten Modellansätze lassen sich in drei Kategorien nach abnehmender Komplexität folgendermaßen zusammenfassen (YURTSEVER 2000, 2):

- Die **numerischen Modelle** zielen darauf ab, die natürliche hydrogeologische Heterogenität des Grundwassersystems mithilfe von partiellen dreidimensionalen Differentialgleichungen und räumlich distribuierten Parametern detailliert zu modellieren. Sie kommen mit wenig idealisierten Randbedingungen oder vereinfachten Annahmen aus und liefern, sofern entsprechend angewandt, - unter Einsatz eines hohen Daten- und Rechenaufwandes - realistischere und flexiblere Ergebnisse als die folgenden Vereinfachungen.
- In dem semi-distribuierten **Kompartiment-Modellansatz** (in der englischsprachigen Literatur *Compartmental Model* oder *Mixing-Cell Model* genannt) wird das Grundwassersystem als ein Geflecht vernetzter Kompartimente simuliert. Diese "Zellen" repräsentieren hydrogeologische Regionen, zwischen denen der Tracer transportiert wird. Die Unterteilung in verschiedene Regionen wird auf der Basis ihrer hydrogeologischen Einheitlichkeit, der Datenverfügbarkeit und der gewünschten Auflösung vorgenommen. Es besteht meist die Annahme, dass innerhalb einer jeden Zelle eine vollständige Vermischung geschieht, wobei auch diese Bedingung in einigen Modellen gelockert ist.

- In den flächenkonzentrierten **Lumped-Parameter-Modellen** wird das Grundwassersystem als hydrogeologisch einheitliches eindimensionales Fließsystem mit konstanter Durchflussrate (*steady state*) und einer zeitlich invarianten Fließzeitverteilung aufgefasst. Dies ist in jedem Fall eine Vereinfachung der natürlichen Verhältnisse, denn die theoretischen Randbedingungen sind streng genommen nur in homogenen Systemen wie Rohren oder bei Säulenversuchen gegeben. Der Vorteil dieser Modelle besteht allerdings darin, dass sie mit sehr wenigen Parametern auskommen und deshalb in Gebieten angewandt werden können, wo aufgrund fehlender Daten die Anwendung eines komplexeren Ansatzes nicht gerechtfertigt wäre. Die Lumped-Parameter-Modelle sind ein kostengünstiges, effektives und vielerprobtes Verfahren der Bestimmung der mittleren Verweilzeit aus Zeitreihen von ^{18}O oder Deuterium.

In der vorliegenden Arbeit wird aus Gründen der Datenverfügbarkeit der Ansatz der Lumped-Parameter-Modelle verwendet. Dabei soll die Modellierung angesichts der oben genannten Einschränkungen unter einem kritischen Blickwinkel erfolgen.

3.2.3 Modelle des Lumped-Parameter-Typus

Der grundlegende Parameter in allen Modellen der Familie der Lumped-Parameter-Modelle ist die mittlere Verweilzeit. In der englischsprachigen Literatur wird manchmal zwischen *Residence time* (welche das Alter des Wassers innerhalb des Systems zu einem gewählten Zeitpunkt bezeichnet) und *Transit time* (welche sich auf die natürlich gegebene Zeit zwischen Eintritt ins System und Verlassen des Systems bezieht) unterschieden. Bei Probeentnahme am Gebietsauslass oder an natürlichen Quellen sind diese beiden Zeiten identisch (YURTSEVER 1995). Die folgende Zusammenfassung der Herleitung der verschiedenen spezifischen Fließmodelle des Lumped-Parameter-Typus ist, soweit nicht anders vermerkt, den Arbeiten von MALOSZEWSKI & ZUBER (1996) und VITVAR (1998) entnommen.

Das mittlere Alter des **Wassers**, t_w , ist definiert als der Quotient aus mobil gespeichertem Wasser V_m und Durchflussrate Q :

$$t_w = V_m / Q \quad (3.7)$$

Das am Gebietsausgang beprobte Wasser ist in der Regel eine Mischung aus Wassern verschiedenen Alters. Mathematisch berechnet es sich aus der Integration der Altersverteilungsfunktion (*exit-age-distribution* oder *transit-time-distribution*) des Wassers $E(t)$, gewichtet mit den jeweiligen Beiträgen an einem Wasseralter. Für eine inkompressible Flüssigkeit, die zum Zeitpunkt $t=0$ in das System eingetreten ist, wird das mittlere, gewichtete Wasseralter dargestellt durch

$$t_w = \int_0^{\infty} t E(t) dt \quad (3.8)$$

wobei die Altersverteilungsfunktion $E(t)$ folgendermaßen normiert ist:

$$\int_0^{\infty} E(t) dt = 1 \quad (3.9)$$

Da das mittlere Alter des **Tracers** (*turnover time*), t_t , nicht notwendigerweise gleich dem Alter des Wassers, t_w , ist, wird ersteres separat definiert als:

$$t_t = \frac{\int_0^{\infty} t C_{out}(t) dt}{\int_0^{\infty} C_{out}(t) dt} \quad (3.10)$$

mit t_t Alter des Tracers [s]
 $C_{out}(t)$ Tracerkonzentration zum Zeitpunkt t als Resultat einer gedachten Momentaneinspeisung zum Zeitpunkt $t=0$ [z.B. ‰]

Für den Tracer lässt sich eine Verteilungsfunktion in der folgenden Form aufstellen:

$$g(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt} \quad (3.11)$$

Die Funktion $g(t)$ beschreibt die Tracerverteilung im Wasser. Sie wird die Gewichtungsfunktion (*weighting function*) oder Antwortfunktion (*response function*) genannt und ist analog zu $E(t)$ normiert:

$$\int_0^{\infty} g(t) dt = 1 \quad (3.12)$$

Unter der Bedingung, dass die Verweilzeitverteilungen für das Wasser und den Tracer, $E(t)$ und $g(t)$, gleich sind, sind auch die Verweilzeiten von Wasser und Tracer, t_w und t_t , identisch. Dies ist dann der Fall, wenn

- keine Stagnation der Wasserbewegung auftritt,
- der Tracer konservativ ist und sich unverzögert mit dem Wasser bewegt, und
- sowohl Tracereinspeisung als auch Messung im „ C_{FF} -Modus“ (KREFT & ZUBER 1978) geschehen. Dies bedeutet, dass sowohl bei Eintritt als auch beim Verlassen des Systems die Tracerkonzentration als durchflussgewichtetes Mittel berücksichtigt wird. Diese Voraussetzung wird in natürlichen Systemen automatisch erfüllt, wenn die Tracer mit dem infiltrierenden Niederschlag ins System gelangen und die Probenahme im Vorfluter oder an Quellaustritten vorgenommen wird. Aufgrund der Durchmischung beim Quellaustritt bzw. im Vorfluter entspricht die Gesamtkonzentration in der Probe den mit dem Durchfluss gewichteten Anteilen der Einzelkonzentrationen entlang der verschiedenen Fließwege.

Die oben definierte Verteilungsfunktion $g(t)$ kann experimentell oder theoretisch ermittelt werden. Unter fest definierten Rahmenbedingungen im Labor gilt

$$M = Q \int_0^{\infty} C_{\text{out}}(t) dt \quad (3.13)$$

mit	Q	Durchflussrate [m ³ /s]
	M	Masse des Tracers [kg]
	C _{out} (t)	Tracerkonzentration zum Zeitpunkt t [z.B. ‰]

Durch Einsetzen dieser Gleichung in Gleichung 3.8 lässt sich die Verteilungsfunktion g(t) bestimmen als

$$g(t) = \frac{C_{\text{out}}(t)Q}{M} \quad (3.14)$$

Im Fall von Grundwassersystemen ist der experimentelle Ansatz wegen der Komplexität des Systems und des deshalb notwendigen Aufwandes praktisch nicht möglich. Eine theoretische Lösung kann aufgrund des Massenerhaltungssatzes mit Transportgleichungen unter bestimmten Systemannahmen gefunden werden. Dabei ist es wichtig, das theoretische Modellkonzept mit Experimentaldaten abzusichern.

Der Übergang von der Betrachtung momentaner Einspeisungen zu einer kontinuierlichen Eingangsfunktion wird durch die Faltung über die Zeit vollzogen. Dabei geht die allgemeine Größe t in den Parameter t' über, der als Integrationsvariable die jeweilige Verweilzeit des Tracers beschreibt. Das Faltungsintegral beschreibt, wie das System den Input C_{in}(t-t') in den Output C_{out}(t) entsprechend der Verteilungsfunktion g(t') umformt. Bei Einsatz eines konservativen stabilen Tracers lautet das Faltungsintegral:

$$C_{\text{out}}(t) = \int_0^{\infty} C_{\text{in}}(t - t') g(t - t') dt' \quad (3.15)$$

mit	C _{out} (t)	Tracerkonzentration im Output zum Zeitpunkt t [z.B. ‰]
	C _{in} (t-t')	Tracerkonzentration im Input zum Zeitpunkt t-t' [z.B. ‰]
	t	Zeitpunkt der Probenahme [s]
	t'	Aufenthaltszeit, Laufparameter der Integration [s]
	t-t'	Eintrittszeit [s]
	g(t')	Gewichtungsfunktion des Tracers zum Zeitpunkt t' [-]

Der Verlauf der theoretischen Outputkonzentration ergibt sich aus den jeweiligen Summen aller vorangegangenen Inputkonzentrationen, gefaltet mit der jeweiligen Gewichtungsfunktion entsprechend der Verweilzeitverteilung, welche mit einem Fließmodell angenähert werden kann. Da der Abfluss zeitlich variabel ist, gilt diese Beziehung strenggenommen nur dann, wenn t und t' auf den kumulativen Abfluss bezogen werden statt auf die Zeit. KIRCHNER ET AL. (2000) haben gezeigt, dass das Ergebnis in beiden Fällen praktisch äquivalent und somit die Integration über die Zeit, wie sie allgemein vorgenommen wird, gerechtfertigt ist.

Innerhalb der Familie der Lumped-Parameter-Modelle gibt es konzeptionelle Variationen, die sich bezüglich ihrer Parameteranzahl und der angenommenen Verweilzeitverteilung unterscheiden. Sie beruhen im wesentlichen auf Ableitungen und Anwendungen der dreiparametrischen Gammaverteilung für feste Randbedingungen. Die dreiparametrische Gammaverteilung lautet (YEVJEVICH 1972):

$$g(t) = \frac{(t-\gamma)^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} e^{-\left(\frac{t-\gamma}{\beta}\right)} \quad (3.16)$$

mit	α	Formparameter [-]
	β	Skalierungsparameter [-]
	γ	Ortsparameter [-]
	$\Gamma(\alpha)$	Wert der Gammafunktion von α [-]

Wird der Parameter α als konstant 1 gesetzt, so wird die hydrodynamische Dispersion vernachlässigt und es ergibt sich das von Fließwegverteilung und Translationsgeschwindigkeit abhängige Exponential-Piston-Flow-Modell. Wird α innerhalb des Wertebereiches zwischen 0 und 1 variiert, so wird damit der Anteil der Dispersion innerhalb des sogenannten Dispersionsmodells variiert (AMIN & CAMPANA 1996). Im folgenden werden zunächst das Exponential-Piston-Flow-Modell (sowie zwei extreme Vereinfachungen dieses Konzeptes) und danach das Dispersionsmodell vorgestellt.

Exponential-Piston-Flow-Modell

In der Realität kann man häufig feststellen, dass innerhalb der wahren Fließzeitverteilung eines Systems keine Fließzeiten von null vorkommen, sondern dass die geringen Fließzeiten um einen bestimmten Zeitbetrag verzögert sind. Dieser Fall tritt speziell bei der Probenahme aus Brunnen oder bei überdeckten Aquiferen auf. Das hohe Gewicht der Translationsprozesse (gemäss der Modellvorstellung eines sich in einem Kolben begenden Zylinders) bei kurzen Verweilzeiten sowie die exponentielle Verteilung der Fließstrecken bei höheren Verweilzeiten kann durch das Exponential-Piston-Flow-Modell dargestellt werden.

$$g(t') = \frac{\eta}{t_t} \exp\left[\frac{-\eta t'}{t_t + \eta - 1}\right] \quad \text{für } t' > t_t \left[1 - \frac{1}{\eta}\right] \quad (3.17)$$

$$g(t') = 0 \quad \text{für } t' < t_t \left[1 - \frac{1}{\eta}\right]$$

mit	$g(t')$	Gewichtungsfunktion zum Zeitpunkt t' [-]
	t'	Aufenthaltszeit [z.B. Monate]
	t_t	Mittlere Verweilzeit [z.B. Monate]
	η	Aufteilungsparameter [-]

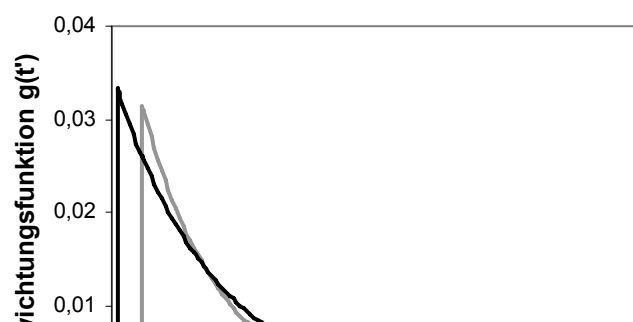


Abb. 3.2 Gewichtungsfunktionen des Exponential-Piston-Flow-Modells mit einer mittleren Verweilzeit von 30 Jahren und einem Aufteilungsparameter von 1,05 (schwarz Linie) bzw. 1,4 (graue Linie)

Abbildung 3.2 stellt die Gewichtungsfunktion für zwei verschiedene Exponential-Piston-Flow-Modelle mit unterschiedlichen Aufteilungsparametern dar. Dabei quantifiziert der Aufteilungsparameter η das Verhältnis zwischen Gesamtabfluss und dem Anteil, der mithilfe einer exponentiellen Verweilzeitverteilung modelliert wird. Er kann Werte zwischen 1 und unendlich annehmen und charakterisiert dabei entsprechend Fälle, in denen der gesamte Abfluss bzw. kein Anteil des Abflusses durch eine exponentielle Verweilzeitverteilung geprägt ist. Nach MCGUIRE ET AL. (2002) liegen die typischen Werte für η zwischen 1 und 1,2. Für die Grenzfälle $\eta \rightarrow 1$ bzw. $\eta \rightarrow \infty$ geht das Exponential-Piston-Flow-Modell jeweils in eine vereinfachte Form über; es ergeben sich dann das Exponentialmodell bzw. das Piston-Flow-Modell.

Exponentialmodell

Das Exponentialmodell wurde in die Hydrologie durch ERIKSSON (1958, zit. in MALOSZEWSKI ET AL. 1983) eingeführt und ist ein einparametrisches Modell, welches durch die mittlere Verweilzeit eindeutig definiert ist. Aus dem Zusammenwirken und der Vermischung von Wassern verschiedenen Alters ergibt sich eine exponentielle Verteilung der Fließzeiten, die von null bis gegen unendlich reichen. Mit zunehmendem Alter verringert sich der entsprechende Anteil am Abflussvolumen dieses Wassers. Die Gewichtungsfunktion lautet:

$$g(t') = \frac{1}{t_t} \exp\left[-\frac{t'}{t_t}\right] \quad (3.18)$$

mit	$g(t')$	Gewichtungsfunktion zum Zeitpunkt t' [-]
	t'	Aufenthaltszeit [z.B. Monate]
	t_t	Mittlere Verweilzeit [z.B. Monate]

Die exponentielle Fließzeitverteilung kann als eine Näherung an Fließprozesse in einem Aquifer angesehen werden, dessen hydraulische Leitfähigkeit mit der Tiefe abnimmt (VITVAR 1998, 28). Häufig ist das Exponentialmodell die beste Approximation komplexer Fließsysteme, in denen es zu Überlagerungen verschiedener Abflussbildungsprozesse kommt. Für das Gesamtsystem des Bruggagebietes ergab das Exponentialmodell die besten Modellergebnisse (UHLENBROOK 1999).

Mathematisch ist dieses Modell mit dem hier nicht weiter behandelten Good-Mixing-Modell äquivalent, welches z.B. bei gut durchmischten Seen und industriellen Behältnissen verwendet wird. Die Basis für die Anwendung des Exponentialmodells im Aquifer ist die Annahme, dass sich die

Fließlinien im Aquifer nicht vermischen. Eine Vermischung findet definitionsgemäß erst an der Probeentnahmestelle bzw. am Gebietsauslass statt.

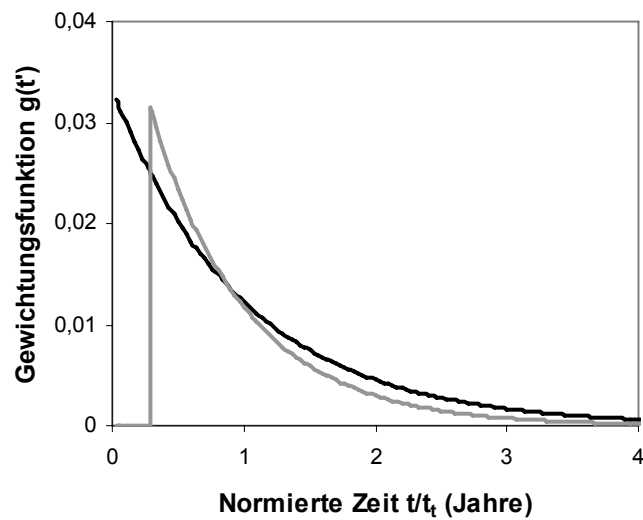


Abb. 3.3 Vergleich von Exponentialmodell (schwarze Linie) und Exponential-Piston-Flow-Modell mit einem Aufteilungsparameter von 1,4 (graue Linie).

Abbildung 3.3 zeigt das Ergebnis der Vereinfachung des Exponential-Piston-Flow-Modells durch den Wegfall des Translationsanteils. Durch die Normierung der Zeit lassen sich die Exponentialmodelle und Exponential-Piston-Flow-Modelle mit verschiedenen mittleren Verweilzeiten in einer Abbildung zusammenfassen. Der Aufteilungsparameter des Exponential-Piston-Flow-Modells in der Abbildung 3.3 beträgt 1,4.

Piston-Flow-Modell

Dieses einfache Fließmodell basiert auf der Annahme, dass sich alle Wasserteilchen - ähnlich wie ein Kolben in einem Zylinder - auf parallelen Bahnen mit gleicher Geschwindigkeit bewegen, ohne sich zu durchmischen. Die Gewichtungsfunktion $g(t')$ ist in diesem Fall die DIRAC'sche Deltafunktion,

$$g(t') = \delta(t' - t_t) \quad (3.19)$$

mit	δ	DIRAC'sche Deltafunktion [-]
	t'	Aufenthaltszeit [z.B. Monate]
	t_t	Mittlere Verweilzeit [z.B. Monate]

Ein Tracer, der zur Zeit $t-t'$ ins System gelangt, verlässt dieses zum Zeitpunkt t . Die Outputkonzentration zum Zeitpunkt t entspricht der Inputkonzentration zum Zeitpunkt $t-t_t$. Die mittlere Verweilzeit ist der einzige Parameter dieses Modells.

Das Piston-Flow-Modell ist in dem seltenen Fall anwendbar, dass sich in einem Grundwassersystem Wasser aus einer eng umgrenzten Grundwasserneubildungszone auf einem langen Fließweg in einem homogenen Aquifer bewegt, wobei die zeitlichen Änderungen der Konzentration gering sind. Eine Anwendung hat das Modell in der Beschreibung von Wasserflüssen in sehr alten überdeckten Aquiferen gefunden (ANDREWS ET AL. 1993, zit. in VITVAR 1998). Es wird, von diesem Spezialfall abgesehen, in dieser reinen Form kaum angewandt.

Dispersionsmodell

Nach Empfehlungen von MALOSZEWSKI & ZUBER (1996) bietet es sich an, das Exponential-Piston-Flow-Modell für η -Werte bis 1,5 zu verwenden und bei höheren Werten direkt auf das im folgenden beschriebene Dispersionsmodell überzugehen.

In diesem zuerst durch NIR (1964, zit. in MALOSZEWSKI ET AL. 1983) entwickelten Modell wird neben der Translation auch die hydrodynamische Dispersion modelliert; neben der mittleren Verweilzeit enthält das Modell den Dispersionsparameter P_D als zweiten Parameter. Die durch ihn beschriebene hydrodynamische Dispersion ist das Resultat der Überlagerung von mechanischer Dispersion und molekularer Diffusion (KÄSS 1992, 278). Die mechanische Dispersion beruht auf den unterschiedlichen Fließgeschwindigkeiten in einer Kapillare, den verschiedenen Kapillardurchmessern sowie den unterschiedlichen Fließwegen. Die molekulare Diffusion wird entsprechend des FICK'schen Gesetzes durch den Konzentrationsgradienten angetrieben.

Bei der Modellierung natürlicher Tracer muss berücksichtigt werden, dass durch die Kalibrierung keine echte Dispersivität ermittelt wird, sondern nur eine scheinbare. Der Grund hierfür liegt darin, dass bei Verwendung des Faltungsintegrals nicht über die Grundwasserneubildungszone integriert wird, sondern dass der in der Realität flächenhafte Eintrag des Tracers im Modell durch die hohe scheinbare Dispersion umgesetzt wird. Somit liegt der durch Kalibrierung ermittelte Wert um einige Größenordnungen über der tatsächlichen Dispersivität, die man durch Punkteinspeisungen berechnen würde (MALOSZEWSKI ET AL. 1983).

Nach KREFT & ZUBER (1978) lautet die „ C_{FF} -Lösung“ der eindimensionalen Dispersionsgleichung (für den Fall, dass sowohl Einspeisung als auch Probenahme proportional zur Durchflussrate (*flux*) geschehen):

$$g(t') = \left[\frac{4\pi t'^3}{Pe t_t} \right]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[- \left(1 - \frac{t'}{t_t} \right)^2 t_t \frac{Pe}{4t'} \right] \quad (3.20)$$

mit	$g(t')$	Gewichtungsfunktion zum Zeitpunkt t' [-]
	t'	Aufenthaltszeit [z.B. Monate]
	t_t	Mittlere Verweilzeit [z.B. Monate]
	Pe	Peclet-Zahl [-]

Die Peclet-Zahl ist der Kehrwert des Dispersionsparameters P_D . Sie ist definiert als Quotient aus dem Produkt von Fließgeschwindigkeit v und Fließstrecke x und dem longitudinalen Dispersionskoeffizient D_L

$$Pe = \frac{1}{P_D} = \frac{vx}{D_L} \quad (3.21)$$

Typische Werte für die Peclet-Zahl bewegen sich um 10 und sind plausibel bis zu einem Minimum von etwa 2 (MALOSZEWSKI 2002, persönliche Mitteilung). Die mit $Pe=2$ parametrisierte Verteilungsfunktion gleicht sich der Verteilungsfunktion des Exponentialmodells an. Für sehr große Peclet-Zahlen wird wiederum eine Verweilzeitverteilung ähnlich der des Piston-Flow-Modells dargestellt. Abbildung 3.4 deutet an, welche Flexibilität aufgrund von zwei Parametern erreicht werden kann.

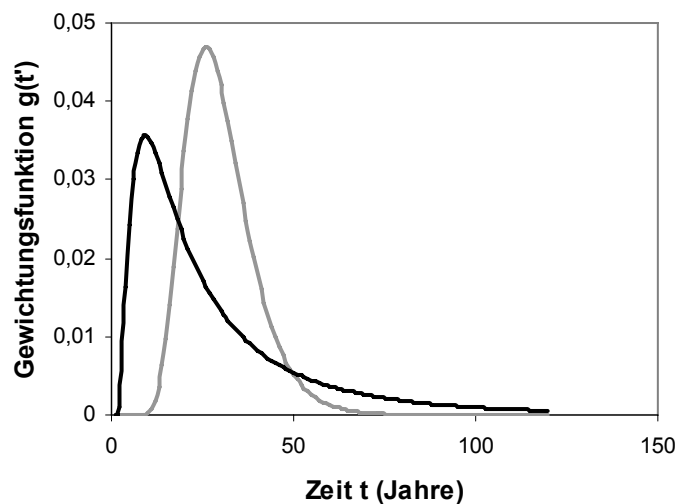


Abb. 3.4 Gewichtungsfunktionen des Dispersionsmodells für eine mittlere Verweilzeit von 30 Jahren und einem Dispersionsparameter von 0,05 (schwarze Linie) bzw. 0,5 (graue Linie)

3.2.4 Prozessorientierte Modellierung

3.2.4.1 Grundkonzept

Die Anwendung des oben beschriebenen Lumped-Parameter-Modells geschieht in dieser Arbeit mit dem Ziel, die natürlichen Vorgänge entsprechend der Datenverfügbarkeit und auf der Basis des räumlichen Prozessverständnisses nachzubilden. Gleichzeitig beinhaltet die Modellierung auch die prinzipielle Möglichkeit, die ablaufenden Prozesse indirekt zu erforschen. So können Szenarios analysiert und das Prozessverständnis rechentechnisch auf „Stimmigkeit“ untersucht werden. In Kapitel 3.1.4 wurden die Prozesse beschrieben, die den Wasserhaushalt an den Schnittstellen des Boden mit der Atmosphäre bzw. des Grundwassersystems bestimmen. In diesem Abschnitt soll die bisher angewandte und erforschte prozesstechnische Integration dieser Erkenntnisse in das Lumped-Parameter-Modell dargestellt und erläutert werden.

Als primäre Eingangsdaten werden im Einzugsgebiet die Niederschlagshöhe und der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Niederschlages des jeweiligen Messintervalls erhoben. Die vereinfachte Modellvorstellung, die der gängigen Gewichtungsmethode zugrunde liegt, beruht auf der Annahme, dass in jedem Messintervall der auf der Bodenoberfläche auftreffende Niederschlag im selben Messintervall ganz oder teilweise zur Grundwasserneubildung beiträgt. Der übrige Anteil geht letztendlich durch die Evapotranspiration zurück in die Atmosphäre. Zur Quantifizierung des Niederschlagsanteils, der tatsächlich in das Grundwassersystem eintritt, wird das Faltungsintegral (Gleichung 3.15) durch eine Gewichtungsfunktion erweitert:

$$C_{\text{gew}}(t) = \frac{\int_0^{\infty} W(t-t')c(t-t')g(t')dt}{\int_0^{\infty} W(t-t')g(t')dt} \quad (3.22)$$

mit	$C_{\text{gew}}(t)$	Gewichtete Inputfunktion [z.B. ‰]
	$W(t-t')$	Gewichtungsfunktion [-]
	$c(t-t')$	Gemessene Isotopenkonzentration des Inputs [z.B. ‰]
	$g(t')$	Verteilungsfunktion der Verweilzeiten [-]
	t	Zeitpunkt der Probenahme [z.B. Monate]
	t'	Aufenthaltszeit des Wassers [z.B. Monate]

Eine alleinige Gewichtung der Inputkonzentrationen anhand der Niederschlagsmenge ist in den meisten Fällen nicht ausreichend. Der klassische erweiterte Ansatz zur Gewichtung der Isotopenkonzentrationen stellt die Multiplikation der Niederschlagshöhe mit dem Infiltrationskoeffizienten α_i dar. Der Infiltrationskoeffizient quantifiziert den Anteil des im Zeitintervall i gefallenen Niederschlages N , der nach Infiltration und Perkolation zur Grundwasserneubildung beiträgt. BERGMANN ET AL. (1986, zit. in VITVAR 1998, 38) schlagen zur Gewichtung die folgende Modifikation der Inputkonzentration anhand des Infiltrationsparameters und der Niederschlagshöhe vor:

$$c_{in} = \frac{\alpha_i N_i n}{\sum_{i=1}^n \alpha_i N_i} (c_i - \bar{c}_{out}) + \bar{c}_{out} \quad (3.23)$$

mit	c_{in}	Gewichtete Inputkonzentration im Messintervall i [z.B. ‰]
	c_i	Ungewichtete Inputkonzentration im Messintervall i [z.B. ‰]
	α_i	Infiltrationskoeffizient im Messintervall i [-]
	N_i	Niederschlagsmenge im Messintervall i [mm]
	n	Gesamtzahl der Messintervalle [-]
	$\bar{c}_{out}$	Gewichtete Outputkonzentration im Messintervall i [z.B. ‰]

wobei

$$\bar{c}_{out} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i P_i c_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i P_i} \quad (3.24)$$

mit	$\bar{c}_{out}$	Gewichtete Outputkonzentration im Messintervall i [z.B. ‰]
	c_i	Ungewichtete Inputkonzentration im Messintervall i [z.B. ‰]
	α_i	Infiltrationskoeffizient im Messintervall i [-]
	N_i	Niederschlagsmenge im Messintervall i [mm]

Diese Prozedur hat den Effekt, dass die Gewichtung der Isotopenkonzentrationen einerseits nach ihrem Beitrag zur Grundwasserneubildung und andererseits nach der Abweichung vom Gesamtmittel der Messreihe erfolgt (VITVAR 1998, 39). Die mithilfe der Gleichung 3.23 modifizierten Konzentrationen werden, wie in Gleichung 3.15 beschrieben, mit der entsprechenden Verweilzeitverteilung gewichtet.

Das in den Boden infiltrierte Wasser wird durch Kapillarkräfte teilweise entgegen der Schwerkraft gehalten. Aus diesem Speicher gelangt es z.T. durch Evapotranspiration wieder in die Atmosphäre. Allein das verbleibende Wasser trägt nach Perkolation zur Grundwasserneubildung bei. Aus diesem Grund können Infiltration und Grundwasserneubildung nicht grundsätzlich gleichgesetzt werden, so dass der Begriff Infiltrationskoeffizient irreführend ist. Der in der englischen Literatur gebräuchliche Begriff *recharge coefficient* („Grundwasserneubildungskoeffizient“) benennt deutlicher, dass es das Ziel der Verwendung dieses Korrekturfaktors ist, den Übertritt des markierten Wassers ins Grundwasser zu modellieren.

Hierbei ist die mengenmäßige Bilanzierung, auf der der Infiltrationskoeffizient letztendlich beruht, nur ein Annäherungsversuch an die eigentlich notwendige tracerhydrologische Betrachtung. So reicht es z.B. nicht, allein die Netto-Grundwasserneubildung zu bestimmen, da sich daraus nicht ableiten lässt, welche Menge des *aktuell* gefallenen Niederschlages ins Grundwasser gelangt. Auch bei einer Netto-Grundwasserneubildung von null kann trotzdem aktuell gefallenes Wasser ins Grundwasser übergetreten sein. Wenn es z.B. in der betrachteten Periode Trockenphasen gegeben hat, so kann durch kapillaren Aufstieg und anschließende Evapotranspiration ein Wasserentzug aus der gesättigten Zone stattgefunden haben. Gleichzeitig kann ein Teil des Niederschlagswassers auf

Vorzugswegen („*preferential pathways*“) bis zur Grundwasseroberfläche vorgedrungen sein, so dass sich beide Prozesse mengenmäßig aufheben. Aus tracerhydrologischer Sicht hat aber u.U. eine signifikante Änderung der Isotopenkonzentration stattgefunden.

In den meisten Fällen entspricht es deshalb nicht der Realität, den Niederschlagsinput als mehrere aufeinanderfolgende parallele Befeuchtungsfronten zu simulieren, die nacheinander durch den Boden perkolieren. Stattdessen kommt es zu einer Durchmischung von verschiedenen Wassern. Ein weiterer komplexer Aspekt sind die im Schnee- und Bodenspeicher auftretenden Fraktionierungsprozesse, wie sie im Kapitel 3.1.4 erläutert wurden.

Die vielschichtige Wirkung des Bodens als Speicher, Regler und Verteiler ist noch längst nicht vollständig erforscht, aber selbst das schon bekannte Wissen übersteigt die simulationstechnische Leistungsfähigkeit eines einfachen, die Niederschlagsmenge korrigierenden, flächenkonzentrierten Infiltrationsparameters. Aus diesem Grund sehen HERRMANN ET AL. (1984) den Infiltrationskoeffizient α in seinem zeitlichen Verlauf als praktisch nicht bestimmbar an.

Auch MALOSZEWSKI ET AL. (1992) bewerten das Wissen über den Infiltrationskoeffizienten als unverhältnismäßig gering, verglichen mit seiner zentralen Bedeutung für die Modellierung. Die Gewichtung des Inputs ist allgemein wenig behandelt worden. Häufig wurde sie in Form einer sinusförmigen Annäherung (z.B. PEARCE ET AL. 1986, zit. in VITVAR 1998, 70) durchgeführt. Auch fehlt bisher eine Sensitivitätsstudie zur Methode der Gewichtung mithilfe des Infiltrationskoeffizienten. Trotz dieser Einschränkungen soll angesichts des Fehlens einer echten Alternative der Infiltrationskoeffizient in dieser Arbeit verwendet und optimiert werden.

Mit zunehmendem Anteil der Evapotranspiration am Bodenwasserhaushalt steigt die Komplexität des Systems. In dieser Hinsicht bieten niederschlagsreiche und kühlgemäßigte Untersuchungsgebiete einen praktischen Vorteil. Hier kann es möglich sein, ganz auf die Korrektur der Niederschlagshöhe zu verzichten bzw. den Infiltrationskoeffizienten konstant als 1 anzunehmen (z.B. DINCER & DAVIS 1967, zit. in GRABCAK ET AL. 1984). Dabei bleibt allerdings die Wirkung eines ggf. vorhandenen Schneespeichers unberücksichtigt.

3.2.4.2 Saisonale Betrachtung

Eine erste Näherung der zeitlichen Variation des Infiltrationskoeffizienten ist die saisonale Betrachtung und die Einführung eines Infiltrationsparameters α , wie von z.B. MALOSZEWSKI ET AL. (1983) vorgeschlagen. Sie nehmen an, dass der Infiltrationskoeffizient α_i jeweils in den Sommer- bzw. Wintermonaten konstant ist. Das Verhältnis der beiden saisonalen Infiltrationskoeffizienten wird durch den Infiltrationsparameter beschrieben:

$$\alpha = \alpha_s / \alpha_w \quad (3.25)$$

mit	α	Infiltrationsparameter [-]
	α_w	Infiltrationskoeffizient für das Winterhalbjahr (November bis April) [-]
	α_s	Infiltrationskoeffizient für das Sommerhalbjahr (Mai bis Oktober) [-]

Die Benennung der Indizes ist in der Literatur uneinheitlich. In dieser Arbeit werden die Indizes, die sich auf einzelne Zeitabschnitte beziehen, als Infiltrations**koeffizienten** und das Verhältnis des sommerlichen zum winterlichen Mittelwert der Infiltrationskoeffizienten als Infiltrations**parameter** bezeichnet.

Während MALOSZEWSKI ET AL. (1983) in der Einteilung der Halbjahre dem Schweizer hydrologischen Jahr folgen, welches im Oktober beginnt, wird in dieser Arbeit das hydrologische Jahr der Bundesrepublik Deutschland zugrunde gelegt. Durch letztere Einteilung von Sommer- und Winterhalbjahr wird für das Untersuchungsgebiet erreicht, dass das mit der Schneeschmelze im April abfließende Wasser noch innerhalb des Winterhalbjahres bilanziert wird, in dem es auch gefallen ist.

Prinzipiell kann der Infiltrationsparameter Werte zwischen 0 und 1 annehmen. In den gemäßigten Breiten gilt allgemein, dass der Großteil der Grundwasserneubildung im Winterhalbjahr stattfindet. Dieses Wissen wurde in ersten Schätzungen so umgesetzt, dass der Wert für α_s für die Sommermonate mit z.B. 0,05 sehr niedrig angenommen wurde (MALOSZEWSKI & ZUBER 1996). Forschungsergebnisse haben dagegen gezeigt, dass selbst in Gebieten mit hoher potentieller Verdunstung das oberflächennahe Grundwasser eine Isotopensignatur trägt, die dem ganzjährigen Verlauf der Isotopenkonzentration ähnelt (VITVAR 1998). Dieses Phänomen ist darauf zurückführbar, dass die Evapotranspiration durch ins Grundwasser reichende Wurzeln oder kapillaren Aufstieg im Boden z.T. auch durch altes schon gespeichertes Wasser gespeist wird. Außerdem stellt Wasser, das im Winterhalbjahr zur Grundwasserneubildung beiträgt, meist eine Mischung aus sommerlichem und winterlichem Niederschlagswasser dar.

Ein sommerlicher Infiltrationskoeffizient von 0, wie z.B. von DINCER ET AL. (1970, zit. in GRABCZAK ET AL. 1984) angenommen, kann konzeptionell falsch sein, da bei α nicht primär die Höhe der Netto-Grundwasserneubildung von Interesse ist, sondern der Übergang des während des Sommers markierten Wassers in den Grundwasserkörper. Nach MALOSZEWSKI & ZUBER (1996) liegt der Infiltrationsparameter in gemäßigten und feuchttropischen Klimaten zwischen 0,4 und 1,0. Meist schwankt er zwischen 0,5 und 0,7. Nach Untersuchungen von GRABCZAK ET AL. (1984) liefert dabei in den mittleren Breiten ein Ansatz mit einem Infiltrationskoeffizienten von 1 weniger falsche Ergebnisse als der Ausschluss der sommerlichen Niederschläge durch einen Infiltrationskoeffizienten von 0.

Ein sehr simpler Ansatz zur Schätzung des Infiltrationsparameters beruht auf einer Betrachtung des Wasserhaushaltes (MALOSZEWSKI & ZUBER 1996) und beschreibt das Verhältnis von Oberflächenabfluss Q und Niederschlag N in den beiden Halbjahren (indiziert durch s bzw. w für Sommer- bzw. Winterhalbjahr):

$$\alpha = \frac{\alpha_s}{\alpha_w} = \frac{\frac{Q_s}{N_s}}{\frac{Q_w}{N_w}} \quad (3.26)$$

Dieser Ansatz geht davon aus, dass das ins Grundwasser übergetretene Wasser im selben Halbjahr als Abfluss wirksam wird bzw. dass die *Mengen* von Grundwasserneubildung und Abfluss gleich sind. Diese Bedingung wird durch Speicheränderungen, z.B. als Schnee oder bei schwankenden Grundwasserständen, in Frage gestellt.

Neben der mengenmäßigen Betrachtung durch die Wasserbilanz können auch die Einzelkonzentrationen und Niederschlagsmengen im Sinne des Massenerhalts beim Stofftransport zur Bestimmung von α herangezogen werden. Der Infiltrationsparameter errechnet sich in diesem Fall durch folgende Gleichung (MARTINEC ET AL. 1974, zit. in GRABCZAK ET AL. 1984):

$$\alpha = \frac{\alpha_s}{\alpha_w} = \frac{\frac{\sum_s N_i C_i - \bar{C}_{out} \sum_s N_i}{\sum_s N_i - \sum_s N_i C_i}}{\frac{\sum_w N_i - \bar{C}_{out} \sum_w N_i}{\sum_s N_i - \bar{C}_s \sum_s N_i}} = \frac{(\bar{C}_w - \bar{C}_{out}) \sum_w N_i}{(\bar{C}_{out} - \bar{C}_s) \sum_s N_i} \quad (3.27)$$

mit	α	Infiltrationsparameter [-]
	α_w	Infiltrationskoeffizient für das Winterhalbjahr (Nov bis Apr) [-]
	α_s	Infiltrationskoeffizient für das Sommerhalbjahr (Mai bis Okt) [-]
	N_i	Niederschlagsmenge im betrachteten Zeitintervall i [mm]
	C_i	Inputkonzentration im Niederschlag des Zeitintervalls i [z.B. ‰]
	$\bar{C}_{out}$	Mittlere Outputkonzentration [z.B. ‰]
	$\bar{C}_s$	Mittlere sommerliche Outputkonzentration (Mai bis Okt) [z.B. ‰]
	$\bar{C}_w$	Mittlere winterliche Outputkonzentration (Nov bis Apr) [z.B. ‰]

Die Indizes s bzw. w unter den Summenzeichen bezeichnen ebenfalls die Aufsummierung über die Sommer- bzw. die Wintermonate. Die Herleitung dieser Formel beruht auf der Annahme, dass die mittlere isotopische Zusammensetzung des Inputs gleich der mittleren isotopischen Zusammensetzung des Outputs ist. Die mittleren Inputkonzentrationen der Sommer- bzw. Winterhalbjahre werden nun so gewichtet, dass im Mittel die Outputkonzentration erreicht wird. Hierzu ist zu sagen, dass diese Methode lediglich eine Anpassung darstellt. Etwaige Diskrepanzen zwischen Input- und Outputkonzentration werden durch diese Gewichtung u.U. maskiert. Die Herleitung des Infiltrationsparameters ist im Anhang ausführlicher dargestellt. Im Gegensatz zur der Methode der saisonalen Niederschlags- und Abflusssummen kann durch Formel 3.27 nur der Infiltrations**parameter** ermittelt werden. Der tatsächliche sommerliche bzw. winterliche Infiltrations**koeffizient** muss, soweit möglich, aus anderen Daten gewonnen oder abgeschätzt werden.

Schließlich besteht auch die Möglichkeit, den saisonalen Infiltrationsparameter als Kalibrierungsparameter aufzunehmen. Zusammen mit der mittleren Verweilzeit (und ggf. einem weiteren Parameter) wird dieser variiert, wobei eine Optimierung der Modelleffizienz angestrebt wird. Im Zusammenhang mit der Kalibrierung von α durch die Modellanpassung sei jedoch bemerkt, dass auch hier jede Einführung eines neuen Parameters äußerst genau zu überdenken ist, da mit zunehmender Zahl der Freiheitsgrade durch Modellparameter die Verlässlichkeit der Modellresultate sinkt (HIMMELBLAU & BISCHOFF 1968). GRABCAK ET AL. (1984) stellten bei ihrer Kalibrierung fest, dass es ab der Einführung eines dritten Kalibrierungsparameters zu uneindeutigen Interpretationen bezüglich der Modelleffizienz kam.

3.2.4.3 Zeitlich höher aufgelöste Betrachtung

Eine differenziertere Gewichtung der einzelnen Zeitabschnitte und damit eine realitätsgetreuere Modellierung kann durch monatlich variable Infiltrationskoeffizienten erreicht werden. Diese dürfen aufgrund der hohen Zahl zusätzlicher Freiheitsgrade nicht kalibriert werden, sondern müssen über unabhängige Daten bestimmt werden. Dabei kann eine unabhängige Basis zur Bestimmung der monatlichen Infiltrationskoeffizienten einerseits durch Feldmessungen und andererseits durch Simulationen hergestellt werden. So leitet VITVAR (1998) die in seiner Analyse verwendeten Infiltrationskoeffizienten aus gemessenen unterirdischen Abflussraten aus einem Lysimeter ab. Dadurch ist es möglich, jedem Monat innerhalb des beobachteten Zeitraumes einen individuellen Infiltrationskoeffizienten zuzuweisen. Eine Extrapolation über den Messzeitraum hinaus kann durch Mittelung der jeweiligen Monate über die einzelnen Jahre erfolgen. Da keine längerfristigen Messdaten über den Verlauf von Bodenwassergehalten und Sickerströmungen für das Untersuchungsgebiet vorliegen, scheidet die von VITVAR (1998) angewandte Methode für diese Untersuchung aus.

Der zweite und prinzipiell andere Ansatz zur unabhängigen Bestimmung der Infiltrationskoeffizienten beruht auf der konkreten Modellierung der Wasserflüsse im Boden. VITVAR (1998, 40) bestimmte z.B. die Infiltrationskoeffizienten mithilfe von Grundwasserneubildungsraten, die er aus dem Boden-Wasser-Haushalts-Modell BOWAM übernahm. UHLENBROOK (1999, 68) verwendete das modulare Niederschlags-Abfluss-Modell HBV (BERGSTRÖM 1992). Dabei setzte er die Monatsmittelwerte für die aus der Boden- in die Abflussbildungsroutine übergebene Wassermenge als Grundwasserneubildung an und verglich diesen Wert mit der Niederschlagshöhe. Die auf diesem Weg ermittelten Koeffizienten beschreiben den typischen mittleren Jahresverlauf.

Dieser Ansatz integriert die oben beschriebenen Prozesse zumindest teilweise. So wird die erhöhte Grundwasserneubildung während der Schneeschmelze besser beschrieben als mit saisonal konstanten Werten. Aber auch hier sind die Koeffizienten nicht in der Lage, Speicherungs- und Anreicherungsprozesse in der Schneedecke oder die Mischung des Wassers in der Bodenzone adäquat wiederzugeben (UHLENBROOK 1999, 69). Auch gelingt es mithilfe der mittleren Monatswerte nicht, den Charakter niederschlagsreicherer oder niederschlagsärmerer Jahre differenziert zu modellieren.

Um auch die Unterschiede zwischen einzelnen Jahren bezüglich der Grundwasserneubildungsverhältnisse zu beschreiben, wurde angestrebt, jeden Modellierungszeitschritt des Untersuchungszeitraumes einzeln zu betrachten. Hierzu wurde ein Modellierungs-Ansatz gewählt, der ebenfalls eine mengenmäßige Betrachtung als Annäherung an die tracerhydrologische Realität darstellt. Statt des Abflusses wird die Verdunstung als zweites Glied in der Wasserhaushaltsgleichung abgeschätzt, um α für jeden Zeitschritt aufgelöst zu quantifizieren.

Dieser Ansatz wurde von ANDERSEN & SEVEL (1974, zit. in GRABCAK ET AL. 1984) und PRZEWOŁOCKI (1975, zit. in GRABCAK ET AL. 1984) angewandt, ist aber scheinbar nicht weiter verfolgt worden. In dieser Arbeit wurde dieser Ansatz wieder aufgegriffen, und der halbmonatliche Infiltrationskoeffizient wurde nach folgender Gleichung bestimmt:

$$\alpha_i = \frac{N_i - V_i}{N_i} \quad (3.28)$$

mit	N_i	Niederschlag im Messintervall i [mm]
	V_i	Aktuelle Verdunstung im Messintervall i [mm]

Zunächst wurde hierzu die potentielle Verdunstung im Zeitraum 1971 bis 1990 auf der Basis der TURC-WENDLING-Formel (WENDLING 1995; DVWK 1996, zit. in UHLENBROOK 1999) für jedes Messintervall durch folgende Näherungsformel berechnet:

$$ETP_{\text{Turc-Wendling}} = \frac{(R_G + 93 * f_k) * (T + 22)}{150 * (T + 123)} \quad (3.29)$$

mit	$ETP_{\text{TURC-WENDLING}}$	potentielle Evapotranspiration nach TURC-WENDLING [mm d^{-1}]
	R_G	Globalstrahlung [W m^{-2}]
	f_k	Küstenfaktor [-], hat im Binnenland den Wert 1
	T	Lufttemperatur [$^{\circ}\text{C}$]

Zur Berechnung der Globalstrahlung und Lufttemperatur wurde wie in UHLENBROOK (1999, 128f) verfahren: Die Globalstrahlung wurde über die Ångström-Formel aus der extraterrestrischen Strahlung, der maximal möglichen Sonnenscheindauer und der tatsächlichen Sonnenscheindauer näherungsweise berechnet. Zur Berechnung der mittleren bodennahen Lufttemperatur wurde anhand der Stationen „Freiburg“ (271 m NN) und „Feldberg“ (1480 m NN) ein Höhengradient aufgestellt und ein gewichteter Mittelwert für das Einzugsgebiet berechnet.

Dieses Verfahren hat gute Übereinstimmungen mit den nach dem PENMAN-MONTEITH-Ansatz erzielten Ergebnissen gezeigt und wird von der DVWK (1996) empfohlen, wenn die Datengrundlage zur Anwendung der PENMAN-MONTEITH-Gleichung nicht erfüllt ist. Die Differenz zwischen Niederschlag und Verdunstung wurde in Relation zum Niederschlag gesetzt (siehe Formel 3.28), und dieser Wert als Infiltrationsparameter betrachtet.

Für den Zeitraum Mai 1995 bis Juli 1999 konnte die mithilfe des TAC^D-Modells (ROSER 2001) berechnete aktuelle Evapotranspiration verwendet werden. Diese beiden Datensätze wurden verwendet, um die aktuelle Evapotranspiration für den gesamten Zeitraum zu schätzen. Für die Zeiträume, für die keine Daten vorlagen, wurde der langfristige mittlere Jahresgang der aktuellen Evapotranspiration verwendet.

Damit dieses Verfahren tatsächlich eine gute Näherung für den Beitrag des Niederschlages an der Grundwasserneubildung innerhalb des Messzeitraumes ist, darf kein oberflächlicher Abfluss stattfinden. In der Konzeption dieses Ansatzes wird davon ausgegangen, dass die Evapotranspiration aus Niederschlag gespeist wird, der in dem jeweiligen Messintervall gefallen ist. Während die erste Bedingung im Bruggagebiet als gegeben angenommen werden kann, ist die Erfüllung der zweiten Bedingung fraglich. Bei tiefreichenden Wurzeln oder Perioden, in denen Grundwasser über kapillaren Aufstieg in die ungesättigte Zone gelangt, leistet älteres Wasser einen Beitrag zur Evapotranspiration, während bei Starkregenereignissen u.U. Niederschlag über Makroporen schnell unter die Wurzelgrenze gelangt.

3.2.4.4 Zusätzliche Modellparameter

In Ergänzung zu dem einen bzw. den zwei Parametern, die in den vorgestellten Modellen zur Beschreibung der Fließzeitverteilung eines Fließsystems verwendet werden, wurden in einigen Modellierungen zwei weitere Parameter eingeführt. Durch diese kann die isotopische Zusammensetzung und der Beitrag einer zeitlich invarianten zweiten Komponente beschrieben werden. Für diese Anwendung bietet das Modellierungsprogramm *FLOW PC* (MALOSZEWSKI & ZUBER 1996) die Möglichkeit, eine solche Komponente durch die zwei konstanten Parameter β (als Anteil der Komponente mit konstanter Tracerkonzentration am Gesamtabfluss) und c_β (für die Tracerkonzentration dieser Komponente) in die Modellierung einzubeziehen.

Dieses Vorgehen muss allerdings durch experimentelle Voruntersuchungen begründet sein muss, da mit zunehmender Zahl der Freiheitsgrade (in Form von Modellparametern) die Verlässlichkeit und die Aussagekraft der Modellresultate sinkt (HIMMELBLAU & BISCHOFF 1968). Deshalb sollte man stets mit simplen Modellen beginnen, und komplexere nur dann einführen, wenn keine guten Resultate mit einfachen Modellen erreichbar sind. Wenn schon die einfachen Modelle gute Ergebnisse liefern, dann gibt es eine unendliche Zahl von guten Lösungen mit komplexeren Modellen, so dass hierdurch kein Wissensgewinn erzielt wird.

Als klassisches Beispiel für die Modellierung einer zweiten Komponente mit konstanter Tracerkonzentration ist die Arbeit von STICHLER ET AL. (1986) anzuführen. Hierbei wurde der Anteil von Uferfiltrat am Grundwasser kalibriert und in die Modellierung aufgenommen. In diesem Fall handelt es sich um ein *externes* hydrologisches System, welches einen Beitrag zu dem mithilfe der Verweilzeitverteilung untersuchten System leistet. In anderen Fällen ist eine isotopisch konstante Komponente verwendet worden, um Wasser mit hoher Verweilzeit im Boden (VITVAR 1998, 53) bzw. im Aquifer (UHLENBROOK 1999, 80) zu modellieren, welches durch Vermischung bzw. Diffusion innerhalb desselben Systems in seiner isotopischen Zusammensetzung ausgeglichen wurde.

Diese Methode darf allerdings nicht angewandt werden, um den simulierten Output insgesamt anzuheben oder abzusenken, um ihn an die gemessenen Werte anzupassen. Für den Fall, dass es Hinweise darauf gibt, dass z.B. in den Hochlagen des Einzugsgebietes eine Komponente mit langer Verweilzeit gebildet wird, müsste der Anteil des Niederschlages, der diese zweite Komponente ausmacht, vom Gesamtinput subtrahiert werden. Folglich würde eine Komponente mit niedrigem $\delta^{18}\text{O}$ -Wert aus der weiteren Modellierung mithilfe der Fließmodelle herausgenommen und somit das Mittel der Eingangsfunktion zunächst angehoben. Erst nach Hinzufügen der zweiten Komponente als konstanten Wert wäre der ursprüngliche Mittelwert wieder hergestellt.

Eine Verschiebung des Mittelwertes kann allerdings auf diese Weise nicht erreicht werden. Das Hinzufügen einer internen Komponente zu den schon simulierten Wasserflüssen erscheint nicht zulässig. Da es im Untersuchungsgebiet keine Hinweise auf eine zweite Abflusskomponente aus einer *externen* Quelle gibt, werden die Voraussetzungen zur Anwendung dieser komplexeren Modellierung als nicht gegeben angesehen.

3.2.5 Modellierung mithilfe von Fließmodellen

Das Inversproblem wurde anhand der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag und im Abfluss für den Gebietsauslass Oberried formuliert und rechen technisch mit einer *Visual-Basic*-Programmierung des Tabellenkalkulationsprogramms *Excel* gelöst. Die Ergebnisse wurden dabei stichprobenartig mit den Ergebnissen verglichen, die das *DOS*-gestützte *FLOW PC* berechnete. In beiden Fällen wurde zu einer gegebenen Inputfunktion anhand einer gewählten Verweilzeitverteilung eine treppenförmige Outputfunktion mit derselben zeitlichen Diskretisierung wie die Inputfunktion erstellt.

Die Auswahl des Fließmodells wurde einerseits aufgrund der bisherigen Kenntnisse bezüglich der Abflussbildung vorgenommen. Durch ein Trial-and-Error-Verfahren wurde angestrebt, die verwendeten Parameter zu optimieren. Dabei diente die sogenannte Modelleffizienz R_{eff} (NASH & SUTCLIFFE 1970, zit. in UHLENBROOK 1999) als Gütemaß der Modellanpassung.

$$R_{\text{eff}} = 1 - \frac{\sum_i (y_i - x_i)^2}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} \quad (3.30)$$

mit	y_i	simulierter Wert, hier der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert im Abfluss [‰]
	x_i	gemessener Wert, hier der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert im Abfluss [‰]
	$\bar{x}$	Mittelwert aller gemessenen x_i [‰]

Die Modelleffizienz bietet eine gute Vergleichbarkeit der Anpassungsgüte von verschiedenen Zeitreihen untereinander und stellt einen strengen Vergleich der Simulation mit dem Mittelwert dar. Sie ist dimensionslos und kann Werte von $-\infty$ bis 1 annehmen. Dabei bedeutet ein Wert von 1 eine perfekte Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Werten. Der Wert 0 ergibt sich, wenn dieselbe Anpassungsgüte des Modells unter Verwendung des Mittelwertes der gemessenen Zeitreihe als konstanter Wert für die Simulation erreicht werden könnte. Negative Werte kennzeichnen schlechtere Modellanpassungen als durch den konstanten Mittelwert.

Gegenüber des traditionellen Standard-Programms *FLOW PC* bot das in *Visual Basic* programmierte Makro neben einer einfacheren Ausführung wiederholter Simulationen mit variierenden Parametern die Möglichkeit, Verteilungsfunktion und Art des Gütemaßes selbst zu bestimmen. Somit konnte auch die Modelleffizienz in die Auswertung einbezogen werden. Im einzelnen bestand der erste Teil der Untersuchung aus folgenden Teilschritten:

Voruntersuchungen

1. Plausibilisierung der Eingangsdaten und Ausschluss von Trends in der Zeitreihe
2. Abschätzung der mittleren Verweilzeit mithilfe der Amplitudendämpfung
3. Abgrenzung der Untersuchungszeiträume und Untersuchung zur Bedeutung der Niederschlagsgewichtung

Untersuchungen zu den allgemeinen Unsicherheiten der Lumped-Parameter-Modelle

4. Verwendung verschiedener saisonaler Infiltrationsparameter, die über die Wasserbilanz, den Stofftransport bzw. Kalibrierung bestimmt wurden
5. Verwendung von Halbmonatsmitteln in der Outputfunktion
6. Verwendung einer zeitlich höher aufgelösten Inputfunktion
7. Verwendung mittlerer halbmonatlicher Infiltrationskoeffizienten
8. Verwendung verschiedener Methoden zur Rückwärtsextrapolation der Inputfunktion

Untersuchungen zur prozessorientierten Modellierung

9. Verwendung von halbmonatlich variablen Infiltrationskoeffizienten
10. Modellierung von Teilsystemen des Bruggagebietes
11. Analyse von Schwachstellen in der Lumped-Parameter-Modellierung

Für die Arbeitsschritte 4 bis 9 sind in Tabelle 3.2 die einzelnen Kombinationen der Eingangsdaten zusammengestellt. Dabei wird deutlich, wie die Komplexität des Modells während der Untersuchung anstieg.

Tab. 3.2 Zusammenfassung des Modellierungsvorgehens

Modellierungsschwerpunkt		Zusammenstellung der Eingangsdaten (Neuerung im Vergleich zur vorhergegangenen Modellierung)	
4.	Verwendung verschiedener saisonaler Infiltrationsparameter, die über die Wasserbilanz, den Stofftransport bzw. Kalibrierung bestimmt wurden	Zeitreihen:	Juli 1995 bis Dezember 1997 Januar 1998 bis Juni 2000
		Inputfunktion:	Ab 1971, Lufttemperatur-Regression bis 1993
		Outputfunktion:	Einzelmesswerte
		Auflösung:	Monatlich
		Gewichtung:	Saisonale Infiltrationsparameter
5.	Verwendung von Halbmonatsmitteln in der Outputfunktion	Outputfunktion:	Zu Halbmonatsmitteln zusammengefasste Einzelmesswerte (jeweils mit dem Abfluss gewichtet)
6.	Verwendung einer zeitlich höher aufgelösten Inputfunktion	Auflösung:	Halbmonatlich
		Outputfunktion:	Einzelmesswerte
7.	Verwendung mittlerer halbmonatlicher Infiltrationskoeffizienten	Gewichtung:	Mittlere monatliche Infiltrationskoeffizienten (aus dem HBV-Modell)
8.	Verwendung verschiedener Methoden zur Rückwärtsextrapolation der Inputfunktion	Inputfunktion:	Erstellung synthetischer Werte über Sinus-Kurven im Vergleich zur Lufttemperatur-Regression Kürzere Rückwärtsextrapolation
9.	Verwendung von halbmonatlich variablen Infiltrationskoeffizienten (außerdem: Integration der neuen Niederschlags-Zeitreihe)	Gewichtung:	Halbmonatlich variable Infiltrationskoeffizienten (auf der Basis der Evapotranspirations- bedingungen)
		Inputfunktion:	Ab 1971, Regression bis 1993 Neue Niederschlagsdaten
10.	Modellierung von Teilsystemen des Brugggebietes	Outputfunktion:	Nur Messwerte der Brugga, ohne Direktabfluss (Fließsysteme 1 und 2) sowie Messdaten der Quelle „Zipfeldobel“ ohne Direktabfluss (Fließsystem-2)

3.3 Modellierung natürlicher Tracer mithilfe von Spektralanalysen

3.3.1 Modelltheorie

Ein weiteres Verfahren zur Bestimmung der mittleren Verweilzeit von Wasser ist die Spektralanalyse, die ursprünglich aus den Fachgebieten Optik und Elektrotechnik stammt. Hierbei werden die Fluktuationen des Systeminputs und des –outputs jeweils als eine Überlagerung von Schwingungen betrachtet, wobei die Schwingungen des Eingangssignals durch das System unterschiedlich stark gedämpft werden. Durch den Vergleich der spektralen Zusammensetzung von Input- und Outputfunktion kann ermittelt werden, wie stark ein Impuls in der jeweiligen zeitlichen Größenordnung gedämpft wird.

Diese Dämpfung ist ein Resultat der Fließzeitverteilungen im System. So wird durch eine breite Fließzeitverteilung ein Eingangsimpuls beim Durchfließen des Systems eher ausgeglichen und damit das Signal abgeschwächt als es bei einer einheitlichen Fließzeitverteilung der Fall wäre. Ebenso ist zu vermuten, dass kurze, schnelle Impulse stärker gedämpft werden als langperiodische Schwankungen. Aufgrund dieses Zusammenhanges kann über das Dämpfungsverhalten auf die Wirkung des Systems und damit auf die der Dämpfung zugrundeliegende Verweilzeitverteilung geschlossen werden.

MULLER & MACDONALD (2000) bieten eine Übersicht über die Grundlagen der Spektralanalyse. Eine Zusammenfassung der bisherigen Anwendungsmöglichkeiten der Spektralanalyse in der Hydrologie ist in FLEMING ET AL. (2002) zu finden.

3.3.2 Frequenz- und Leistungsdichtespektrum

Ein häufig verwendetes Werkzeug in der Spektralanalyse ist die Fouriertransformation (FT). Durch ihre Anwendung wird allgemein die Erleichterung bzw. überhaupt die Ermöglichung einer gewünschten Rechenoperation angestrebt. So ist es z.B. oft problematisch bis unmöglich, komplizierte Intergrale, wie z.B. einige Faltungsintegrale, zu lösen. Das Wesen der Fouriertransformation besteht darin, eine Funktion vom Zeit-Raum (*time domain*), in dem alle Funktionen durch die Zeit beschrieben sind, in einen anderen Raum, meist den Frequenz-Raum (*frequency domain*), in dem alle Funktionen durch die Frequenz beschrieben sind, zu überführen (zur formellen Definition der FT siehe z.B. PREUß & WENISCH 1998). Dabei besteht der große Nutzen der Fouriertransformation bei Faltungsintegralen darin, dass diese bei der Übertragung in den Frequenz-Raum in eine Multiplikation übergehen. Neben der klassischen Intergralschreibweise eines linearen Faltungsintegrals, wie sie auch in den vorangehenden Kapiteln verwendet wurde, gibt es die folgende synonyme Darstellungsweise:

$$h(t) = f(t) \otimes g(t) \quad (3.31)$$

Hierbei bezeichnet das Symbol $\otimes$ die meist aufwendige Faltung der Inputfunktion f durch den Faltungsoperator g , dessen Resultat die Outputfunktion h darstellt. Nach der Fouriertransformation lässt sich diese Gleichung wie folgt darstellen:

$$\tilde{h}(\omega) = \tilde{f}(\omega) \bullet \tilde{g}(\omega) \quad (3.32)$$

Dabei stehen die durch das Tilde-Symbol ($\sim$) gekennzeichneten Variablen nun für die entsprechenden fouriertransformierten Funktionen, welche nicht mehr von der Zeit t , sondern von der Frequenz ω abhängen. Die Faltungsoperation wurde durch eine einfache Multiplikation der fouriertransformierten Funktionen ersetzt. Somit wird die Ausführung des Faltungsintegrals durch die Fouriertransformation rechentechnisch erleichtert.

Der zweite große Nutzen bei der Anwendung der Fouriertransformation besteht in der bereits erwähnten Analyse des Schwingungsverhaltens. Durch sie können Schwankungen der Zeitreihe als Funktion der Frequenz dargestellt werden (DUFFY & GELHAR 1985). Während die Fouriertransformation unspezifische, stochastische Schwankungen, das sogenannte weiße Rauschen (*white noise*), wieder in weißes Rauschen umwandelt, werden echte Schwingungen in die einzelnen spektralen Komponenten zerlegt und als Peaks sichtbar. Eine Überlagerung von Sinusfunktionen verschiedener Frequenzen, $a_1 \cdot \sin(\omega_1 t)$, $a_2 \cdot \sin(\omega_2 t)$, ..., $a_n \cdot \sin(\omega_n t)$, im Zeit-Raum (Abbildung 3.5) wird hierbei im Frequenz- oder Fourier-Raum durch eine Aufreihung von Deltafunktionen dargestellt. An den Stellen ω_1 , ω_2 , ..., ω_n sind dann die Amplituden (a_1 , a_2 , ..., a_n) der einzelnen Teilfunktionen aufgetragen. Diese Darstellungsweise wie in Abbildung 3.6 nennt man das Frequenzspektrum.

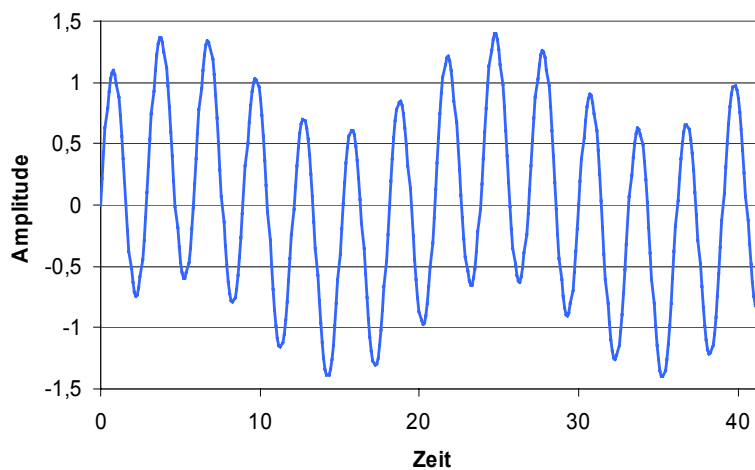


Abb. 3.5 Darstellung einer Funktion im Zeit-Raum: Überlagerung zweier Schwingungen

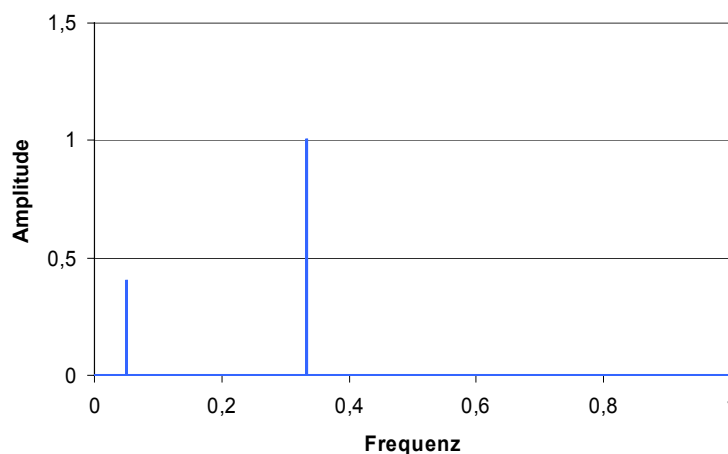


Abb. 3.6 Darstellung der Einzelschwingungen der in Abbildung 3.5 gezeigten Funktion im Frequenz-Raum

In den Frequenzspektren können aufgrund der Diskretisierung kontinuierlicher Funktionen und der Berechnungsalgorithmen für die Deltafunktionen durch den Computer auch negative Amplituden auftreten (Abbildung 3.7). Durch Quadrieren der Amplituden im Fourier-Raum erhält man

das in Abbildung 3.8 gezeigte Leistungsdichtespektrum (*power spektrum*), welches definitionsgemäß ausschließlich aus positiven Werten besteht. Für das Leistungsdichtespektrum gilt analog zu den Frequenzspektren:

$$|\tilde{h}|^2 = |\tilde{f}|^2 \cdot |\tilde{g}|^2 \quad (3.33)$$

Die Leistungsdichte als Quadrat der Amplitude im Fourier-Raum ist ein Maß für die Dominanz einer Schwingung bei der entsprechenden Amplitude. Durch diese Umformung wird das Problem negativer Amplituden umgangen. Die Betragsstriche sind aus Formalitätsgründen nötig, um sicherzustellen, dass bei komplexen Funktionen sowohl Real- wie auch Imaginärteil quadriert werden. Beim vorliegenden Fall ist dies allerdings irrelevant, da in unseren Daten kein Imaginärteil berücksichtigt wird.

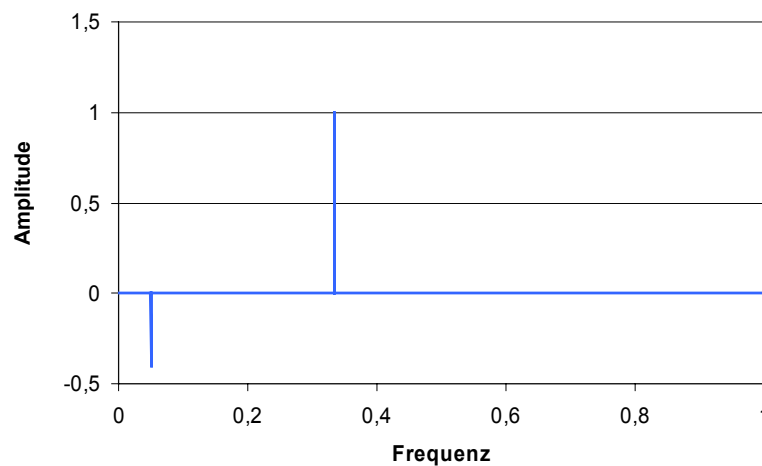


Abb. 3.7 Negative Amplitude als computertechnisches Artefakt

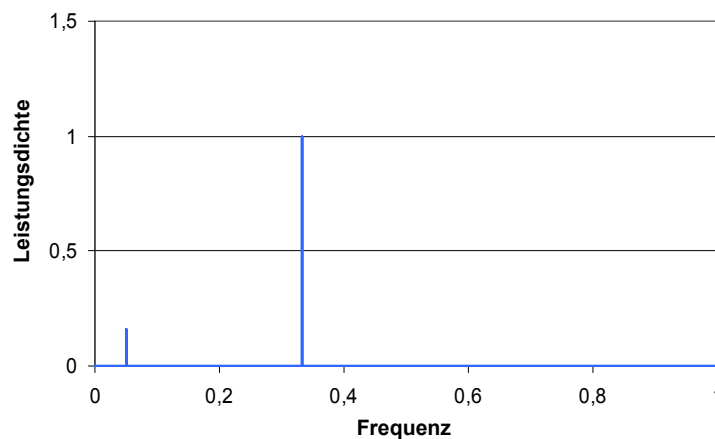


Abb. 3.8 Leistungsdichtespektrum

Wenn die Leistungsdichtespektren der Inputfunktion f und der Outputfunktion h bekannt sind, kann das Leistungsdichtespektrum des Faltungsoperators g berechnet werden. Durch Wurzelziehen und Rücktransformation kann somit auf den Faltungsoperator geschlossen werden. Bedingung für die Gültigkeit einer Fouriertransformation ist, dass sich das physikalische System als lineare Differentialgleichung darstellen lässt, wobei die Variablen stochastische Funktionen der Zeit sind.

Da die exakte Berechnung der Fouriertransformation auch für moderne Computer meist zu aufwendig ist, bedienen sie sich eines vereinfachten Näherungs-Verfahrens, der schnellen

Fouriertransformation (*Fast Fourier Transformation, FFT*). Bei der Anwendung der Fouriertransformation auf experimentelle Zeitreihen muss beachtet werden, dass diese nur für kontinuierliche Funktionen oder äquidistante Reihen definiert ist. Liegen diskrete Werte vor, deren zeitlicher Abstand untereinander variiert, so ist eine Modifikation der Fouriertransformation nötig.

Nach SCARGLE (1982) kann durch die diskrete Fouriertransformation (DFT) ein sogenanntes Periodogramm erzeugt werden, welches für eine endliche Reihe diskreter und nicht äquidistanter Messwerte gilt und dieselben Eigenschaften hat wie das Leistungsdichtespektrum für kontinuierliche Funktionen. Aus dem gegebenen Datensatz wird durch die diskrete Fouriertransformation eine Zeitreihe mit der vorgegebenen Anzahl äquidistanter Werte ermittelt. Diese künstliche Eingangsfunktion wird dann transformiert. Im folgenden wird der Begriff Leistungsdichtespektrum weiter verwendet, damit ist aber immer die diskrete Form gemeint.

3.3.3 Analyse der Leistungsdichtespektren zur Bestimmung von mittleren Verweilzeiten

3.3.3.1 Das Einzugsgebiet als Schwingungsdämpfer

DUFFY & GELHAR (1985) zeigten, dass sich ein stationärer stochastischer Prozess, wie z.B. Fluktuationen eines natürlichen Tracers, mithilfe eines Leistungsdichtespektrums analysieren lässt. Das Einzugsgebiet dämpft die Schwankungen der Tracerkonzentrationen zwischen Systemeingang und -ausgang ab. Es ist auch möglich, dass das System einen Filter darstellt, der (analog zu einem optischen Filter) die Passage eines Impulses wellenlängenspezifisch beeinflusst. Mithilfe einer Fouriertransformation kann dieser Dämpfungs- und Filterungsprozess aufgespürt werden.

Die Wirkung eines hydrologischen Systems auf einen Konzentrations-Input und seine Überführung in einen Konzentrations-Output ist mithilfe des Faltungsintegrals (analog zu Gleichung 3.15) folgendermaßen darstellbar:

$$C_{\text{out}}(t) = C_{\text{in}}(t-t') \otimes g(t') \quad (3.33)$$

mit	$C_{\text{out}}(t)$	Tracerkonzentration im Output zum Zeitpunkt t [z.B. ‰]
	$C_{\text{in}}(t-t')$	Tracerkonzentration im Input zum Zeitpunkt $t-t'$ [z.B. ‰]
	t	Zeitpunkt der Probenahme [z.B. Monate]
	t'	Aufenthaltszeit [z.B. Monate]
	$t-t'$	Eintrittszeit [z.B. Monate]
	$g(t')$	Gewichtungsfunktion zum Zeitpunkt t' [-]

Wie für die Fließmodelle gilt auch in dieser Anwendung, dass mathematisch korrekterweise t' als kumulierter Abfluss berechnet werden müsste statt als kalendarische Zeit. KIRCHNER ET AL. (2001) haben, wie bereits erwähnt, beide Laufparameter in ihrer Analyse verglichen und in beiden Fällen praktisch identische Ergebnisse erzielt, so dass die Vereinfachung durch die Verwendung der Kalenderzeit gerechtfertigt erscheint.

Das oben beschriebene Faltungsintegral lässt sich durch Fouriertransformation und Quadrieren in folgende Gleichung überführen:

$$|\tilde{C}_{\text{out}}(\omega)|^2 = |\tilde{C}_{\text{in}}(\omega)|^2 \cdot |\tilde{g}(\omega)|^2 \quad (3.34)$$

3.3.3.2 Interpretation des Dämpfungsmusters

Anhand des küstennahen walisischen Hafren-Einzugsgebietes wiesen KIRCHNER ET AL. (2000) nach, dass Schwankungen der Chloridkonzentrationen im Niederschlag beim Durchfließen des Grundwassersystems gedämpft werden. Aus dem Dämpfungsmuster leiteten sie die Verweilzeitverteilung des Wassers in diesem System ab. Dabei gingen sie davon aus, dass ein Impuls dann stärker abgeschwächt wird, wenn die Verweilzeitverteilung im Einzugsgebiet im Vergleich zur Schwankung des Eingangssignals breit gefächert ist. Die Einzelimpulse, die sich auf verschiedenen Bahnen durchs Einzugsgebiet bewegen, gleichen sich in diesem Fall stärker aus, bevor sie den Gebietsauslass erreichen. Signale mit kleinen Frequenzen (und dementsprechend langen Perioden) durchlaufen das System dagegen fast ungedämpft. Je höher die Frequenz der Konzentrationsschwankungen im Niederschlag im Vergleich zur Verweilzeitverteilung im Einzugsgebiet ist, desto stärker ist die Abschwächung beim Durchfließen des Einzugsgebietes. Das hydrologische System wirkt in diesem Fall als ein sogenannter fraktaler Filter, der das Eingangssignal mit zunehmender Frequenz immer stärker abschwächt.

KIRCHNER ET AL. (2000) kamen zu dem Schluss, dass die von ihnen untersuchten walisischen Einzugsgebiete sich durch eine dem Potenzgesetz folgende Verteilung von Verweilzeiten auszeichnen. Diese Potenzverteilung bewirkt einerseits eine rasche und heftige Reaktion des Einzugsgebietes und andererseits eine lange Rückhaltezeit bezüglich der eingebrachten Stoffe. Durch einen Vergleich zwischen der Leistungsdichte von Inputimpuls und Outputsignal bei der jeweiligen Periode kann ermittelt werden, wie stark ein Impuls in der jeweiligen zeitlichen Größenordnung durch das System gedämpft wird. KIRCHNER ET AL. (2000) machten bezüglich des von ihnen untersuchten Datensatzes folgende Beobachtungen:

1. Die Leistungsdichtespektren des Niederschlags und des Abflusses sind, abgesehen von den Perioden, die kleiner sind als ein Monat, deckungsgleich (Abbildung 3.9a). Daraus ergibt sich, dass hydraulische Impulse im Einzugsgebiet lediglich in Zeitbereichen von weniger als einem Monat nennenswert gedämpft werden.
2. Die Leistungsdichtespektren der Chloridkonzentrationen (Abbildung 3.9b) zeigen dagegen eine Dämpfung, die schon in Größenordnungen von fünf bis zehn Jahren deutlich erkennbar ist. Abgesehen von einem Maximum bei Perioden von einem Jahr (welches durch die Saisonalität bedingt ist) zeigt das Leistungsdichtespektrum der Inputkonzentration keinen Trend oder stark auffällige Maxima, so dass die Inputfunktion als weißes Rauschen angesehen werden kann. Von statistischen Schwankungen abgesehen ist sie durch einen konstanten Wert darstellbar. Nach Gleichung 3.34 ergibt sich daraus, dass die Leistungsdichtespektren der Verweilzeitverteilung und der Outputkonzentration einander proportional sind.

Das Leistungsdichtespektrum der Outputfunktion zeigt ein über drei Größenordnungen reichendes „frequenzabhängiges Rauschen“ („ $1/f$ noise“). Dabei nähert sich das Leistungsdichtespektrum der Outputfunktion mit abnehmender Frequenz, also steigender Periode, dem Leistungsdichtespektrum der Inputfunktion in Form einer Potenzfunktion an. Bei doppeltlogarithmischer Auftragung kann der Verlauf des Leistungsdichtespektrums für den Output als Gerade mit einer Steigung von ungefähr $1/f^{0.97}$ angenähert werden. Aus diesen Beobachtungen leiteten KIRCHNER ET AL. (2000) ab, dass das Einzugsgebiet als fraktaler Filter wirkt, indem es ein weißes Rauschen in ein frequenzabhängiges Rauschen überführt.

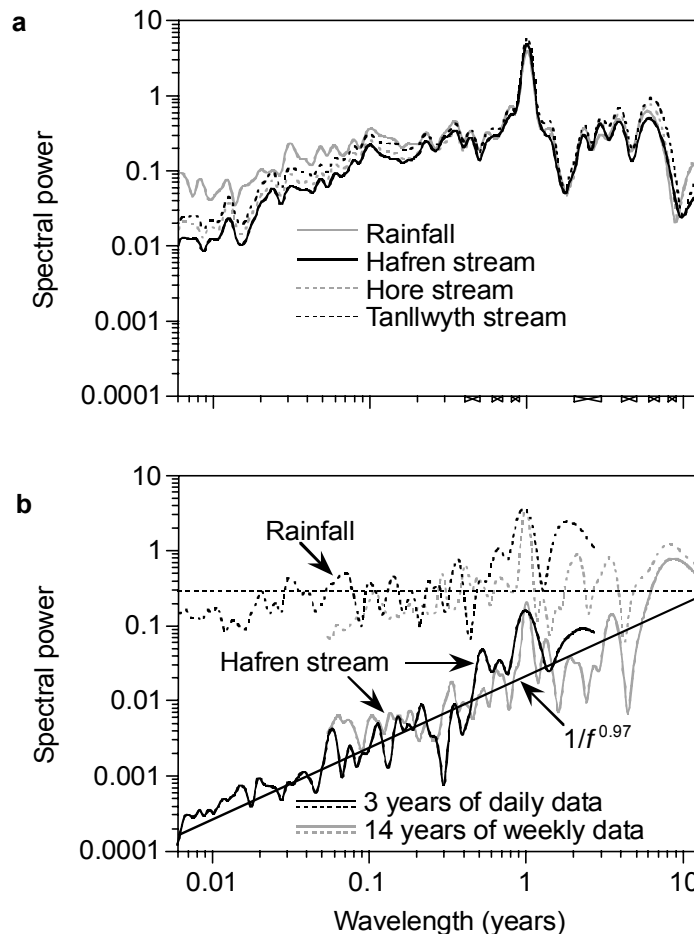


Abb. 3.9 Leistungsdichtespektren der Wasserflüsse und der Chlorid-Konzentrationen (KIRCHNER ET AL. 2000)

3.3.3.3 Modellierung des Dämpfungsmuster im Frequenz-Raum

In einem nächsten Schritt verwendeten KIRCHNER ET AL. (2000) die gewonnenen Erkenntnisse über das Dämpfungsverhalten des Systems zur Abschätzung der Verweilzeitverteilung. An das experimentell ermittelte Leistungsdichtespektrum der Outputkonzentration passten sie durch Kalibrierung mithilfe der Methode der kleinsten Quadrat eine empirische Verteilung an. Eine sehr allgemeine Verteilungsfunktion ist die Gamma-Verteilung, aus der auch die Verweilzeitverteilungen des Exponentialmodells und des Dispersionsmodells abgeleitet wurden (BARNES & TURNER 1998, 733). Hier wird die zweiparametrische Form angewandt (vgl. Gleichung 3.16):

$$g(t) = \frac{t^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} e^{-\frac{t}{\beta}} \quad (3.35)$$

mit	α	Formparameter [-]
	β	Skalierungsparameter [-]
	t	Verweilzeit [z.B. Monate]
	$\Gamma(\alpha)$	Wert der Gammafunktion von α [-]

Die Anpassung der theoretischen Gammaverteilung an die experimentelle Verteilung des Leistungsdichtespektrums erfolgt im Frequenzraum. Dazu muss die Gammaverteilung ebenfalls fouriertransformiert werden. Ihr Leistungsdichtespektrum lautet nach KIRCHNER ET AL. (2000):

$$|G(\omega)|^2 = (1 + 4\pi^2 \omega^2 \beta^2)^{-\alpha} \quad (3.36)$$

mit	ω	Frequenz [z.B. Jahr ⁻¹]
-----	----------	-------------------------------------

Die Steigung der an das Leistungsdichtespektrum des Konzentrationsoutputs angepassten Geraden beträgt $1/f^{2\alpha}$, woraus der Formparameter α abgeleitet werden kann. Durch Kalibrierung wird der zweite Parameter β nun so bestimmt, dass das Spektrum möglichst gut wiedergegeben wird. Wie Abbildung 3.10 zeigt, kann die lineare Steigung im Bereich von Wellenlängen unter einem Jahr durch das Leistungsdichtespektrum der Gammafunktion besser angenähert werden als mithilfe der Spektren der Exponential- oder Dispersionsmodelle.

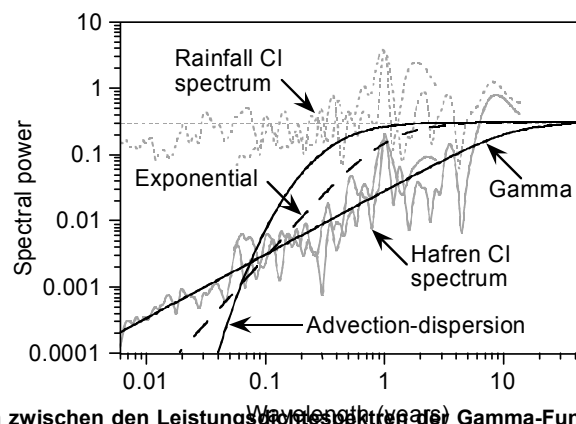


Abb. 3.10 Vergleich zwischen den Leistungsdichtespektren der Gamma-Funktion und denen des Exponential- bzw. des Dispersionsmodells (KIRCHNER ET AL. 2000)

Durch Rückwärtstransformation entsteht wieder die ursprüngliche Gammaverteilung, deren mittlere Verweilzeit durch das Produkt aus $\alpha * \beta$ gegeben ist (KIRCHNER ET AL. 2000). KIRCHNER ET AL. (2000) kalibrierten α mit 0,48 und β mit 1,8, so dass sich eine mittlere Verweilzeit von 0,9 Jahren berechnet. Diese Parameterkombination gibt der Verteilungsfunktion eine ganz andere Form als es nach dem Exponentialmodell oder dem Dispersionsmodell möglich wäre (Abbildung 3.11).

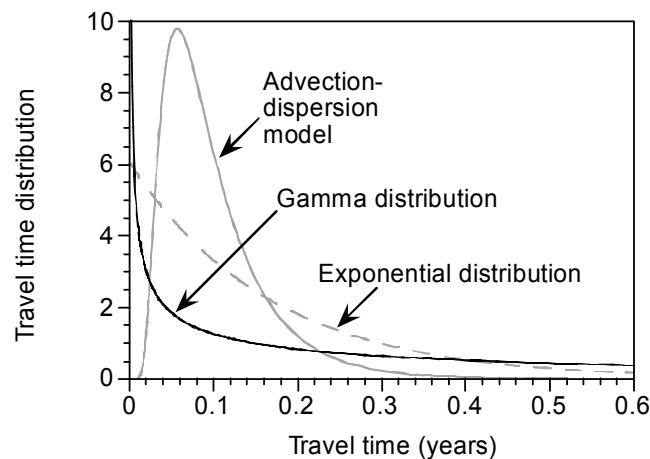


Abb. 3.11 Vergleich der rücktransformierten Verweilzeitverteilungen (KIRCHNER ET AL. 2000)

3.3.3.4 Bedeutung und Aussagekraft

Die von KIRCHNER ET AL. (2000) angepasste Verteilungsfunktion lässt sich durch folgende Prozesse deuten: Zunächst findet eine schnelle Freisetzung der eingetragenen Stoffe statt. Gleichzeitig zeigt das Einzugsgebiet aber ein hydrologisches Langzeitgedächtnis mit einem durch die Fließzeitverteilung bedingten lang andauernden Rückhalt. KIRCHNER ET AL. (2000) sahen Chlorid als konservativ an und kamen zu dem Schluss, dass der Rückhalt eines eingebrachten Stoffes durch Retardation infolge von Adsorptions- und Desorptionsprozessen noch verstärkt werden könnte.

Im Widerspruch zu dieser Annahme stehen die Ergebnisse von CHEN ET AL. (2002). Sie zeigten aufgrund von Modellierungen der Chlorid-Bilanz im selben Einzugsgebiet, dass Chlorid möglicherweise nicht konservativ ist, sondern Wechselwirkungen im Boden unterliegt. Ist dies tatsächlich der Fall, so können die Ergebnisse der Spektralanalyse bezüglich der mittleren Verweilzeit des Tracers nicht einfach auf das Wasser selber übertragen werden.

In ihrer Untersuchung wendeten CHEN ET AL. (2002) ein flächenkonzentriertes deterministisches Modell an, anhand dessen sie feststellen, dass unter der Annahme der Konservativität des Tracers Chlorid die Modellergebnisse sehr schlecht sind. Erst mit der Einführung von Parametern, die eine Wechselwirkung mit dem Boden sowie die Freisetzung von Chlorid infolge von Verwitterung beschreiben, wird das Modellergebnis verbessert. KIRCHNER (2002) weist allerdings darauf hin, dass die Kalibrierung der Parameter nicht auf zusätzlichen physikalischen Untersuchungen basiert und dass der durch sie vorausgesagte Chloridgehalt fast einen konstanten Wert annimmt, was gegen die Glaubwürdigkeit der Modellierungen spricht.

Zweifelsohne gibt es Bedingungen, bei denen es zu Wechselwirkungen von Chlorid mit dem Boden kommt. Allerdings kommt es nach KIRCHNER (2002) in den walisischen Küstengebieten zu einem sehr hohen Chlorid-Eintrag durch Niederschlag und Trockendepositionen, so dass es unklar ist, wo die in Frage kommende Menge Chlorid über die betreffenden Zeiträume hinweg gespeichert werden sollte.

KIRCHNER (2002) gesteht ein, dass die Chlorid-Bilanz für das Hafengebiet für die beiden Messstellen von Input und Output nicht aufgeht. Integriert man die Chlorid-Fracht im Abfluss am Gebietsauslass über die Zeit, so zeigt sich, dass die ausgetragene Menge Chlorid die in der Niederschlagsmenge erfasse um ca. 50 % übersteigt. Diese Diskrepanz lässt sich allerdings nicht gegen den Ansatz oder die Gültigkeit des Modells verwenden. Zum einen muss die Punktmessung

nicht repräsentativ für die mittlere Niederschlagsmenge des Gebietes sein. Würden dort mehr Niederschlag derselben Konzentration fallen, so würde sich die Diskrepanz verringern. Dieser Einwand wäre noch am ehesten für die Betrachtung der Wasserflüsse angebracht. Zum anderen kommt es zwischen den Niederschlagsereignissen zu Trockendepositionen, die von den Niederschlagsmessgeräten unterschätzt werden. Diese Abweichung könnte durchaus in der besagten Größenordnung liegen.

Die von KIRCHNER ET AL. (2000) vorgenommene differenzierte Betrachtung in Bezug auf schnelle und langfristige Reaktion ist von großer Bedeutung für die Beurteilung der Reaktion eines Einzugsgebietes auf einen Schadstoffeintrag. Auch dort muss neben Sofortmaßnahmen und Katastrophenschutz eine Langzeitplanung vorgenommen werden. KIRCHNER ET AL. (2000) sehen das Exponential- bzw. das Dispersionsmodell als unzureichend an, um das Verhalten dieses Einzugsgebietes adäquat zu charakterisieren. Aus dem Vergleich der Verteilungsfunktionen in Abbildung 3.11 wird zudem deutlich, dass die mittlere Verweilzeit allein das System nicht eindeutig beschreibt, da trotz identischer *mittlerer* Verweilzeiten die tatsächliche *Verteilung* der Verweilzeiten sehr unterschiedlich sind.

Auch bei Untersuchungen in anderen Einzugsgebieten, sowohl in der Gegend von Plymion (wo sich auch das Hafren-Einzugsgebiet befindet) als auch in anderen Regionen Nordamerikas und Nordeuropas, kamen KIRCHNER ET AL. (2001) zu Fließzeitverteilungen, die dem Potenzgesetz folgen. HAGGERTY ET AL. (2002) konnten in der hyporheischen Zone eines Gebirgsbaches in Oregon, USA, eine potenzgewichtete Verweilzeitverteilung nachweisen.

3.3.4 Prozessorientierte Deutung der potenzgewichteten Verweilzeitverteilung

Die Lumped-Parameter-Modelle stellen eine zeitliche Integration der einzelnen Inputkonzentrationen dar, wonach Wasser, das den Vorfluter zu einem bestimmten Zeitpunkt erreicht, als eine anteilige Mischung aus den Beiträgen vergangener Niederschlagsereignisse betrachtet wird. Hierbei wird allerdings das Einzugsgebiet räumlich gesehen als nulldimensionale "Black Box" modelliert, indem die verschiedenen Fließwege und Fließzeiten in einer einzigen Verteilungsfunktion zusammengefasst werden.

KIRCHNER ET AL. (2001) nahmen zusätzlich zu der zeitlichen Integration, die durch die Lumped-Parameter-Modelle geleistet wird, eine räumliche Integration des Niederschlages vor. Dabei gingen sie davon aus, dass jeder Tropfen, der auf einen Punkt im Einzugsgebiet fällt, einer identisch parametrisierten Fließzeitverteilung entsprechend der Advektions-Dispersionsgleichung nach KREFT & ZUBER (1978) unterliegt. Ein Niederschlagstropfen, der am Gewässerrand auftritt, wird als schnelle, heftige Reaktion wirksam, während ein Niederschlagsimpuls, der erst nach längerem Fließweg in den Vorfluter gelangt, durch Dispersion abgeflacht wird (Abbildung 3.12).

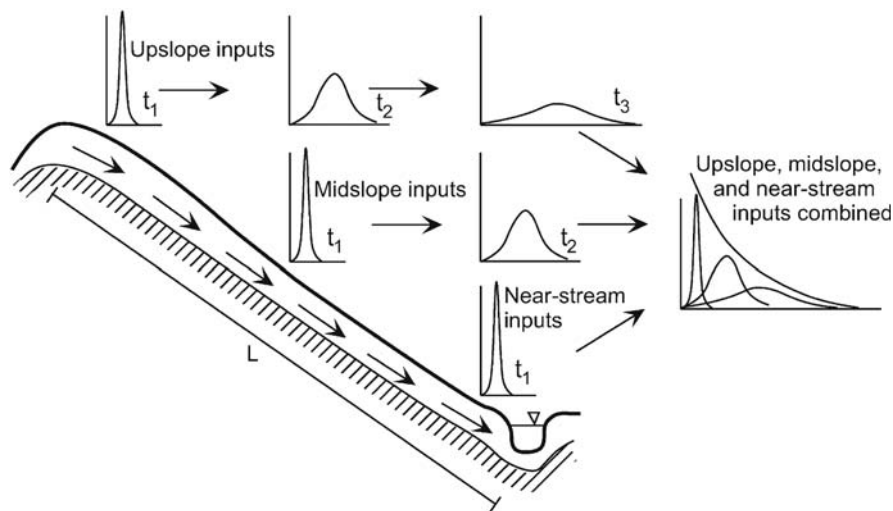


Abb. 3.12 Flächenhafte Integration des Dispersionsmodells (KIRCHNER ET AL. 2001)

Durch die Überlagerung der Fließprozesse von unterschiedlich weit vom Gebietsauslass entfernten Punkten leiteten sie eine Funktion ab, die der zweiparametrischen Gammaverteilung mit $\alpha=0,5$ äquivalent ist. Diese Ableitung eines prozessorientierten Erklärungsansatzes für die zuvor nur empirisch ermittelte Verteilungsfunktion beruhte auf folgenden Annahmen:

- Der laterale Fluss am Hang findet innerhalb eines relativ oberflächennahen Bereiches statt. Diese Annahme rechtfertigt die Eindimensionalität der Modellierung. In der Region Plymion, aus der die analysierten Datensätze stammen, findet der Großteil des Abflusses als hypodermischer Form statt. Verglichen mit der Hanglänge konzentriert sich dieser Prozess auf geringe Tiefen. Somit wird diese Annahme als akzeptable Vereinfachung angesehen.
- Es ist eine gewisse Verzweigung der Fließwege anzunehmen. Auch diese Bedingung ist im Untersuchungsgebiet erfüllt, da das Gewässernetz verzweigt ist und es entlang der Gewässerstrecke zu lateralen Zuflüssen in die Vorfluter kommt.
- Das Wasser muss sich mit einer konstanten Advektionsgeschwindigkeit bewegen. In der Realität bewegt sich Wasser allerdings gemäß einer heterogenen Geschwindigkeitsverteilung. Diesem Phänomen wird Rechnung getragen, indem die Zeit als Laufparameter der Integration durch den kumulierten Abfluss ersetzt wird. Das Leistungsdichtespektrum würde in diesem Fall als Funktion der Wellenlänge des kumulierten Abflusses und nicht der Zeit aufgetragen. KIRCHNER ET AL. (2000) zeigten, dass diese Änderung allerdings weder die Form des Integrals noch das Endergebnis signifikant verändert, so dass auch diese Vereinfachung gerechtfertigt erscheint.
- Der Dispersion muss ein erheblicher Anteil am Fließverhalten eingeräumt werden, was durch Festsetzung der Peclet-Zahl auf 1 erreicht wird. KIRCHNER ET AL. (2001) zeigten, dass für $Pe > 1$ das Leistungsdichtespektrum nicht nachgebildet wird, während die Modellergebnisse für $Pe < 1$ unrealistisch lange Verweilzeiten ergeben. Die in der Literatur angegebenen Werte (NEUMANN ET AL. 1990, zit. in KIRCHNER ET AL. 2001) liegen meist in der Größenordnung von 10, wobei die Spannweite von 1 bis 100 reicht. Mit der Festlegung von Pe auf 1 lagen KIRCHNER ET AL. (2001) am äußersten Ende der in der Literatur aufgeführten Werte. Für $Pe=1$ erreicht z.B. die Dispersivität bei lateralen Fließprozessen am Hang die Größenordnung der

Hanglänge. Dies erklärten KIRCHNER ET AL. (2001) für ihr Untersuchungsgebiet durch eine räumlich extrem heterogene Durchlässigkeitsverteilung mit extrem schnellen und extrem langsamen Fließwegen in einem Kluftgrundwasser-dominierten Fließsystem mit Makroporenfluss. Als einen weiteren Hinweis auf die Heterogenität der Abflussbildung im Untersuchungsgebiet sahen sie die allgemein beobachtete hohe räumliche und zeitliche Variabilität von Abfluss und Hydrochemie an. MALOSZEWSKI (2002) ist der Ansicht, dass eine Peclet-Zahl unter 2 unrealistisch ist.

Das Problem der Deutung solch geringer Peclet-Zahlen besteht z.T. darin, dass sie bisher meist für Säulenversuche und Punkt-zu-Punkt-Messungen angewandt wurden. Es ist ungeklärt, welche Werte für Pe realistisch sind, wenn über die Fläche des EZG integriert wird. Durch die verschiedenen Fließwege und Abflussmechanismen sowie die unterschiedliche Entfernung der einzelnen Punkte zum Gebietsauslass wird eine zusätzliche Komponente der Heterogenität eingeführt. Dieser Effekt wurde bei der Lumped-Parameter-Modellierung schon erkannt. So wird z.B. dem Dispersionsparameter eingestanden, dass er die räumliche Integration über das Einzugsgebiet, die das flächenkonzentrierte Modell nicht leisten kann, „auffängt“ und deshalb Werte annimmt, deren hoher Beträge im streng physikalischen Sinn nicht zu erklären sind.

KIRCHNER ET AL. (2001) kamen zu dem Schluss, dass die von ihnen abgeleitete mathematisch-statistische Verteilungsfunktion nicht nur „phänomenologisch adäquat“, sondern auch „mechanistisch plausibel“ sei. Durch die räumliche Integration entwickelten sie eine Modellvariante, die einerseits über die Flächenkonzentration hinausgeht, andererseits aber nicht die Parametrisierung verlangt, wie sie für eine zellenweise oder flächenverteilte Modellierung benötigt wird. Neben diesem von ihnen getesteten Ansatz stehen noch weitere zur Verfügung, deren Eignung zur prozessorientierten Deutung der potenzverteilten Verweilzeiten noch zu prüfen ist.

3.3.5 Datenanforderungen für die Spektralanalyse

FENG ET AL. (2002) untersuchten die Datenanforderungen für die Ausführung einer Spektralanalyse mithilfe der Leistungsdichtespektren zur Bestimmung von mittleren Verweilzeiten. Unter Berücksichtigung der durch KIRCHNER ET AL. (2000) beschriebenen schnellen, heftigen Reaktion des Einzugsgebietes auf einen hydrochemischen Impuls sowie der sehr trägen, langsamen Freisetzung der eingetragenen Stoffe schlugen sie idealerweise einen Datensatz mit einem Umfang von mindestens einer Dekade und einer Auflösung von mindestens einem Messwert pro Tag vor. Gleichzeitig räumten sie ein, dass nach ihrem Wissen bislang kein solcher Datensatz für hydrochemische oder Isotopentracer vorliegt.

Die Länge des zur Verfügung stehenden Datensatzes ist in zweifacher Hinsicht ein limitierender Faktor: Einerseits wird die maximale Wellenlänge, über die das Leistungsdichtespektrum eine Aussage macht, durch die Länge des untersuchten Zeitraums begrenzt. Andererseits führt eine zu kurze Datenreihe zu sehr großen Schwankungen im längerperiodischen Bereich, da die Mittelung über weniger Zyklen stattfindet. Dies verringert die Aussagekraft und die Abschätzbarkeit von Trends.

Die zeitliche Auflösung der Eingangsdaten bestimmt dagegen die Breite des Leistungsdichtespektrums in Richtung des hochfrequenten Bereiches. Hier ist es erstrebenswert, Perioden zu analysieren, die deutlich kürzer sind als ein Jahr. Diese können wichtige Informationen über das kurzfristige Verhalten der Abflussprozesse enthalten. Des weiteren lässt sich auf diese Weise das Dämpfungsverhalten des Einzugsgebietes besser erkennen. Aufgrund der Saisonalität der

Abflussbildungsprozesse findet sich bei der Periode von einem Jahr meist ein Maximum der Leistungsdichte, so dass die ggf. frequenzabhängige Dämpfung nur dann deutlich wird, wenn die Perioden bis deutlich unter einem Jahr fortgesetzt werden.

FENG ET AL. (2002) machten auf eine Schwierigkeit aufmerksam, die sich aus der möglichen Inkonsistenz hochfrequenter Messungen ergeben kann. Bei hydrologischen Untersuchungen werden häufig neben langfristigen Routinemessungen auch Intensivmesskampagnen in Zeiträumen erhöhten Abflusses durchgeführt. Hierbei ist zu beachten, dass diese Messwerte nur das Verhalten des Systems während dieser Ereignisse widerspiegeln und deshalb möglicherweise nicht für das Gesamtverhalten des Systems repräsentativ sind.

FENG ET AL. (2002) zeigten an dem von KIRCHNER ET AL. (2000) verwendeten Datensatz, dass die bei erhöhtem Abfluss erhobene Zeitreihe („highflow daily data“ in Abbildung 3.13) der Chloridkonzentrationen eine erhöhte Leistungsdichte besitzt, so dass das Dämpfungsverhalten im hochfrequenten Bereich durch die Aufnahme dieser hochaufgelösten Messdaten in die Spektralanalyse verzerrt wurde. Sie schlugen vor, Messdaten unterschiedlicher Auflösung nicht unkritisch zu kombinieren, sondern neben dem kompletten Datensatz auch die Teilmengen separat zu analysieren. Obwohl durch die LOMB-SCARGLE-Transformation die Möglichkeit der Analyse einer nicht-äquidistanten Zeitreihe besteht, wies KIRCHNER (2002) darauf hin, dass mit steigender Inhomogenität (wie sie durch die Aufnahme von Ergebnissen aus Intensivmesskampagnen in den Datensatz bewirkt wird) die Analyseergebnisse zunehmend mit Fehlern behaftet sind.

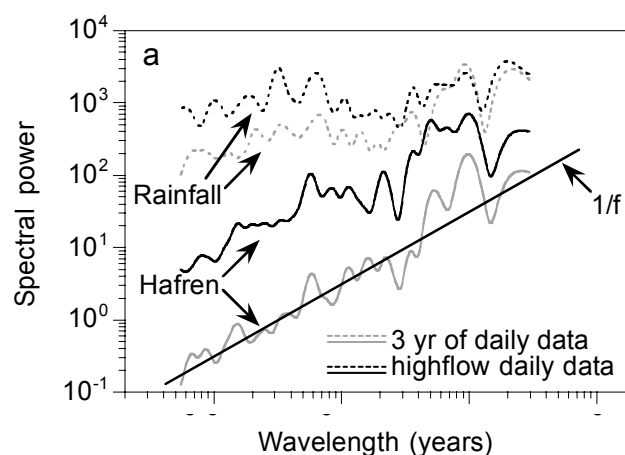


Abb. 3.13 Leistungsdichtespektren hochfrequenter Messungen im Vergleich zu Leistungsdichtespektren der Routinemessungen (FENG ET AL. 2002)

Schließlich birgt eine zu geringe zeitliche Auflösung die Gefahr der Entstehung von „Aliasing“-Artefakten: Sofern die Frequenz der Messungen niedriger ist als die des Prozesses, kommt es zu einer Verschiebung der wahren Schwingungsverteilung zum Langwelligen und zu einer Verzerrung des Spektrums (MULLER & MACDONALD 2000).

3.3.6 Modellierung mithilfe von Spektralanalysen

Zur Bestimmung der mittleren Verweilzeit aus der Spektralanalyse wurde angestrebt, die von KIRCHNER ET AL. (2000) angewandte Methode auf das Bruggagebiet zu übertragen. Da die Datensätze der Input- und Output-Konzentration keine äquidistanten Messwerte aufweisen, wurde die

Transformation der Daten mithilfe der von KIRCHNER ET AL. (2000) weiterentwickelten LOMB-SCARGLE-Transformation (SCARGLE 1982) vorgenommen, nach der aus dem Datensatz zunächst eine Reihe äquidistanter Werte erzeugt wird. Diese Werte werden dann fouriertransformiert.

Dabei ergab sich die Schwierigkeit, dass die gängigen Programme eine Äquidistanz in Bezug auf die Frequenz herstellen. Dies führte allerdings dazu, dass bei der Betrachtung der Perioden eine sehr starke Ungleichverteilung auftrat, so dass nur sehr wenige Werte im langperiodischen Bereich des Spektrums lagen und eine Auswertung kaum möglich war. Die Spektralanalyse wurde deshalb von J. W. KIRCHNER, Professor an der *University of California, Berkeley*, durchgeführt. Er hat einen selbst entwickelten und verbesserten Programmcode geschrieben, der die periodisch-äquidistante Erzeugung synthetischer Eingangswerte ermöglicht.

Für das Leistungsdichtespektrum der $\delta^{18}\text{O}$ -Konzentrationen in der Input- bzw. der Outputfunktion wurde ein Frequenzbereich von 12/Tag bis 0,001/Tag gewählt. Dies entspricht einer Periode von 2 Stunden bis 1000 Jahren. Mithilfe der Transformation wurden 500 äquidistante Punkte des Leistungsdichtespektrums berechnet. Dabei wurden jeweils zwei Datensätze analysiert: Während der erste Datensatz allein aus Messwerten der Routinemessungen bestand, wurden in den zweiten Datensatz auch die Messwerte aufgenommen, die aus den Intensivkampagnen stammen. Für die Spektralanalyse der Niederschlags- und Abflussmengen wurde ein Frequenzbereich von 0,0003/Tag bis 0,07/Tag ausgewählt. Dies entspricht einer Periode von 333,3 bzw. 14,29 Tagen. Es wurden 1000 äquidistante Werte des Leistungsdichtespektrums berechnet.

Die Glättung des Leistungsdichtespektrums wurde mithilfe eines gleitenden Mittelwertes vorgenommen, wobei die Glättungsfunktion eine GAUß'sche Normalverteilung darstellte. 68% des Gewichts befand sich in einem Bereich von $\pm 0,1$ Logarithmus-Periode.

3.4 Fazit

Die Lumped-Parameter-Modelle bieten eine der vorliegenden Datendichte angepasste und somit effiziente Möglichkeit, zusammen mit geeigneten Input- und Outputfunktionen durch die Lösung des Inversproblems die mittlere Verweilzeit von Wasser in einem Einzugsgebiet abzuschätzen.

Ein entscheidender Schritt in der Modellierung mithilfe der Fließmodelle besteht in der Gewichtung der isotopischen Zusammensetzung mit dem tatsächlich zur Grundwasserneubildung beitragenden Niederschlagsanteil. Es wurde die grundsätzliche Schwierigkeit aufgezeigt, die für die isotopische Betrachtung relevanten Prozesse mithilfe von Netto-Wasserbilanzen im Sinne des Infiltrationskoeffizienten zu simulieren. Von besonderer Schwierigkeit sind dabei Interzeptions-, Schnee- und Bodenspeicher, deren Auswirkungen auf die Isotopengehalte einerseits noch wenig verstanden und andererseits in einem flächenkonzentrierten Modell verhältnismäßig schwer zu integrieren sind. Anhand der vorhandenen Daten sollen Ansatzpunkte für die weitere Forschung aufgedeckt werden.

Durch die in der Systemstruktur enthaltenen Annahmen und Vereinfachungen sowie durch die Erstellung der flächenkonzentrierten Eingangsdaten aus Messdaten wird ein bislang wenig quantifiziertes Maß an Unsicherheit in das Modell eingebracht. Da eine direkte Abschätzung der Fehlerwahrscheinlichkeit aufgrund ungenügender Daten für das Bruggagebiet nicht möglich erscheint, wurde ein indirekter Ansatz gewählt: Durch den Vergleich der Modellergebnisse und der Parametersensitivität verschiedener plausibler Kombinationen an Input- und Outputdatensätzen wurde versucht, Rückschlüsse auf die zu erwartende Spannweite von Ergebnissen und damit die Fehlerbreite zu ziehen. In einem zweiten Schritt wurde eine verbesserte Integration des räumlichen Prozessverständnisses in das Modell angestrebt.

Die Spektralanalyse bietet einen von den Fließmodellen unabhängigen Ansatz zur Abschätzung der Verweilzeit. Wie gezeigt wurde, lassen sich auch die durch diese zunächst empirische Methode erzielten Ergebnisse durch ein hydrologisches konzeptionelles Modell deuten. Durch seine räumliche Integration der Verweilzeitverteilungen an jedem Punkt im Einzugsgebiet stellt dieses Modell eine alternative Betrachtungsweise zum flächenkonzentrierten Ansatz dar.

Allerdings beinhaltet auch dieser Ansatz methodisch und datentechnisch bedingte Unsicherheiten. Hierbei seien stellvertretend das Problem der Repräsentativität der Intensivkampagnen, der „Aliasing-Effekt“ und die durch die Transformation von nicht-äquidistanten Messwerten zustande kommenden Fehler genannt. Aus diesem Grund erscheint es vernünftig, diese Methode in Kombination mit den klassischen Modellen zu verwenden, um somit einen gesicherteren Gesamteindruck über die Verteilung der Fließprozesse im Einzugsgebiet zu bekommen.

4 Eingangsdaten

4.1 Datenbeschaffung

Seit Sommer 1995 wird im Brugga-Einzugsgebiet ein intensives hydrologisches Messprogramm betrieben. Zur Messung des Niederschlages wurden zu Beginn der Messkampagne neben den amtlichen Wetterstationen des Deutschen Wetterdienstes (DWD) auf dem Feldberg und des Umweltbundesamtes (UBA) auf dem Schauinsland drei eigene Niederschlagsschreiber betrieben. Seit Sommer 1994 ist das eigene Messnetz auf die Klimastation „St. Wilhelm“ reduziert.

Für die tracerhydrologischen Untersuchungen wurden im Zeitraum 1995 bis 1997 bis zu 25 Niederschlagssammler im Untersuchungsgebiet betrieben, die ein- bis zweiwöchentlich beprobt wurden, um den $\delta^{18}\text{O}$ -Wert im Niederschlag zu bestimmen. Aufgrund von zugeschnittenen Probebehältern waren im Winter allerdings z.T. keine Messungen möglich. Seit 1997 wird der Niederschlag über die Klimastation „St. Wilhelm“ bestimmt.

Der Abfluss am Gebietsauslass wurde über den amtlichen Pegel „Oberried“ (434 m NN) bestimmt. Der Wasserstand wurde unter Verwendung einer Drucksonde bzw. seit 2001 unter Verwendung eines Radarpegels bestimmt und über eine geeignete Wasserstands-Abfluss-Beziehung in den Abfluss umgerechnet.

Am Pegel „Oberried“ wurden im Zeitraum Juli 1995 bis Februar 2002 im Abstand von ein bis zwei Wochen aus der fließenden Welle Wasserproben entnommen und deren $\delta^{18}\text{O}$ -Wert bestimmt. Für die Quelle „Zipfeldobel“ wurde die bestehende Messreihe von 03.06.95 bis 30.10.96 während des Zeitraums 29.10.98 bis 03.05.02 erweitert.

Mithilfe der Massenspektrometrie können Isotope unterschiedlicher Masse aufgrund ihres Verhaltens im elektromagnetischen Feld getrennt werden. Die Bestimmung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der Wasserproben fand im Institut für Hydrologie mithilfe des Massenspektrometers *ThermoQuest-Finnigan MAT*, Typ *delta S* statt. Dabei wurden die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im allgemeinen mit einer Unsicherheit von höchstens $\pm 0,2 \text{ ‰}$ bestimmt. Lediglich im Sommer 1998 muss aufgrund eines Gerätedefektes ein Fehler von $\pm 0,4 \text{ ‰}$ angenommen werden. In den letzten Jahren der Messungen war die Genauigkeit sogar deutlich besser als $\pm 0,2 \text{ ‰}$ (KÖNIGER 2002).

Es konnte weiterhin auf diverse andere Messreihen und Modellierungsergebnisse zurückgegriffen werden, die im Rahmen verschiedener Forschungsprojekte im Bruggagebiet gesammelt wurden. An gegebener Stelle wird in dieser Arbeit darauf verwiesen werden. Zur Erweiterung der Inputfunktion wurden Daten des *Global Network for Isotopes in Precipitation* (GNIP) der *International Atomic Energy Agency* verwendet (IAEA 2001).

4.2 Datenaufbereitung für die Modellierung mithilfe von Fließmodellen

4.2.1 Erstellung der Inputfunktion

In Anlehnung an die Arbeit von UHLENBROOK (1999, 66ff) wurden, in Abhängigkeit von der Datenlage, für verschiedene Zeiträume eine Reihe von Arbeitsschritten durchgeführt. Für die Interpolation bzw. Korrektur der Daten konnte auf einige bereits ermittelte Beziehungen zurückgegriffen werden. UHLENBROOK (1999) bestimmte einen mittleren Temperaturhöhengradienten von $-0,35 \text{ °C}/100 \text{ m}$. Den engsten Zusammenhang ($R^2=0,86$) zwischen der Niederschlagsmenge N [mm] und der Höhenlage h [m NN] bestimmt er für die Funktion $N=2088(1-e^{-0,0025h})$.

Als relevante Isotopeneffekte im Einzugsgebiet wurden Temperatur-, Höhen- und Mengeneffekt ausgewiesen. Auf den Temperatureffekt wird im Rahmen der Bestimmung der Eingangsdaten eingegangen. Die mittlere Abhängigkeit des $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes von der Höhenlage h [m NN] ist durch die Gleichung $\delta^{18}\text{O}=[-6,501-(0,2178h/100\text{m})]\text{‰}$ gegeben. Bei seiner Untersuchung des Höheneffektes während neun Ereignissen zwischen dem 29.07.1998 und dem 14.09.1998 beobachtete FREY (1999) eine Schwankung des Gradienten zwischen $-0,11$ und $-0,45 \text{ ‰}/100\text{m}$. Der Mengeneffekt ist äußerst variabel und wurde in der Größenordnung von bis zu 10 ‰ während eines konvektiven Ereignisses beobachtet.

Die Inputfunktion für das Bruggagebiet wurde aus $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerten zusammengestellt, die in ihrer zeitlichen Auflösung in Intervallen von zwei bis 58 Tagen vorlagen. Während UHLENBROOK (1999) auf Monatsbasis modellierte, wurden hier Halbmonatsmittel erstellt. Die erste Hälfte des Monats wurde dem 8., die zweite Hälfte dem 23. Tag des jeweiligen Monats zugeordnet.

Zeitraum 1: Januar 1971 bis September 1993

Niederschlagsmenge

Zur Berechnung der Niederschlagsmengen aus den Messwerten wurden folgende Rechenschritte vorgenommen:

- Aufsummierung der Tageswerte der Station „Feldberg“ zu Halbmonatssummen
- Korrektur der Halbmonatssummen in Bezug auf den windbedingten Messfehler nach Empfehlungen des DWD (RICHTER 1995, zit. in UHLENBROOK 1999, 127) für freie Gipfelstationen über 700 m NN (Tabelle 4.1)

Tab. 4.1 Niederschlags-Korrekturfaktoren für freie Gipfelstationen über 700 m NN

Monat	Jan	Feb	März	Apr	Mai	Jun	Jul	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez
Korrekturfaktor	1,343	1,350	1,314	1,241	1,122	1,092	1,090	1,089	1,103	1,149	1,243	1,286

- Korrektur der Niederschlagshöhen von der Höhe der Messstation „Feldberg“ auf die mittlere Einzugsgebietshöhe (986 m NN) unter Verwendung des Höhengradienten der Niederschlagsmenge (UHLENBROOK 1999, 128):

$$\frac{N_{\text{Brugga}}}{N_{\text{Feldberg}}} = \frac{1 - e^{-0,0026 \cdot 986}}{1 - e^{-0,0026 \cdot 1480}} = 0,94$$

(4.1)

Isotopische Zusammensetzung

Die ersten Messdaten der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages im Bruggagebiet liegen ab Oktober 1993 vor. Da angenommen wurde, dass während des Modellierungszeitraums auch älteres Wasser am Abfluss beteiligt war, wurde für den Zeitraum von 1971 bis 1993 eine synthetische Inputfunktion erstellt. Als erster Ansatzpunkt diente eine Regression zwischen der mittleren bodennahen Lufttemperatur im Bruggagebiet und dem mittleren $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Niederschlages des entsprechenden Zeitraums. Dabei wurden 160 Halbmonatsmittelwerte im Zeitraum Juli 1995 bis Februar 2002 ausgewertet. Das Ergebnis dieser Analyse ist in Abbildung 4.1 zu sehen.

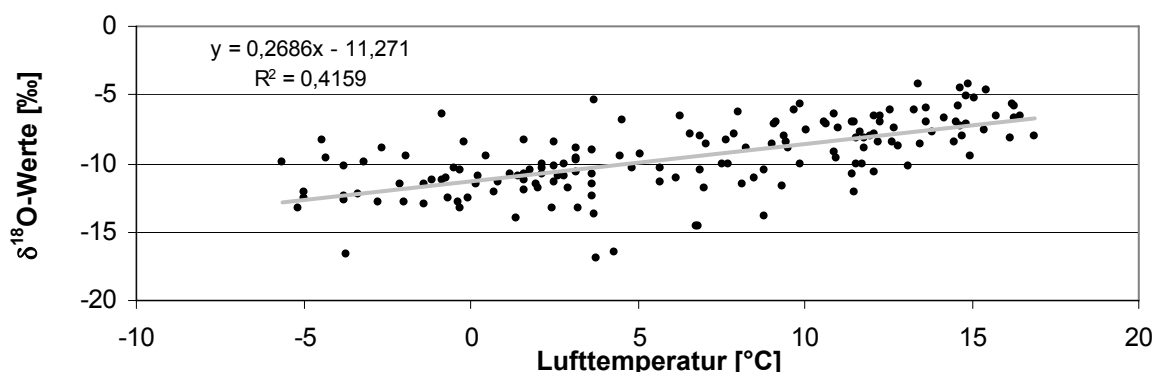


Abb. 4.1 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag als Funktion der mittleren bodennahen Lufttemperatur für das Bruggagebiet

Die Richtung des Zusammenhanges entspricht den Erwartungen in Bezug auf den Temperatureffekt. Allerdings besteht zwischen diesen beiden Größen nur ein mäßig starker Zusammenhang ($R^2=0,42$). Damit bleibt das Bestimmtheitsmaß weit hinter dem von CLARK & FRITZ (1997, 64) bestimmten Wert von 0,82 zurück (vg. Abschnitt 3.1.4). Diese Beobachtung bestätigt, dass im Untersuchungsgebiet die bodennahe Lufttemperatur nur eine Hilfsvariable für die eigentliche entscheidende Größe, die Lufttemperatur in der Höhe der Niederschlagsentstehung, sowie für die relevanten Prozesse während des Fallens des Niederschlages ist.

Nach VITVAR (1998, 32) besteht in Mitteleuropa während der Sommermonate eine engere Beziehung zwischen der bodennahen Lufttemperatur und dem $\delta^{18}\text{O}$ -Wert als in den Wintermonaten. Im Sommer kommt es bevorzugt zu konvektiven Niederschlagsereignissen, bei denen die Temperatur bei der Niederschlagsbildung den Lufttemperatur-Verhältnissen am Boden ähnlicher ist als bei den frontalen Niederschlagsereignissen, die im Winter dominieren. Zudem ist die bodennahe Lufttemperatur nicht die einzige Regressionsgröße, die einen Einfluss auf die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte hat.

Um das Bestimmtheitsmaß zu verbessern, wurde getestet, in wie weit der Anteil der erklärten Streuung durch einen multiplen Regressionsansatz erhöht werden kann. Dazu wurde neben der Abhängigkeit zur bodennahen Lufttemperatur T ein möglicher Zusammenhang mit der Niederschlagsmenge N getestet. Dieser multiple Regressionsansatz hatte die Form:

$$\delta^{18}\text{O} = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot N + a_3 \cdot T \cdot N \quad (4.1)$$

mit	a_0, a_1, a_2, a_3	Regressionskoeffizienten [-]
	T	Bodennahe Lufttemperatur [°C]
	N	Niederschlagssumme [mm]

Diese differenziertere Betrachtung erbrachte allerdings nur eine geringe Zunahme des Bestimmtheitsmaßes auf 0,45. Auch VITVAR (1998, 32) konnte keine Verbesserung der Regressionsgüte feststellen, als er den Niederschlag in einer Regression zu berücksichtigen versuchte, indem er bei einer mengendifferenzierteren Betrachtung nur die Mitteltemperaturen der Tage in die Regression einbezog, an denen mindesten 1 mm Niederschlag gefallen waren. Es muss folglich angenommen werden, dass es zu einer komplexen Überlagerung verschiedener Faktoren (wie z.B. Luftmassenherkunft und bisheriger Verlauf des Niederschlagsereignisses) kommt. Diese sind in ihren Auswirkungen mithilfe der vorliegenden Messdaten nicht quantifizierbar.

Aufgrund des geringen Bestimmtheitsmaßes der obigen Regressionsbeziehung wurden die Niederschlagsdaten weiterer Messstationen in der Umgebung des Untersuchungsgebietes ausgewertet. Zur Verfügung standen dabei die Stationen „Stuttgart-Bad Cannstatt“ (315 m NN), „Karlsruhe“ (120 m NN), „Weil am Rhein“ (249 m NN) und „Konstanz“ (447 m NN), für die monatlich aufgelöste Daten über Niederschlag und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der Datenbank des *Global Network for Isotopes in Precipitation* (GNIP) der *International Atomic Energy Agency* (IAEA 2001) entnommen wurden. Tabelle 4.2 zeigt den Umfang und den Zeitraum der erhältlichen Daten. Die Ergebnisse der einfachen bzw. multiplen Regression sind Tabelle 4.3 zu entnehmen.

Tab. 4.2 Übersicht über die zur Verfügung stehenden GNIP-Stationen

Station	Zeitraum der Messungen	Anzahl der Messwerte
Konstanz	Jan 1978 bis Dez 1999	240
Weil am Rhein	Jan 1988 bis Dez 1999	122
Karlsruhe	Jan 1977 bis Dez 1999	176
Stuttgart	Jan 1961 bis Dez 1999	345

Tab. 4.3 Ergebnisse der linearen Regression für die verschiedenen GNIP-Stationen

<i>Station</i>	<i>Ergebnisse der einfachen bzw. der multiplen Regressionsanalyse</i>	<i>R²</i>
Konstanz	$\delta^{18}\text{O} = -13,21 + 0,338T$	0,55
	$\delta^{18}\text{O} = -12,99 + 0,356T - 0,005N - 0,0002NT$	0,56
Weil am Rhein	$\delta^{18}\text{O} = -11,70 + 0,322T$	0,55
	$\delta^{18}\text{O} = -9,895 + 0,248T - 0,031N - 0,0014NT$	0,60
Karlsruhe	$\delta^{18}\text{O} = -10,78 + 0,271T$	0,47
	$\delta^{18}\text{O} = -11,05 + 0,352T - 0,004N - 0,0013NT$	0,50
Stuttgart	$\delta^{18}\text{O} = -10,95 + 0,284T$	0,45
	$\delta^{18}\text{O} = -10,41 + 0,321T - 0,016N - 0,0010NT$	0,48

Für alle vier Stationen konnte durch Einbezug der Niederschlagsmenge in die Regression das Bestimmtheitsmaß gegenüber der einfachen Regression erhöht werden. Sowohl für die multiplen wie auch für die einfachen Regressionsgleichungen auf der Basis der GNIP-Daten liegen die Bestimmtheitsmaße über dem Wert, der mithilfe der multiplen Regression im Bruggagebiet erreicht werden konnte. Aus diesem Grund wurde angestrebt, die neu erstellten Regressionsbeziehungen ins Untersuchungsgebiet zu übertragen. Hierzu wurde zunächst die geeignetste Gewichtung der vier Regressionsbeziehungen gesucht. Mehrere plausible Gewichtungsansätze wurden miteinander verglichen.

Die Gewichtung 1 wurde anhand des Kehrwertes des quadratischen Abstandes der Messstation zum Untersuchungsgebiet vorgenommen. Von den vier zur Verfügung stehenden Messstationen kommen die Stationen „Karlsruhe“ und „Weil am Rhein“ in ihren geographisch-klimatischen Gegebenheiten dem Untersuchungsgebiet am nächsten. Sie wurden deshalb in dem Ansatz 2 mit dem doppelten Gewicht versehen. Die dritte Gewichtung folgte dem von UHLENBROOK (1999, 67) vorgeschlagenen Ansatz, nach dem die Regressionsgleichung für die Station „Konstanz“ ausgeschlossen wurde, da sich ihre Geradensteigung stark von denen der anderen Stationen unterschied.

Viertens wurde allein die Regression für die nächstgelegene Station, „Weil am Rhein“, verwendet. In die Gewichtung 5 gingen die Ergebnisse der beiden Regressionsgleichungen mit dem höchsten Bestimmtheitsmaß, „Konstanz“ und „Weil am Rhein“, zu gleichen Teilen ein. Als sechste Gewichtung wurde eine Mittelung der Ergebnisse aus den Regressionsgleichungen der Stationen „Karlsruhe“ und „Weil am Rhein“ vorgenommen. Als siebter Ansatz wurde schließlich die für das Bruggagebiet erstellte Regressionsgleichung zu Vergleichszwecken aufgegriffen.

Zur Bewertung der verschiedenen Gewichtungsansätze wurden die mit den Regressionsgleichungen berechneten $\delta^{18}\text{O}$ -Werte für die Halbmonate der Zeitabschnitte III und IV (Juli 1995 bis Februar 2002) mit den Mittelwerten für die jeweiligen Halbmonate verglichen, die aufgrund der tatsächlich gemessenen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte berechnet worden waren. Als Gütemaß wurde der von MALOSZEWSKI & ZUBER (1996) vorgeschlagene σ -Wert verwendet, der folgendermaßen definiert ist:

$$\sigma = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (c_i - c_{i,ber})^2}}{n} \quad (4.2)$$

c_i	gemessene Konzentration im Intervall i [‰]
$c_{i,ber}$	berechnete Konzentration im Intervall i [‰]
n	Gesamtzahl der Messintervalle [-]

Der σ -Wert ist ein Maß für die mittlere Abweichung der Simulation vom Messwert. Er kann einen Wertebereich von 0 bis unendlich annehmen, wobei kleinere σ -Werte eine bessere Modellanpassung anzeigen.

Tabelle 4.4 zeigt eine Übersicht über die sich für die oben genannten Gewichtungsansätze ergebenden σ -Werte. Hierbei ist die Anpassungsgüte des Modells 7 („Brugga“) nur als Referenzwert gedacht. Dieser σ -Wert ist nur mit Einschränkungen mit denen der anderen Modelle vergleichbar, da für dieses Modell jeweils der Kalibrierungszeitraum und –datensatz mit dem der Validierung übereinstimmt. Wie zu erkennen ist, wurde durch die Modelle 3 und 6 eine fast ähnlich gute Darstellung des tatsächlichen $\delta^{18}\text{O}$ -Verlaufs erzielt wie mit dem im Bruggagebiet selber erstellten Modell, obwohl eine räumliche und zeitliche Übertragung der Regressionsbeziehung stattfand.

Obwohl die Bestimmtheitsmaße der multiplen Regressionsbeziehungen über denen der einfachen Regression lagen (Tabelle 4.3), zeigte sich in der Validierung, dass mit der einfachen Temperaturregression für die Modelle 1 bis 6 bessere Ergebnisse (geringere σ -Werte) erzielt wurden (Tabelle 4.4). Entgegen dieses Trends zeigt der multiple Regressionsansatz für das im Bruggagebiet erstellte Modell (Gewichtung 7 in Tabelle 4.4) eine bessere Anpassung. Während die Berücksichtigung der Niederschlagsmenge innerhalb des lokalen Datensatzes zu einer verbesserten Erklärung der Streuung beiträgt, kommt es bei Übertragung dieser Beziehung in das Untersuchungsgebiet zu geringeren Bestimmtheitsmaßen als mit der einfachen Regression. Aus dieser Beobachtung wird geschlossen, dass sich der Mengeneffekt besonders schlecht regional übertragen lässt.

Tab. 4.4 Anpassungsgüte der verschiedenen Modell-Kombinationen

Gewichtung	1	2	3	4	5	6	7
Konstanz	0,15	0,08	0,00	0,00	0,50	0,00	0,00
Weil am Rhein	0,69	0,78	0,33	1,00	0,50	0,50	0,00
Karlsruhe	0,09	0,10	0,33	0,00	0,00	0,50	0,00
Stuttgart	0,07	0,04	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00
„Brugga“	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00
Anpassungsgüte (σ) über T	0,163	0,162	0,156	0,161	0,182	0,156	0,155
Anpassungsgüte (σ) über T und N	0,225	0,234	0,182	0,263	0,215	0,192	0,150

Aufgrund der guten Ergebnisse wurde entschieden, eine der in Tabelle 4.4 zusammengestellten Kombinationen der einfachen Regressionsgleichungen für die Berechnung der synthetischen Inputfunktion zu verwenden. Da vermutet wurde, dass die Station „Stuttgart“ aufgrund

ihrer topographischen Lage den Gegebenheiten im Untersuchungsgebiet am wenigsten entspricht, wurde bei der Auswahl zwischen Modell 3 und 6 letzteres gewählt. Entsprechend dieses Ergebnisses wurde also eine anteilsgleiche Gewichtung der Ergebnisse der Stationen „Weil am Rhein“ und „Karlsruhe“ angewandt.

Abbildung 4.2 zeigt die Anpassung, die mithilfe der gewählten Gewichtung anhand der Kalibrierungszeitreihe 1995 bis 2002 erzielt wurde. Die allgemeine Fluktuation wird durch die Regression gut wiedergegeben, lediglich extreme Ausreißer können nicht dargestellt werden.

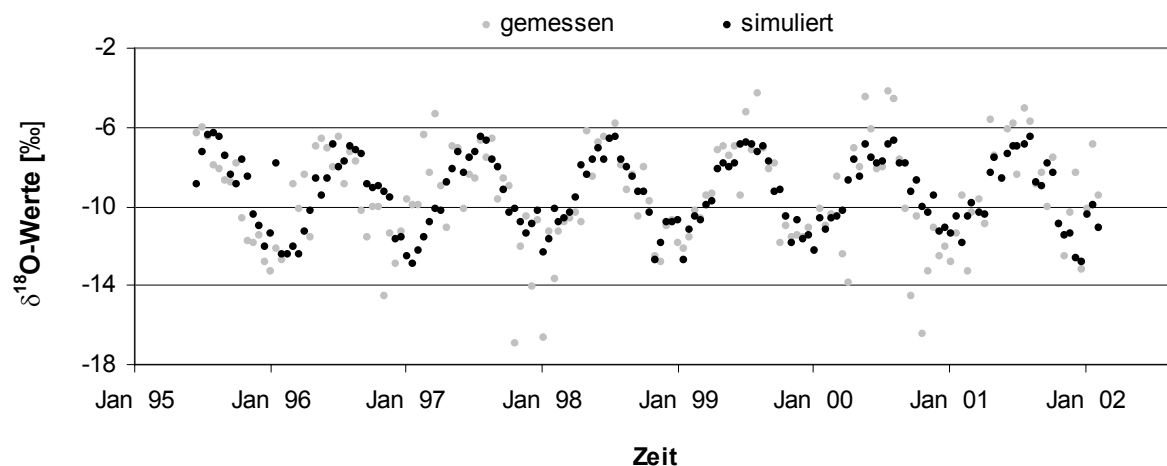


Abb. 4.2 Vergleich der gemessenen mit der über Temperaturregression simulierten Zeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag

Bei der Erstellung der synthetischen Datenreihe wurde, basierend auf den gewonnenen Ergebnissen, wie folgt vorgegangen:

- Berechnung von Halbmonatsmitteln der mittleren Temperaturhöhengradienten aus der Zeitreihe der Tagesmittelwerte der bodennahen Lufttemperaturen für die Stationen „Feldberg“ (1480 m NN) und „Freiburg“ (269 m NN)
- Berechnung von Halbmonatsmitteln der bodennahen Lufttemperatur für die Station „Feldberg“ aus Tageswerten und Korrektur dieser Werte auf die mittlere Einzugsgebietshöhe unter Verwendung des zuvor berechneten variablen Temperaturhöhengradienten
- Berechnung der monatlichen mittleren $\delta^{18}\text{O}$ -Werte für das Bruggagebiet durch Mittelung der Ergebnisse aus den Temperatur-Regressionsgleichungen für die Stationen „Weil am Rhein“ und „Karlsruhe“. Dabei wurde davon ausgegangen, dass durch die Regression anhand der Lufttemperatur sowohl Temperatur- als auch Höheneffekt der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte adäquat berücksichtigt werden.

Zeitraum 2: Oktober 1993 bis Juni 1995

Niederschlagsmenge

Die Berechnung der Niederschlagsmengen wurde – analog zu dem Verfahren im Zeitraum 1 – anhand der folgenden Schritte vorgenommen:

- Aufsummierung der Tageswerte der Station „Feldberg“ zu Halbmonatssummen. Für die Monate Januar bis Juni 1995 waren nur Monatssummen verfügbar, die dann gleichmäßig auf die Monatshälften verteilt wurden.
- Korrektur der Halbmonatssummen in Bezug auf den windbedingten Messfehler (s. Zeitraum 1)
- Korrektur der Niederschlagshöhen auf mittlere Einzugsgebietshöhe unter Verwendung des Höhengradienten der Niederschlagsmenge (s. Zeitraum 1)

Isotopische Zusammensetzung

Für diesen Zeitraum lagen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der vom Umweltbundesamt betriebenen Station „Schauinsland“ (1218 m NN) in monatlicher Auflösung vor. Diese wurden wie folgt aufbereitet:

- Korrektur der Monatsmittel der an der Station „Schauinsland“ gemessenen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages auf die mittlere Einzugsgebietshöhe mithilfe des Konzentrationshöhengradienten von 2,178 ‰/100m
- Zuordnung des Monatswertes zu beiden Monatshälften

Zeitraum 3: Juli 1995 bis Juli 1998

Niederschlagsmenge

1995 begann das intensivierte Messprogramm im Bruggagebiet, so dass in den meisten Fällen auf vor Ort gemessene Daten zurückgegriffen werden konnte. Zur Korrektur und Aggregation der Daten sowie zur Schließung etwaiger Datenlücken wurden die folgenden Arbeitsschritte durchgeführt:

- Gewichtete Mittelung der Wochen- bzw. Zweiwochensummen der Niederschlagsmengen mithilfe der - in Abhängigkeit von den zur Verfügung stehenden eigenen Messstationen - jeweils einzeln berechneten THIESSEN-Polygone (MONBARON 1998)
- Zur Schließung von Datenlücken wurden die folgenden beiden Strategien in der genannten Reihenfolge angewandt:
Sofern möglich fanden die Messdaten der Klimastation „St. Wilhelm“ Verwendung, die vorher von Windeinfluss bereinigt wurden (Tabelle 4.5). Obwohl die Station über 700 m NN liegt, zählt sie nach Empfehlungen des DWD (RICHTER 1995, zit. in UHLENBROOK 1999, 127) zu den mäßig geschützten Stationen.

Tab. 4.5 Niederschlags-Korrekturfaktoren für mäßig geschützte Stationen unter 700 m NN

Monat	Jan	Feb	Mrz	Apr	Mai	Jun	Jul	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez
Korrekturfaktor	1,119	1,115	1,112	1,100	1,075	1,069	1,071	1,070	1,075	1,083	1,093	1,104

Die Station „St. Wilhelm“ wird in Bezug auf die Niederschlagsverhältnisse als repräsentativ für das Bruggagebiet angesehen. Mithilfe des Höhengradienten des Niederschlages wird die korrigierte Niederschlagsmenge auf die mittlere Einzugsgebietshöhe angepasst:

$$\frac{N_{\text{Brugga}}}{N_{\text{St. Wilhelm}}} = \frac{1 - e^{-0,0026 \cdot 986}}{1 - e^{-0,0026 \cdot 780}} = 1,06 \quad (4.3)$$

- Falls keine Niederschlagsdaten der Station „St. Wilhelm“ vorlagen, wurde folgende lineare Regression mithilfe der Messwerte aus der im Nachbartal gelegenen Klimastation „Zastler“ vorgenommen: $N_{\text{St. Wilhelm}} = 0,9719 \cdot N_{\text{Zastler}} + 0,1568$ (siehe Abbildung 4.3).
- Aufsummierung der Tages- oder Wochensummen zu Halbmonatssummen. Dabei wurden die Wochenwerte der Monathälfte zugeschlagen, in der mindestens vier von sieben Tage dieser Woche liegen. Fällt das Datum der Probenahme auf den 1., 2. oder 3. bzw. 16., 17. oder 18. eines Monats, so wird die Woche ganz dem davor liegenden Intervall zugeschlagen, d.h. der zweiten Hälfte des Vormonats bzw. der ersten Hälfte des laufenden Monats.

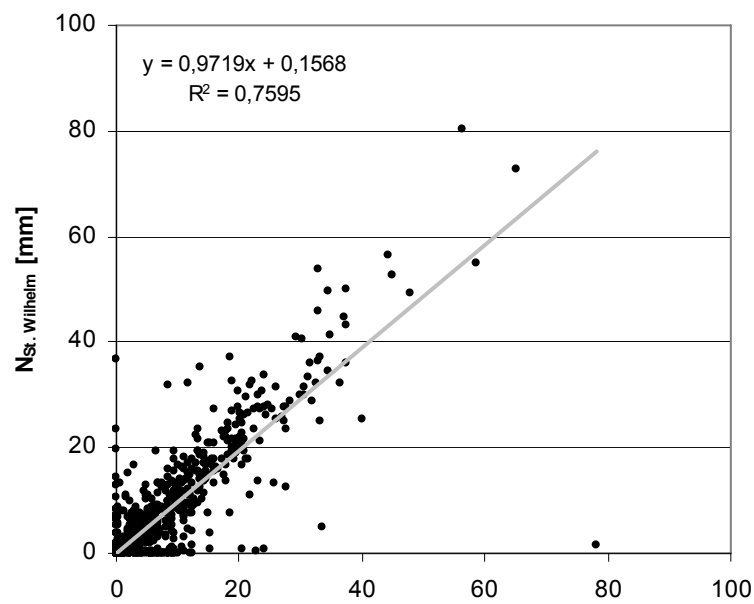


Abb. 4.3 Halbmonatssummen des Niederschlages der Station „St. Wilhelm“ als Funktion der Halbmonatssummen der Station „Zastler“

Isotopische Zusammensetzung

Aus den $\delta^{18}\text{O}$ -Werten der meist im wöchentlichen Abstand an der Station „St. Wilhelm“ gesammelten Niederschlagsmischproben wurden durch folgende Schritte korrigierte Halbmonatsmittel erstellt:

- Korrektur der wöchentlichen Isotopenmesswerte der Station „St. Wilhelm“ auf die mittlere Einzugsgebietshöhe mithilfe des Konzentrationshöhengradienten von $-0,2178 \text{ ‰}/100 \text{ m}$

- Schließung von Datenlücken (wie im Zeitraum 1) durch Regressionen mit der Lufttemperatur der Station „St. Wilhelm“, deren Messdaten mit dem mittleren monatlichen Temperaturhöhengradienten auf die mittlere Einzugsgebietshöhe (986 m NN) korrigiert wurden.
- Aggregation der Wochenwerte zu Halbmonatsmitteln, wobei die Isotopenkonzentrationen anhand der Niederschlagsmenge gewichtet wurden:

$$c = \frac{\sum_{i=1}^n c_i * N_i}{\sum_{i=1}^n N_i} \quad (4.4)$$

c	Halbmonatsmittel der Isotopenkonzentration [‰]
c _i	Einzelmesswert der Isotopenkonzentration im Intervall i [‰]
N _i	Niederschlagsmenge im Intervall i [mm]
n	Gesamtzahl der Messintervalle [-]

Zeitraum 4: August 1998 bis Februar 2002

Niederschlagsmenge

Die folgenden Schritte zur Erstellung der Zeitreihe der mittleren Niederschlagsmengen der Halbmonate sind z.T. denen der vorangegangenen Zeiträume analog:

- Auswertung der Niederschlagshöhen der Station „St. Wilhelm“
- Schließung von Datenlücken der Niederschlagshöhe über eine Regression mithilfe der Messwerte der benachbarten Station „Zastler“ (siehe Zeitraum 3).
- Korrektur der mittleren monatlichen Niederschlagshöhen in Bezug auf den Messfehler aufgrund der Windexposition nach DWD (siehe Zeitraum 1)
- Korrektur der Niederschlagshöhen auf mittlere Einzugsgebietshöhe mithilfe des Höhengradienten der Niederschlagsmenge (siehe Zeitraum 3)

Isotopische Zusammensetzung

Auch bei der Erstellung des $\delta^{18}\text{O}$ -Inputs konnte auf einige der bereits beschriebenen Ansätze zurückgegriffen werden. Im einzelnen wurden folgende Arbeitsschritte durchgeführt:

- Korrektur der wöchentlichen Isotopenmesswerte der Station „St. Wilhelm“ auf die mittlere Einzugsgebietshöhe unter Verwendung des Konzentrationshöhengradienten
- Schließung von Datenlücken unter Verwendung der für den Zeitraum 1 erstellten Regressionsbeziehung. Die mittlere Lufttemperatur wurde dazu mithilfe der über Regression mit der an der Station „St. Wilhelm“ gemessenen Lufttemperatur ermittelten Gleichung berechnet. Die Regressionsgleichung ist in Abbildung 4.4 dargestellt.

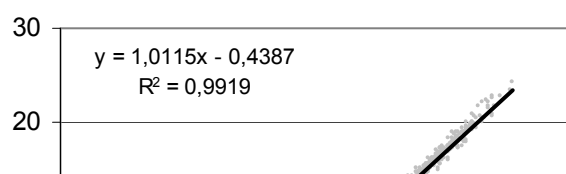


Abb. 4.4 Tägliche mittlere bodennahe Lufttemperatur der Station „St. Wilhelm“ als Funktion der täglichen mittleren bodennahen Lufttemperatur der Station „Zastler“

- Höhenkorrektur der Lufttemperaturwerte unter Verwendung der in Tabelle 4.6 aufgeführten langjährigen Monatsmittelwerte des Temperaturhöhengradienten (UHLENBROOK 1999)

Tab. 4.6 Langjährige Monatsmittelwerte des Lufttemperaturhöhengradienten (UHLENBROOK 1999)

Monat	Jan	Feb	März	Apr	Mai	Jun	Jul	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez
T-Gradient °C/100m	0,4	0,5	0,6	0,8	0,7	0,7	0,7	0,7	0,6	0,5	0,4	0,4

Die so erstellte Inputfunktion für das Bruggagebiet wurde ebenfalls als Grundlage für die Inputfunktion für das Einzugsgebiet der Quelle „Zipfeldobel“ verwendet. Dazu wurden die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte mithilfe der mittleren Abhängigkeit des $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes von der Höhenlage korrigiert. Dem Höhenunterschied zwischen der mittleren Höhe des Bruggagebietes (986 m NN) und der mittleren Höhe des oberirdischen Einzugsgebietes der Quelle „Zipfeldobel“ (685 m NN) entspricht eine Erhöhung des $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes um 0,66 ‰.

Um zunächst eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse mit der Arbeit von UHLENBROOK (1999) zu gewährleisten, wurde eine Aggregation der Halbmonatswerte zu Monatsmitteln vorgenommen. Die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der Halbmonate wurden dazu mit der dazugehörigen Niederschlagssumme gewichtet. Auch für die monatliche Auflösung wurde eine synthetische Inputfunktion für den Zeitraum 1971-1993 über eine Temperaturregression berechnet.

Zur Verwendung der von UHLENBROOK (1999) ermittelten Monatswerte (z.B. der Infiltrationskoeffizienten) in der halbmonatlich aufgelösten Modellierung wurden der ersten Monatshälfte der aktuelle Monatswert mit einem Gewicht von 0,75 und der Monatswert des Vormonats mit einem Gewicht von 0,25 zugewiesen. Für die zweite Monatshälfte gilt die inverse Gewichtung mit dem aktuellen und dem nachfolgenden Monat.

4.2.2 Erstellung der Outputfunktion

Für die Zusammenstellung der durch die Modellierung anzustrebenden Outputfunktion wurden die Ergebnisse der Routinemessungen im Untersuchungsgebiet verwendet und folgendermaßen weiterbearbeitet:

Momentane Abflussmengen am Pegel „Oberried“ und an der Quelle „Zipfeldobel“

Der Momentanabfluss zur Zeit der Probenahme ist eine wichtige Hilfsgröße zur Ausweisung von Messwerten, die vermutlich durch Direktabfluss beeinflusst sind. Er wurde wie folgt ermittelt:

- Umrechnung des Wasserstandes in den Abfluss für den Pegel Oberried. Bei der Probenahme am Pegel Oberried wurde der Wasserstand am Lattenpegel abgelesen und mithilfe der Wasserstands-Abfluss-Beziehung in den Abfluss umgerechnet.
- Fehlende Werte konnten z.T. durch simultan durchgeführte Messungen mit der Drucksonde bzw. mit dem Radarpegel vorgenommen werden. Für die verbleibenden Datenlücken wurden Tagesmittel des Abflusses verwendet.
- Für die Quelle „Oberried“ stand ab 1998 eine Vorrichtung zur kontinuierlichen Abflussmessung zur Verfügung.

Isotopenkonzentration

Die Probeentnahmen zur Bestimmung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte wurden am Pegel „Oberried“ und an der Quelle „Zipfeldobel“ meist in wöchentlichen Intervallen durchgeführt. Aus den Messwerten wurden anhand folgender Schritte für die Probenahmestelle „Oberried“ drei bzw. für die Quelle „Zipfeldobel“ zwei verschiedene Datensätze zusammengestellt:

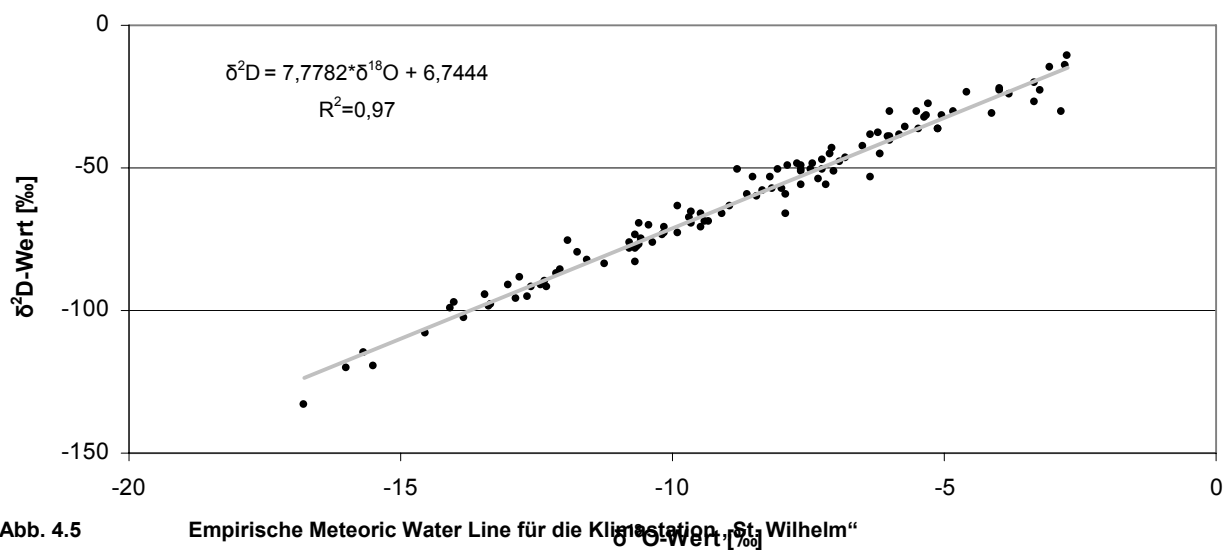
- Die erste Zeitreihe beinhaltet jeweils die an den beiden Messstellen gesammelten Daten als Einzelmesswerte ohne Gewichtung.
- Der zweite Datensatz entstand aus dem ersten unter Herausfilterung derjenigen Werte, die vermutlich durch Direktabfluss beeinflusst wurden. Die Abtrennung wurde am Pegel „Oberried“ unter Verwendung der Abflussmenge zur Zeit der Probenahme und für die Quelle „Zipfeldobel“ unter Verwendung der Abflussmenge zur Zeit der Probenahme und der Leitfähigkeit vorgenommen.
- Drittens wurden für den Pegel „Oberried“ aus den Einzelmesswerten abflussgewichtete Halbmonatsmittel der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zusammengestellt.

4.3 Datenaufbereitung für die Modellierung mithilfe von Spektralanalysen

Als Eingangsdaten für die Spektralanalyse wurden die Zeitreihen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages und des Abflusses, die schon für die Modellierung mit Fließmodellen erhoben wurden, um die Messergebnisse verschiedener Intensivkampagnen (u.a. FREY 1999) ergänzt. Im Rahmen dieser hochfrequenten Messreihen wurden die Schwankungen natürlicher Isotope innerhalb einzelner

Niederschlagsereignisse mithilfe von automatischen Probeentnahmegaräten (APEGs) in einer Auflösung von bis zu 10 Minuten gemessen.

In einigen Intensivkampagnen wurden dabei nur Deuterium-Gehalte bestimmt. Diese Werte wurden mithilfe einer Regression in $\delta^{18}\text{O}$ -Werte umgerechnet. Hierzu wurde mithilfe von 110 Niederschlags-Mischproben des Zeitraums 06.04.1999 bis 28.12.2001, für die sowohl $\delta^{18}\text{O}$ -Werte als auch Deuterium-Gehalte gemessen wurden, eine lokale *Meteoric Water Line* erstellt (Abbildung 4.5). Die gegenüber der *Global Meteoric Water Line* etwas geringere Steigung ist das Resultat der für diesen Ort charakteristischen Verdunstung des fallenden Niederschlages (MOSER & RAUERT 1980, 32). Der Achsenabschnitt wird bestimmt durch geographische Besonderheiten. Er nimmt nach MOSER & RAUERT (1980, 65) mit zunehmender Kontinentalität ab. Sowohl Steigung als auch Achsenabschnitt der erstellten Regressionsbeziehung sind denen für die Stationen „Karlsruhe“ und „Weil am Rhein“ erstellten Gleichungen sehr ähnlich und werden als plausibel betrachtet.



Alle Datensätze wurden dann mithilfe des Höhengradienten auf die mittlere Einzugsgebietshöhe umgerechnet. Die Inputfunktion der höhenkorrigierten $\delta^{18}\text{O}$ -Werte reicht somit vom 15.10.1993 bis 28.02.2002. Die Messwerte liegen dabei in einem Abstand von zehn Minuten bis 58 Tage, wobei der Median 7 Tage beträgt. Insgesamt gingen 544 Messwerte in die Inputfunktion ein. Hierbei ist zu beachten, dass die während der Intensivkampagnen gemessenen Werte nicht repräsentativ für das gesamte Niederschlagsverhalten sind. Diese Messkampagnen wurden vorzugsweise im Sommerhalbjahr durchgeführt und sind meist eine Beprobung von Niederschlägen mit konvektiver Komponente. Aus diesem Grund wurden zwei Datensätze erstellt, wobei nur einer um die Messwerte aus den Intensivkampagnen ergänzt wurde. Der nur die Ergebnisse der Routinemessungen umfassende Datensatz besteht aus 332 Messwerten, deren zeitlicher Abstand voneinander zwischen 2 und 58 Tagen schwankt. Der Median beträgt ebenfalls 7 Tage. Die gesamte Datenreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages ist in Abbildung 4.6 zusammengefasst.

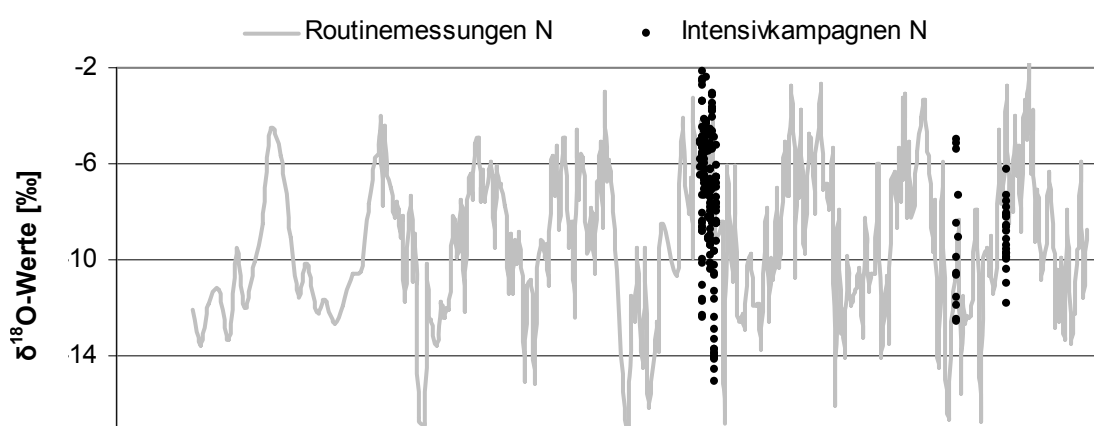
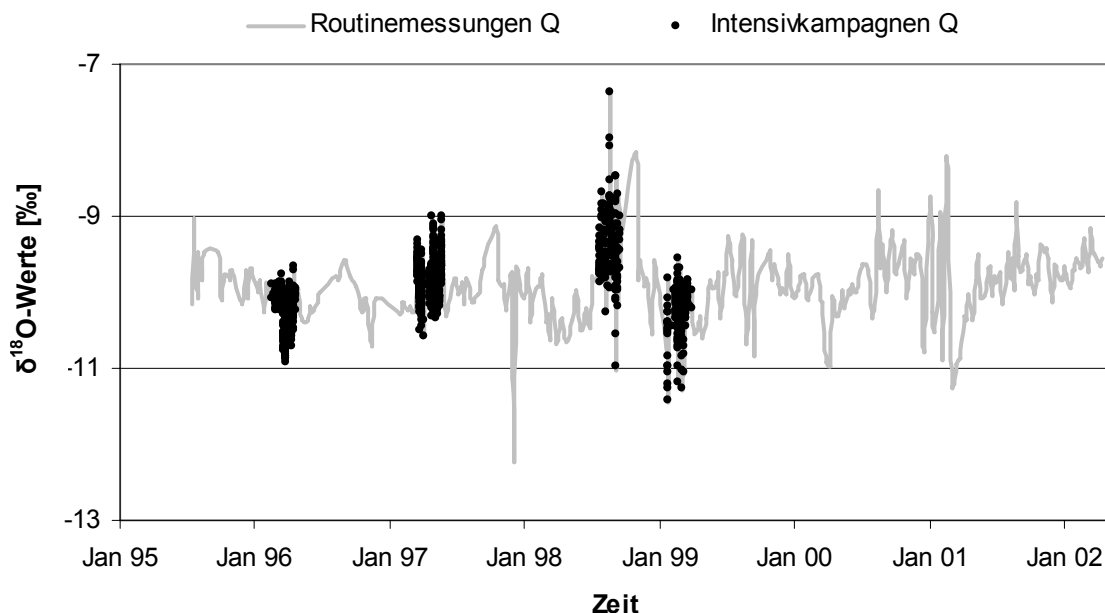


Abb. 4.6 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag (als Eingangsdaten für die Spektralanalyse)

Zur Ergänzung der Zeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss wurden weiterhin die Messergebnisse aus den Arbeiten von HILDEBRAND (1996), VROEIENSTIJN (1997), FREY (1999) und KNOBLOCH (1999) verwendet. Die Messungen wurden teilweise im Abstand von 30 Minuten durchgeführt, z.T. beträgt das Messintervall aber auch 63 Tage. Der Median der Messabstände aller 1277 Messwerte beträgt ca. 3 Stunden. Die den Zeitraum vom 15.07.1995 bis 19.04.2002 umfassende Zeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss ist in Abbildung 4.7 dargestellt.

In den hochaufgelösten Zeitreihen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss sind die Perioden erhöhten Abflusses sowie der Anteil schneller Komponenten überrepräsentiert. Aus diesem Grund wurde auch für die Outputwerte ein zweiter Datensatz ohne die Messwerte der Intensivkampagnen erstellt. Dieser reduzierte Datensatz enthält 257 Messwerte, die mit einem zeitlichen Abstand von 3 bis 11 Tagen aufgenommen wurden. Der Median beträgt auch hier 7 Tage. Wie auch bei KIRCHNER ET AL. (2000) stellen die Inputkonzentrationen volumengewichtete Mittelwerte der vorangehenden Messperiode dar, während die Zeitreihe der Outputkonzentrationen aus Momentanwerten besteht, deren Proben der fließenden Welle entnommenen sind.

Abb. 4.7 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss (als Eingangsdaten für die Spektralanalyse)

Zu Vergleichszwecken wurden neben den Konzentrationsschwankungen auch die Fluktuationen in den Wassermengen analysiert. Hierzu wurden vom 01.07.1995 bis 30.06.1998 reichende Zeitreihen des Niederschlages bzw. des Abflusses für den Pegel „Oberried“ verwendet.

Diese bestehen aus jeweils 26.304 Stundenwerten. Zur Plausibilisierung der Messdaten wurde ein Vergleich zwischen Niederschlags- und Abflussmengen durchgeführt. Dabei ergab sich ein Abflussverhältnis von 0,69, welches nahe am langfristigen Mittel von 0,75 liegt. Die Daten wurden als plausibel anerkannt.

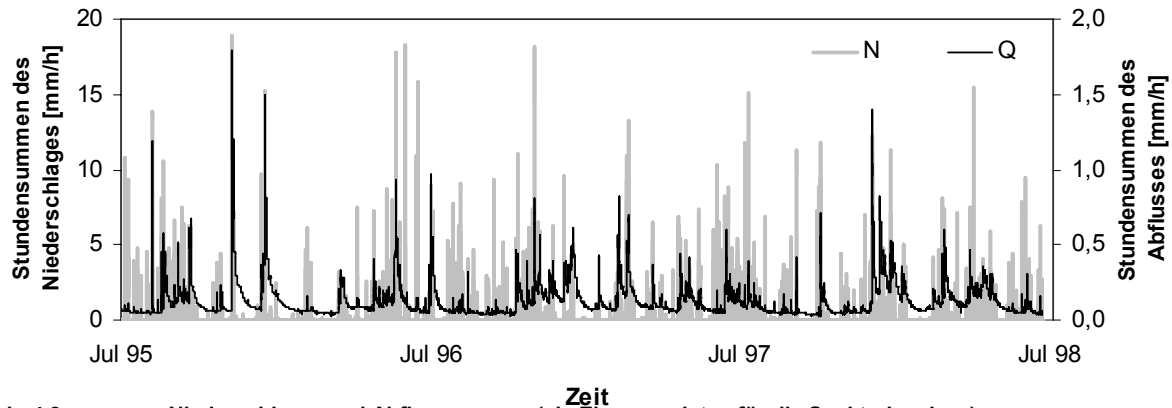


Abb. 4.8 Niederschlags- und Abflussmengen (als Eingangsdaten für die Spektralanalyse)

4.4 Fazit

Als Inputfunktion wurde eine halbmonatlich aufgelöste Zeitreihe des Gebietsniederschlages und seines mittleren $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes für den Zeitraum 1971 bis 2002 erstellt. Dazu wurde die von 1995 bis 2002 reichende Messreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag bis 1971 zurückverlängert, um die Beiträge früherer Niederschläge am Abfluss im Kalibrierungszeitraum (1995-2002) zu erfassen. Zu diesem Zweck wurde eine für die benachbarten Stationen „Karlsruhe“ und „Weil am Rhein“ gefundene mittlere Temperaturregression ins Einzugsgebiet übertragen. Durch die (im Vergleich zu der Arbeit von UHLENBROOK 1999) verlängerte Messreihe konnte die Bedeutung des durch die synthetischen Daten in die Modellierung eingebrachten Fehlers reduziert werden. Die Outputfunktion besteht aus den einzelnen $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerten des Abflusses der Brugga am Pegel „Oberried“ sowie der Quelle „Zipfeldobel“, die ein Teilsystem des Bruggagebietes charakterisiert.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass für die Erstellung der Eingangsdaten zur Modellierung mithilfe von Fließmodellen eine komplizierte Aufbereitung der Messdaten notwendig war. Die dabei angewandte Vielzahl von Inter- und Extrapolationen, räumlichen Übertragungen, Korrekturen und Gewichtungen macht eine Fehlerabschätzung mithilfe der Fehlerfortpflanzungsberechnung praktisch nicht möglich. Dieses Erkenntnis bestätigt den gewählten Ansatz zur indirekten Bewertung dieser Methode.

Für die Spektralanalyse wurden dieselben Daten wie für die Fließmodelle verwendet. Der darüber hinaus vorhandene Datensatz hochaufgelöster Messwerte verschiedener Niederschlags- und Abflussereignisse ermöglichte die Erweiterung des Leistungsdichtespektrums zu kürzeren Perioden hin. Da allerdings die Integration dieser hochfrequenten Werte eine Verfälschung der Analysewerte

befürchten ließ, wurden diese Daten in einem separaten Datensatz mit den Ergebnissen der Routinemessungen kombiniert.

5 Ergebnisse und Diskussion

Die Gliederung dieses Kapitels folgt der der Modellierungskonzeption, wie sie im Abschnitt 3.2.5 bereits erläutert wurde.

5.1 Eingangsdaten

5.1.1 $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe des Niederschlags (Inputfunktion)

Abbildung 5.1 zeigt die ungewichtete Zeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages in halbmonatlicher Auflösung, die anhand von Messwerten und durch Übertragungsfunktionen für das Bruggagebiet erstellt wurde.

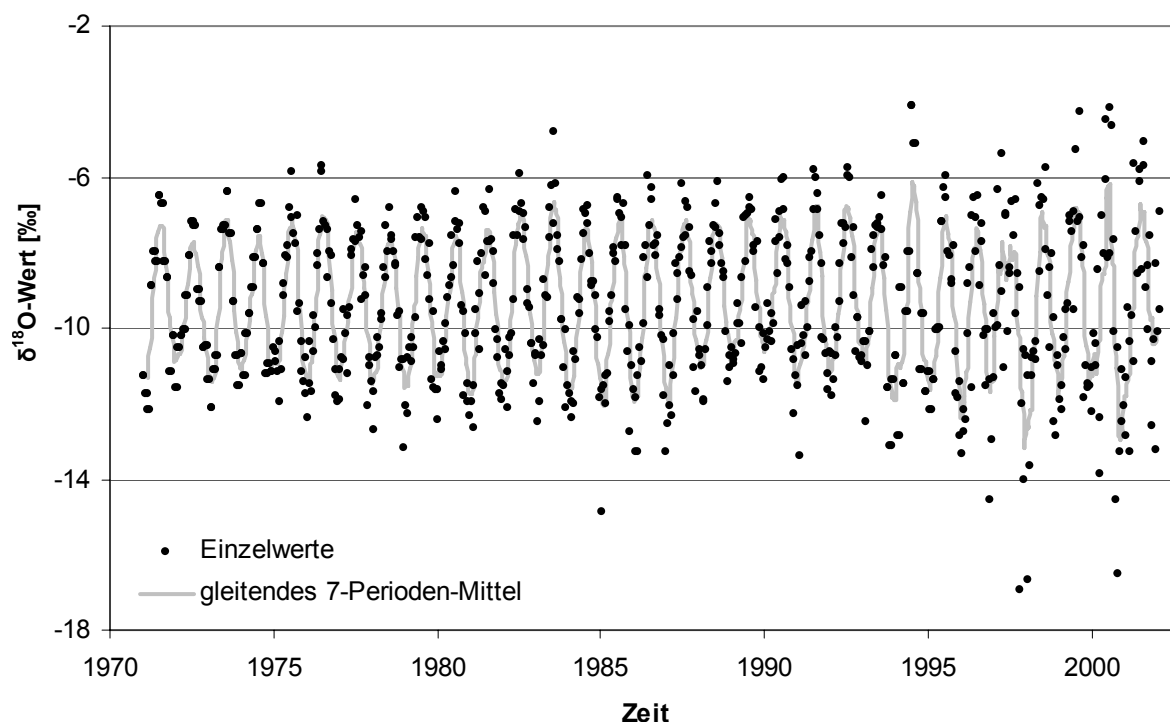


Abb. 5.1 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages im Zeitraum 1971 bis 2002

Es ist zu erkennen, dass die Inputfunktion bis 1993 eine weitgehend regelmäßige Jahresschwankung darstellt. Diese Schwankung spiegelt den Lufttemperaturverlauf in Bodennähe wieder, da dieser Abschnitt der Inputfunktion auf einer Regression über die bodennahe Lufttemperatur beruht. Auch für den Zeitraum 1993 bis 2002 wird ein Jahresmuster deutlich. Erwartungsgemäß ist dieses allerdings weniger regelmäßig, da es – im Gegensatz zu der synthetischen Eingangsfunktion – aufgrund von $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerten erstellt wurde.

Ein Vergleich mit der von UHLENBROOK (1999) für den Zeitraum 1971-1998 erstellten Inputfunktion ergab nur geringfügige Abweichungen, die auf die modifizierten regionalen Übertragungsfunktionen sowie geringfügig abweichende Methoden zur Schließung von Datenlücken zurückzuführen sind.

5.1.1.1 Standardabweichung

Als ein Indikator für die Stationarität der erstellten Zeitreihe wurden die Standardabweichungen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte innerhalb verschiedener Zeiträume untersucht. Dabei wurden zu Vergleichszwecken auch für die Zeitabschnitte, für die Messwerte vorlagen, synthetische $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages über Temperaturregression erstellt. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Tab. 5.1 Standardabweichungen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der Inputfunktion für verschiedene Zeitabschnitte

Zeitabschnitt	Zeitraum	Standardabweichung der Messwerte [‰]	Standardabweichung der Lufttemperaturregression [‰]
I	1971-1993	keine Messwerte	1,82
II	1993-1995	2,33	1,82
III	1995-1998	2,57	1,88
IV	1998-2002	2,62	1,78

Während die Standardabweichungen der sich aufgrund der Temperaturregression ergebenden synthetischen Werte über alle Zeitabschnitte etwa konstant sind, zeigte sich für die Messwerte eine Zunahme der Standardabweichungen über die drei Zeiträume, für die Messwerte vorlagen.

Es wird vermutet, dass die zunehmende Variabilität der Einzelwerte zumindest teilweise in der Methodik der Datenbeschaffung begründet ist: Im Zeitabschnitt II (1993-1995) waren die Messdaten der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag nur als Monatsmittel verfügbar, so dass für jeweils zwei Halbmonate derselbe Wert verwendet wurde. Die Eingangsfunktion ab 1995 (Zeitabschnitte III und IV) besteht aus variablen Halbmonatswerten, die aus Tages- oder Wochenmittelwerten zusammengestellt wurden, indem sie der jeweiligen Niederschlagsmenge entsprechend gewichtet wurden. In einigen Fällen gab es allerdings auch nur einen Messwert pro Halbmonat. Es ist verständlich, dass die Zeitabschnitte III und IV aufgrund der höheren zeitlichen Auflösung gegenüber dem Zeitabschnitt II durch eine höhere Variabilität der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte charakterisiert sind.

Da die $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte der Zeitabschnitte II bis IV neben der Lufttemperatur auch von einer Vielzahl anderer Faktoren, wie Niederschlagsdauer, Luftmassenherkunft etc., abhängen, ist die gegenüber den Regressionswerten der Lufttemperatur höhere Standardabweichung plausibel. Die bodennahe Lufttemperatur, auf der die Zeitreihe vor 1993 beruht, zeigt in der halbmonatlichen Mittelung gewöhnlich einen viel regelmäßigeren Verlauf als die $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte. Dies war qualitativ bereits aus dem Vergleich der Zeitreihen 1971 bis 1993 und 1993 bis 2002 in Abbildung 5.1 gefolgert worden.

Trotz der Plausibilität der verschiedenen Niveaus der Standardabweichungen für die verschiedenen Zeiträume der Inputfunktion muss davon ausgegangen werden, dass durch die Methode der Temperaturregression ein systematischer Fehler begangen wurde. Dabei wurde durch die in die Vergangenheit extrapolierte Eingangsfunktion die Variabilität der in der Natur vorkommenden $\delta^{18}\text{O}$ -Werte systematisch unterschätzt. Es zeigte sich, dass die einfache Lufttemperaturregression nur begrenzt in der Lage ist, die Wirkung des komplexen Zusammenspiels verschiedener Fraktionierungsvorgänge nachzuempfinden.

5.1.1.2 Trends

Ein weiterer Aspekt zur Untersuchung der Zeitreihe auf Stationarität betrifft die Frage nach dem Auftreten von Trends. Im Zusammenhang mit der beobachteten Klimaveränderung wurden u. a. Studien über die Veränderung der Häufigkeit und der räumlichen und zeitlichen Persistenz von Großwetterlagen durchgeführt. Großwetterlagen sind charakterisiert durch ein spezielles atmosphärisches Strömungsmuster, welches durch die Luftdruckverteilung, die Lage der Hoch- und Tiefdruckzentren, sowie durch die Lage und die Erstreckung der Frontalzonen klassifiziert werden kann (BISSOLLI 2000).

Seit 1881 gibt es für die Großwetterlagen Europas eine kontinuierliche Aufzeichnung (GERSTENGARBE ET AL. 1999). Mithilfe einer Zeitreihen-Analyse dieser Daten stellte CASPARY (1998) fest, dass die Großwetterlage „Westlage zyklonal“ (Wz) seit 1973 signifikant zugenommen hatte. Die „Westlage zyklonal“ zeichnet sich durch die Heranführung warmer und feuchter Luftmassen aus, wobei es zu einem Durchzug von Tiefausläufern mit ergiebigen Niederschlägen und Zwischenhochs kommt. Insbesondere kam es durch Häufung der *winterlichen* Westwetterlagen in den vergangenen Jahrzehnten zu einem Anstieg der Wintermitteltemperatur (BISSOLLI 2000).

Da es durch diesen Trend verstärkt zu Niederschlagsbildung aus warmen Luftmassen kommt, ist entsprechend des Temperatureffektes ein Anstieg der winterlichen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag zu erwarten. Gleichzeitig muss allerdings auch ein Mengeneffekt in Betracht gezogen werden. BÄRDOSY (1998) berichtet von einer Zunahme der zeitlichen „Persistenz der Wetterlagen“, wodurch es zu länger anhaltenden Niederschlagsereignissen kommt. Aufgrund des Mengeneffektes wäre auch ein gegenläufiger Trend denkbar.

Es wurde untersucht, wie sich die auf der Makroskala nachgewiesenen Trends lokal umsetzen. Dazu wurde eine Trendanalyse der $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte im Niederschlag vorgenommen, wobei die Messwerte in sommerliche und winterliche Messwerte aufgeteilt und getrennt untersucht wurden (Abbildung 5.2).

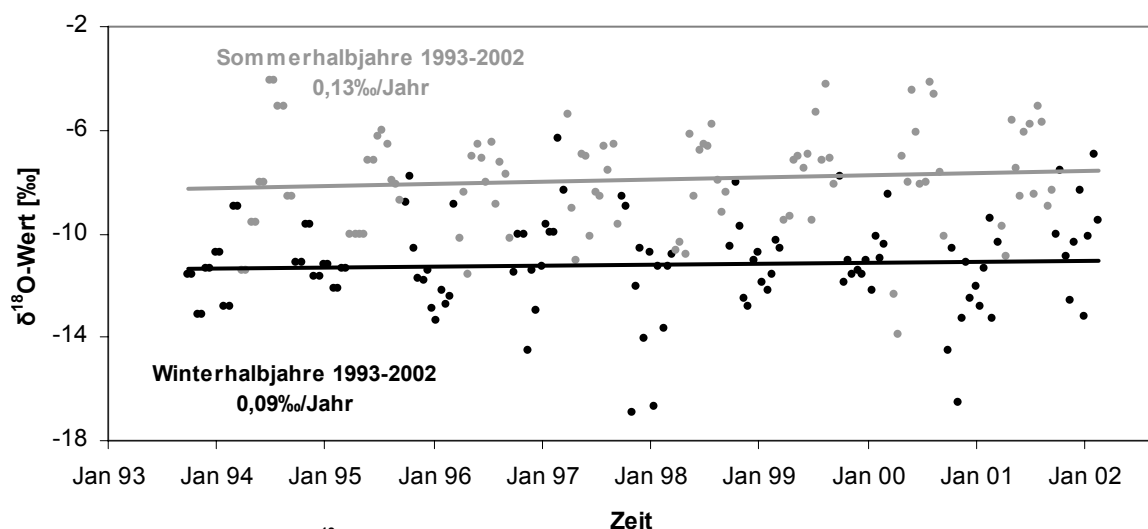


Abb. 5.2 Zeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ - Halbmonatsmittel im Niederschlag im Bruggagebiet für den Zeitraum 1993-2002

Für beide Jahreshälften zeichnet sich mathematisch ein leicht positiver Trend ab, wobei der Anstieg der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte in den Sommermonaten etwas stärker ist. Die Signifikanz des Trends wurde mithilfe des Trend/Rausch-Verhältnisses bewertet. Der Betrag der mittleren linearen Zunahme der abhängigen Variable innerhalb des betrachteten Zeitintervalls wird dabei dividiert durch den Schätzer des Rauschens, welcher durch die Standardabweichung berechnet wird. Bei Annahme einer

Normalverteilung kann das Trend/Rausch-Verhältnis anschließend mit den z-Werten der Standard-Normalverteilung verglichen werden, um somit auf das Signifikanzniveau bzw. die Irrtumswahrscheinlichkeit zu schließen (SCHÖNWIESE 2000). Auf den gängigen Signifikanzniveaus von 99 % bzw. 95 % konnte aufgrund der hohen Streuung und des relativ kurzen Beobachtungszeitraums kein Trend nachgewiesen werden. Erst bei Irrtumswahrscheinlichkeiten von 32 % bzw. 36 % ergäbe sich ein rechnerisch „signifikanter“ Trend für die Sommer- bzw. Wintermonate.

Es wurden im folgenden die durch die Stationen „Weil am Rhein“ und „Karlsruhe“ erstellten Zeitreihen der bodennahen Lufttemperatur und der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag analysiert. Dabei zeigte sich, dass sich der gesamteuropäische Trend an den einzelnen Stationen uneinheitlich umsetzt. An der Station Weil am Rhein wurde eine sommerliche Abnahme der bodennahen Lufttemperatur und der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag gemessen. Innerhalb der Winterhalbjahre zeigten dagegen Lufttemperatur und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte einen positiven Trend. An der Station Karlsruhe gab es sowohl in der Lufttemperatur wie auch in den $\delta^{18}\text{O}$ -Werten durchweg einen mathematisch positiven Trend, wobei der sommerliche den winterlichen Anstieg übertrifft, so wie es auch im Bruggagebiet der Fall ist. Auch an den Stationen „Weil am Rhein“ und „Karlsruhe“ sind die mathematischen Trends erst bei sehr hohen Irrtumswahrscheinlichkeiten signifikant.

In allen Fällen wurden jeweils für den entsprechenden Zeitraum parallele Trends im Mittelwert der bodennahen Lufttemperatur und den $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages gemessen. Diese Beobachtung bestätigt den von CLARK & FRITZ (1997) nachgewiesenen engen Zusammenhang dieser beiden Größen. Das von ihnen für weltweit gesammelte Messdaten berechnete mittlere Bestimmtheitsmaß von 0,815 deutet an, dass die bodennahe Lufttemperatur zwar eine gute, aber keine vollständige Beschreibung der Streuung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte liefern kann. Eine stärkere Korrelation wäre zu erreichen, wenn die Temperatur der Luftmassen an dem Punkt, wo der Niederschlag gebildet wird, verwendet würde. Aber selbst in diesem Fall müsste zusätzlich noch die Interaktion des Niederschlages mit der Atmosphäre während des Falls berücksichtigt werden (MOSER & RAUERT 1980). Wie in Abschnitt 3.2.4 erläutert, kommt es weiterhin zu einem komplexen Zusammenspiel verschiedener Effekte, wobei auch die Herkunft der Luftmassen und das Stadium des Niederschlagsereignisses relevant sind.

Aufgrund der Analyse des Trend/Rausch-Verhältnisses kann mit großer Sicherheit davon ausgegangen werden, dass die Zeitreihe der gemessenen Inputwerte keinen Trend der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte aufweist. Diese Feststellung ist wichtig, da nur unter dieser Bedingung eine Abschätzung der mittleren Verweilzeit über die Dämpfung der Amplituden möglich ist. Des weiteren würde ein beobachteter Trend auch die Stationarität der Regressionsbeziehung zwischen bodennaher Lufttemperatur und $\delta^{18}\text{O}$ -Wert in Frage stellen, so dass die Methode der Rückwärtsextrapolation mithilfe der Temperaturregression nicht angewandt werden könnte. Für die Spektralanalyse ist es umstritten, ob das Auftreten eines Trends die Auswertung mithilfe dieser Methode behindert (KIRCHNER 2002). Auf jeden Fall müsste der Trend herausgerechnet werden, um zu hoch berechnete Leistungsdichten im langwelligen Bereich zu vermeiden.

5.1.2 $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihe des Abflusses (Outputfunktion)

Die im Rahmen der Routinemessungen ermittelten $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss der Brugga am Pegel „Oberried“ sowie an der Quelle „Zipfeldobel“ sind zusammen mit den 7-Perioden-Mitteln beider Zeitreihen in der Abbildung 5.3 dargestellt.

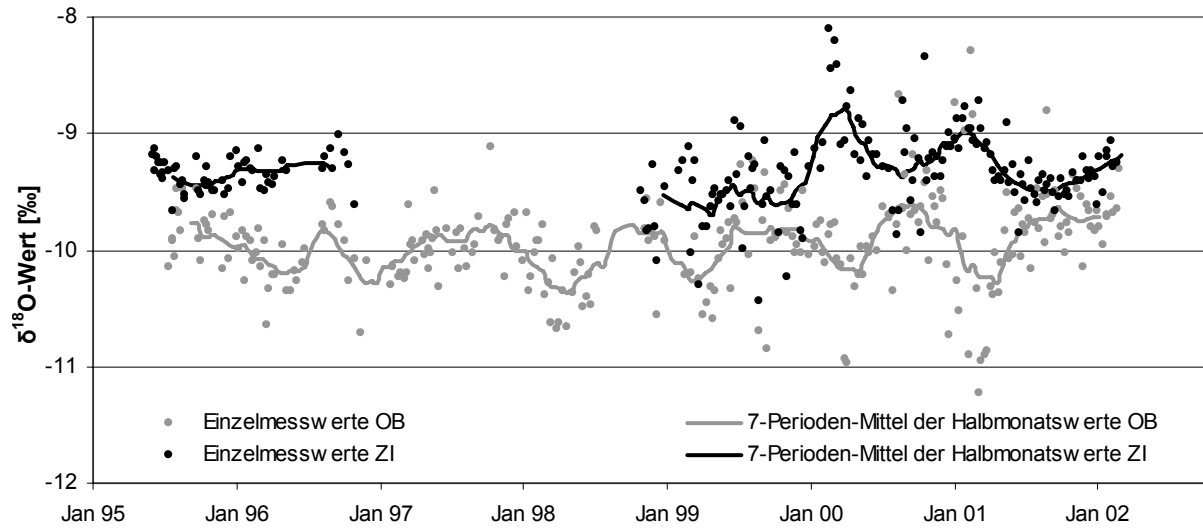


Abb. 5.3 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss am Pegel „Oberried“ (OB) und an der Quelle „Zipfeldobel“ (ZI)

Durch das 7-Perioden-Mittel der Halbmonatswerte werden die mittleren jährlichen Schwankungen gut hervorgehoben. Dabei ist die Amplitude der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss an beiden Messstellen gegenüber der des Inputs (siehe Abbildung 5.1) deutlich gedämpft und bewegt sich für beide Outputfunktionen ungefähr in der gleichen Größenordnung.

Sehr deutlich ist eine Phasenverschiebung der beiden Outputfunktionen zu beobachten. Während am Pegel „Oberried“, wo die Reaktion des Gesamtsystems erfasst wird, das Maximum der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Spätsommer bzw. Herbst erreicht wird, kommt es an der Quelle „Zipfeldobel“ im Frühjahr zu den jährlich maximalen Werten. Es kommt an den beiden Messstellen teilweise zu entgegengesetzten Verläufen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte. Dieses Phänomen war in den Jahren 2000 bis 2002 besonders ausgeprägt.

Aus diesen Beobachtungen allein ist nicht abzuleiten, in welche Richtung die beiden Systeme phasenverschoben sind. Aus Voruntersuchungen durch UHLENBROOK (1999) ist bekannt, dass sich das Teilsystem des Hanges oberhalb der Quelle „Zipfeldobel“ durch eine längere mittlere Verweilzeit auszeichnet als das Gesamtsystem, das durch die Messungen am Pegel „Oberried“ erfasst wurde. UHLENBROOK (1999) hatte in seiner Untersuchung für das Teil- bzw. Gesamtsystem mittlere Verweilzeiten von 36 bzw. 24 Monaten bestimmt. Aufgrund der Differenz der beiden mittleren Verweilzeiten wäre eine Phasenverschiebung von 12 Monaten zu erwarten. Stattdessen konnte für die Jahre 2000 bis 2002 eine Phasenverschiebung von 5 oder 17 Monaten abgeleitet werden.

Für diese Diskrepanz zwischen erwartetem und beobachtetem Verlauf der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss an den beiden Messpunkten erscheint die Tatsache verantwortlich, dass die Ausprägung des Jahresmusters der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss nicht allein auf der Differenz der mittleren Verweilzeiten beruht, sondern ebenfalls einer Modifikation durch die Fließzeitverteilung unterliegt. Für die Quelle „Zipfeldobel“ stellte das Exponential-Piston-Flow-Modell stets eine bessere Anpassung an die gemessene Zeitreihe dar als das reine Exponentialmodell. UHLENBROOK (1999) fand eine Optimierung der Anpassung für einen Aufteilungsparameter von 1,12. Wird dieser Wert in Gleichung 3.17

eingesetzt, so errechnet sich eine Verzögerung der Abflussreaktion von 4 Monaten. Die gesamte beobachtete Phasenverschiebung von 17 Monaten setzt sich deshalb vermutlich aus der Differenz der mittleren Verweilzeiten und aus der Wirkung der Piston-Flow-Mechanismen an der Quelle „Zipfeldobel“ zusammen.

Wie bei der Inputfunktion nimmt die Variabilität der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Abflusses am Pegel „Oberried“ innerhalb des Messzeitraums zu. Im Gegensatz zur Erfassung und Zusammenstellung der Inputfunktion hat sich innerhalb des Beobachtungszeitraums die Messmethodik bezüglich der Outputfunktion nicht verändert. Die Zunahme der Schwankungsbreite legt die Vermutung nahe, dass auch im Input eine Zunahme der Schwankungsbreite stattgefunden hat. Auch für die Outputfunktion ergab sich ein rechnerisch positiver Trend der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte, der allerdings auf den üblichen Niveaus ebenfalls nicht signifikant war. Die Ergebnisse dieser Zeitreihe wurden als plausibel anerkannt.

5.2 Modellierung von mittleren Verweilzeiten mithilfe der Amplitudendämpfung

Mithilfe von linearen multiplen Regressionen (BLISS 1970) wurden für die Input- und die Outputfunktion die folgenden Gleichungen bestimmt:

$$\begin{aligned} \text{Inputfunktion (1995-2002): } \delta^{18}\text{O} &= [-9,499 - 2,518 \cos(\omega t) - 0,658 \sin(\omega t)] \text{‰}, & R^2 &= 0,53 \\ \text{Inputfunktion (1971-2002): } \delta^{18}\text{O} &= [-9,583 - 2,138 \cos(\omega t) - 1,086 \sin(\omega t)] \text{‰}, & R^2 &= 0,70 \\ \text{Outputfunktion (1995-2002): } \delta^{18}\text{O} &= [-9,905 - 0,006345 \cos(\omega t) - 0,198 \sin(\omega t)] \text{‰}, & R^2 &= 0,12 \end{aligned}$$

mit	$\delta^{18}\text{O}$	$\delta^{18}\text{O}$ -Wert im Niederschlag bzw. Abfluss [‰]
ω		Frequenz [z.B. Jahr ⁻¹]
t		Zeit [z.B. Jahr]

Aus Vergleichsgründen wurden zwei Funktionen für die Inputzeitreihe erstellt, wobei die zweite auch die über Temperaturregression erstellten Inputwerte enthält. Sie zeichnet sich einerseits durch eine geringere Amplitude und andererseits durch ein höheres Bestimmtheitsmaß aus. Diese Phänomene sind auf die Berücksichtigung der einerseits sehr regelmäßigen und andererseits weniger variablen synthetischen Inputfunktion vor 1993 zurückzuführen.

In Abbildung 5.4 sind für die Periode von 1995 bis 2002 die Messwerte und die an die jeweiligen Messwerte angepassten Sinusschwingungen für die Input- und Outputfunktion gegenübergestellt. Die starke Dämpfung und die Phasenverschiebung um 17 Monate, die durch das System bewirkt werden, sind deutlich erkennbar. Sie unterstreichen die schon in Abschnitt 5.1 diskutierten Beobachtungen.

Zur Ableitung der mittleren Verweilzeit aus den Sinusschwankungen wurde das in Abschnitt 3.1.7 beschriebene Verfahren angewandt. Die Einzelamplituden der Sinus- und Cosinus-Terme wurden anhand der Beziehung 3.5 zu jeweils einer Gesamtamplitude für die Input- bzw. Outputfunktion zusammengefasst. Somit ergab sich entsprechend Gleichung 3.6 eine mittlere Verweilzeit von 25 Monaten.

Die gute Übereinstimmung dieses Ergebnisses mit der von UHLENBROOK (1999) mithilfe des Exponentialmodells ermittelten mittleren Verweilzeit von 24 Monaten ist u.a. darin begründet, dass auch dem Ansatz der Amplitudendämpfung eine exponentialverteilte Verweilzeit zugrunde liegt. Werden die synthetischen Werte in die Analyse miteinbezogen, berechnet sich eine mittlere Verweilzeit von 23 Monaten. Da die über Regression bestimmte Inputfunktion die reale Amplitude der

$\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag unterschätzt, kommt es bei dieser Methode auch zu einer Unterschätzung der mittleren Verweilzeit. Hier zeigte sich die Auswirkung des systematischen Fehlers, der im Ansatz der Temperaturregression begründet ist.

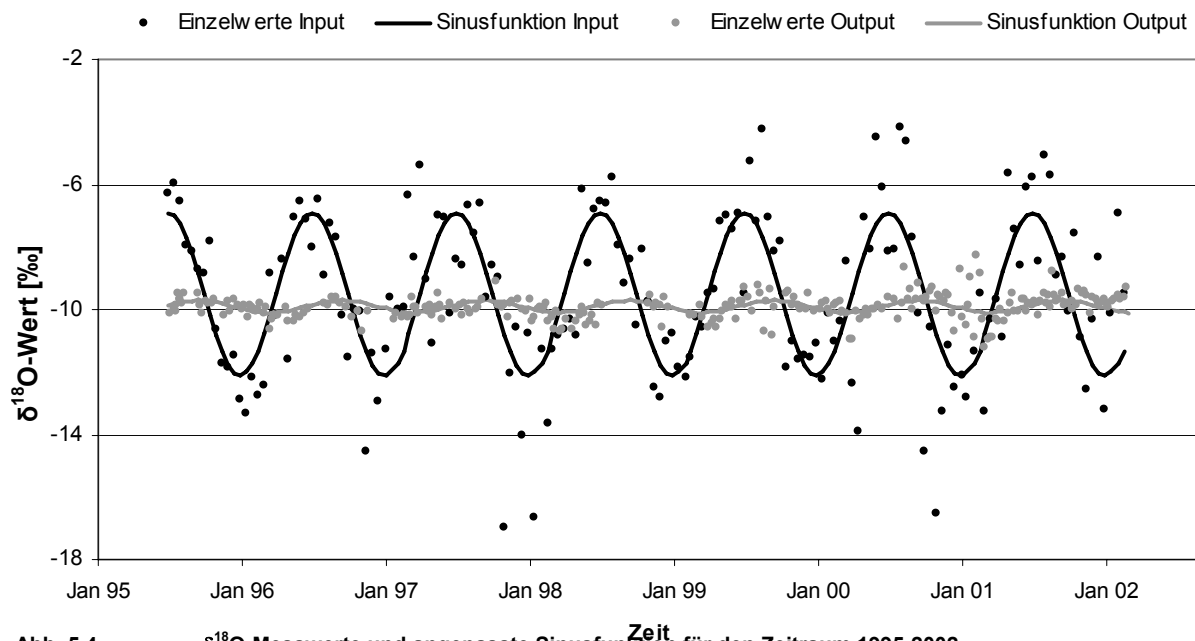


Abb. 5.4 $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte und angepasste Sinusfunktion für den Zeitraum 1995-2002

5.3 Voruntersuchungen zur Lumped-Parameter- Modellierung

5.3.1 Abgrenzung der Untersuchungszeiträume

Zur Voruntersuchung für die weiteren vergleichenden Modellierungen wurde ein Probemodellierungsdurchgang durchgeführt. Dieser beruht auf dem von UHLENBROOK (1999) vorgeschlagenen Ansatz, nach dem die monatlich aufgelöste Inputfunktion mit den von ihm bestimmten mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten gewichtet wurde. Aufgrund der Ergebnisse aus Abschnitt 5.2 wurde das reine Exponentialmodell und eine mittlere Verweilzeit von 25 Monaten gewählt.

Wie in Abbildung 5.5 ersichtlich ist, bildet das Modell den gemessenen Verlauf der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Abflusses am Pegel „Oberried“ im Zeitraum 1995-2000 zufriedenstellend nach. Ab Mitte 2000 werden die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Abflusses allerdings tendenziell unterschätzt. Durch die zunehmende Unterschätzung durch das Modell liegt auch der berechnete mittlere $\delta^{18}\text{O}$ -Wert mit $-10,11\text{ ‰}$ unter dem für die gemessene Outputfunktion bestimmten Mittel von $-9,94\text{ ‰}$. Diese Beobachtung deutet darauf hin, dass es einerseits allgemeine Prozesse und Interaktionen gibt, die durch das einfache Exponentialmodell und die Gewichtung des Niederschlages nachempfunden werden können. Andererseits kommt es im Zeitraum 2000 bis 2002 zu Konstellationen, die das Modell in allgemein zu geringe $\delta^{18}\text{O}$ -Werte umsetzt.

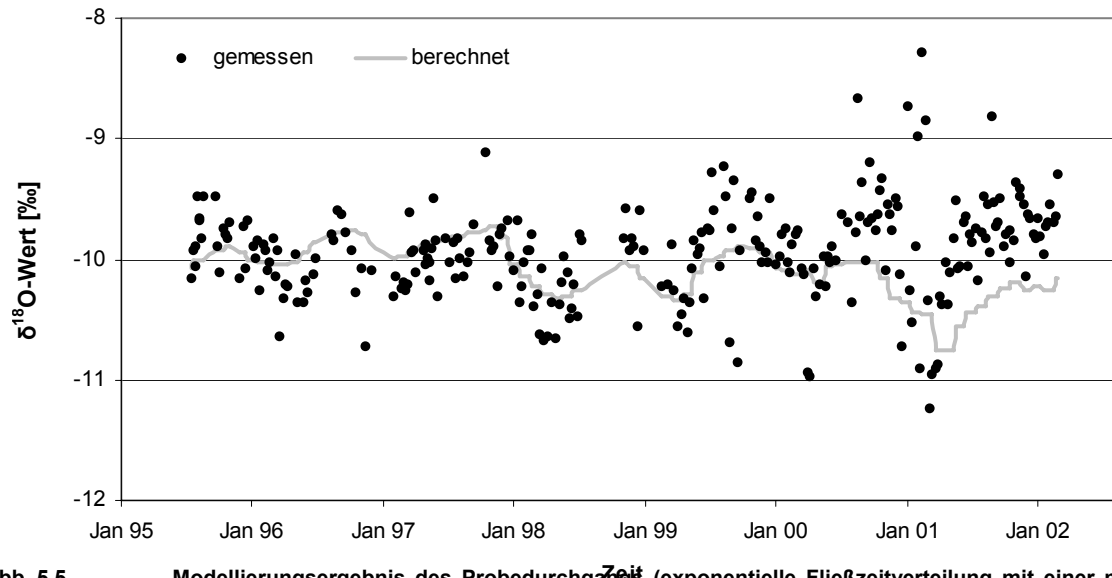


Abb. 5.5 Modellierungsergebnis des Probedurchgangs (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 25 Monaten)

Für die allgemeinen Untersuchungen der Modellunsicherheiten wurde die Zeitreihe in zwei gleich lange Perioden geteilt. Dazu wurde zunächst der Zeitraum ab Juli 2000 abgespalten, da aufgrund der allgemein schlechteren Modellergebnisse im Zeitraum 2000-2002 ansonsten keine Vergleichbarkeit der Untersuchungszeiträume untereinander gegeben gewesen wäre. Der spätere Zeitraum wurde im Rahmen der Bewertung der prozessorientierten Modellierung (siehe Abschnitte 5.9 und 5.11) nochmals betrachtet. Der verbleibende Zeitraum von Juli 1995 bis Juni 2000 wurde in zwei gleichlange Zeitabschnitte von jeweils 30 Monaten geteilt.

Aus Abbildung 5.5 ist ebenfalls ersichtlich, dass die Messwerte der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Abflusses eine erhebliche Streuung aufweisen. Es ist daher nicht zu erwarten, dass ein Modell eine perfekte Anpassung leisten kann. Aus diesem Grund wurde mithilfe der Modelleffizienz (Gleichung 3.30) für die einzelnen Zeitabschnitte jeweils ein Vergleichswert errechnet, der die beste erreichbare Modelleffizienz widerspiegelt. Aus dem Messdatensatz der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Abflusses wurde hierzu für jeden Monat die Standardabweichung der Messwerte berechnet. Diese Werte wurden dann in Gleichung 3.30 zur Berechnung der Residuen verwendet. Entsprechend der kurzfristigen Variabilität der Messwerte ergaben sich dadurch für jeden Zeitraum individuelle Werte, die als die maximal erreichbaren Modelleffizienzen angesehen wurden. Sie dienen als Vergleichsbasis für die Modellgüte der folgenden Simulationen. Eine Übersicht über die Modellierungszeiträume bietet Tabelle 5.2.

Tab. 5.2 Übersicht über die Modellierungszeiträume

Bezeichnung	Zeitraum	$\delta^{18}\text{O}$ -Mittel im Abfluss [‰]	Erreichbare Modelleffizienz
I	Juli 1995 – Dezember 1997	-9,96	0,308
II	Januar 1998 – Juni 2000	-10,05	0,268
I+II	Juli 1995 – Juni 2000	-10,01	0,295
Gesamt	Juli 1995 – Februar 2002	-9,94	0,396

5.3.2 Bedeutung der Gewichtung der Inputkonzentration

Um die Bedeutung der Gewichtungsfunktion der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag zu quantifizieren, wurden zwei einfache Modellierungen für den Zeitraum 1995-2000 durchgeführt. Hierbei wurde jeweils eine rein exponentielle Fließzeitverteilung angenommen und als einziger Modellparameter eine mittlere Fließzeit von 25 Monaten gewählt. In den Modellierungen wurden die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages mit der Niederschlagsmenge und einem saisonalen Infiltrationsparameter von 1 bzw. 0 gewichtet. Der Infiltrationsparameter beschreibt das Verhältnis des sommerlichen zum winterlichen Mittelwert des Infiltrationskoeffizienten. Der erste Gewichtungsansatz entspricht dabei einem ausgeglichenen Beitrag von Sommer- und Winterniederschlag, während im zweiten Fall der Einfluss des Sommerniederschlages auf die isotopische Zusammensetzung des Outputs ausgeschlossen wird. Die Ergebnisse dieser Modellierungen sind in Abbildung 5.6 zu sehen.

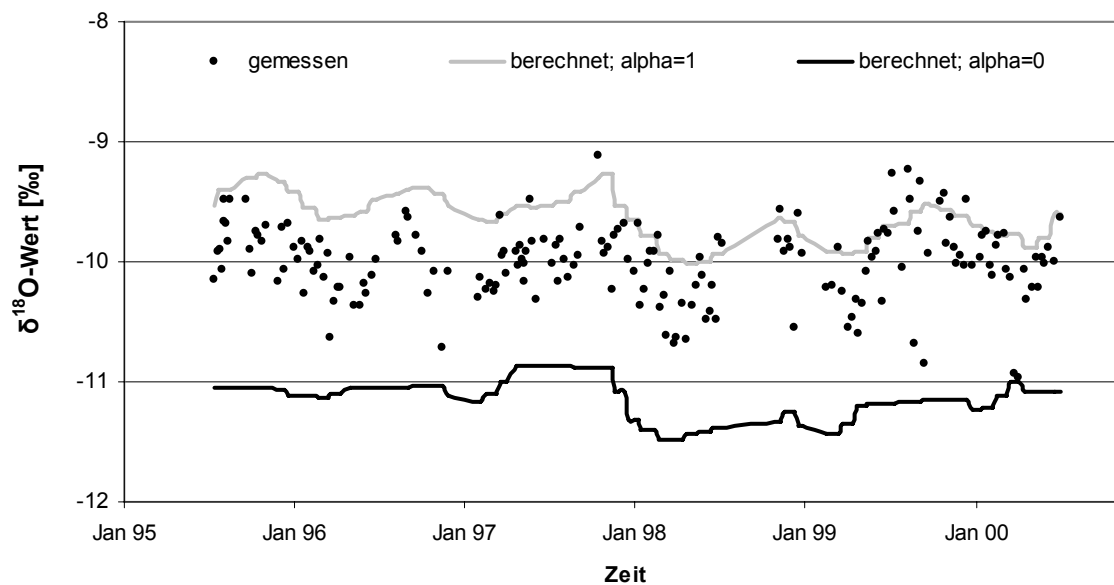


Abb. 5.6 Modellierungsergebnisse unter Verwendung der saisonalen Infiltrationsparameter 1 bzw. 0 (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 25 Monaten)

Obwohl die Jahresfluktuationen zu erkennen sind, liegt die mithilfe eines Infiltrationsparameters von 1 berechnete Kurve deutlich zu hoch. Das Mittel der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Outputs liegt bei $-9,46\text{ ‰}$, d.h. es wird ein zu hoher Gehalt an ^{18}O -Isotopen im Abfluss vorhergesagt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der Anteil des isotopisch leichten Sommerniederschlages ohne die Korrektur durch die Infiltrationsparameter überschätzt wurde. Bei einer Gewichtung der Inputfunktion mithilfe eines saisonalen Infiltrationsparameters von 0 kommt es zu einer noch extremeren Abweichung in entgegengesetzter Richtung. Durch die Vernachlässigung des Beitrages des isotopisch leichteren Sommerniederschlages wird der Output stark unterschätzt. Das geschätzte Mittel im Abfluss lag in dieser Modellierung bei $-11,14\text{ ‰}$. Für beide angewandten Modelle ist die maximale Modelleffizienz für alle plausiblen Parameterkombinationen negativ. Dies bedeutet, dass statt dieser Modellierung die Verwendung des Mittelwertes der Messwerte eine bessere Anpassung darstellt.

5.3.3 Fazit

Die diskutierten Modellierungsergebnisse bestätigten frühere Ergebnisse (z.B. VITVAR 1998), nach denen die Isotopensignatur des Grundwassers auch durch den sommerlichen Niederschlag geprägt ist. Aus diesem Grund ergibt die Modellierung mithilfe eines Infiltrationsparameters von 1 geringere Abweichungen von den Messwerten als die Vernachlässigung des sommerlichen Niederschlages durch einen Infiltrationsparameter von 0. Diese Beobachtung entspricht den Ergebnissen von GRABCZAK ET AL. (1984).

Es wurde deutlich, wie wichtig die *differenzierte* Betrachtung des Beitrages des sommerlichen Niederschlages zur Grundwasserneubildung ist. Aufgrund dieser Erkenntnisse wurden in der weiteren Modellierung sommerlicher und winterlicher Niederschlag variabel gewichtet, wobei verschiedene Methoden (fortschreitend von einfachen zu komplexen Modellen) getestet wurden, um die allgemeinen Unsicherheiten der Lumped-Parameter-Modelle und der einzelnen Modellierungsansätze zu untersuchen.

5.4 Saisonale Infiltrationsparameter

5.4.1 Bestimmung der saisonalen Infiltrationsparameter über die Wasserbilanz

Der erste Ansatz zur Bestimmung des saisonalen Infiltrationsparameters folgte der in Abschnitt 3.2.4.2 dargestellten Betrachtung des Verhältnisses aus Abfluss zu Niederschlag. In Abbildung 5.7 sind die mittleren monatlichen Niederschlags- und Abflusssummen für das Bruggagebiet, basierend auf Messwerten von 1975 bis 1993, aufgetragen. Deutlich ist zu erkennen, wie der Abfluss im zweiten Teil des Jahres hinter dem Niederschlag zurückbleibt. Der Grund hierfür sind die hohe Evapotranspiration im Sommer und die Schneerücklage im Winter.

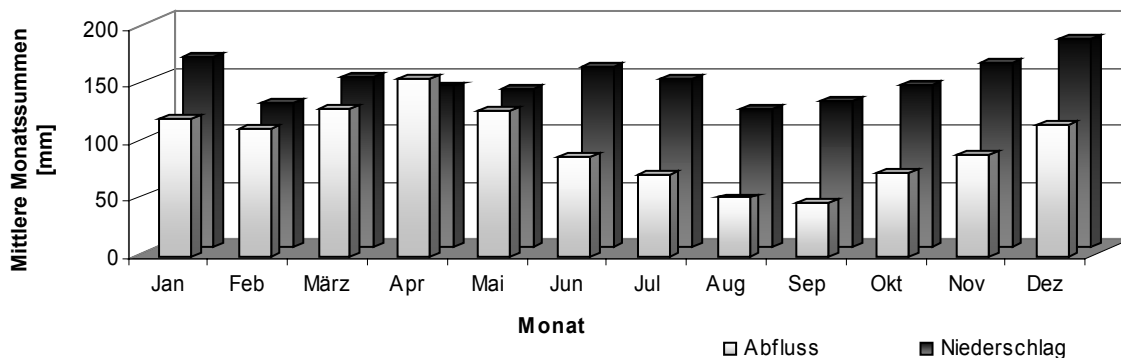


Abb. 5.7 Mittlere unkorrigierte monatliche Niederschlags- und Abflusssummen der Messstation "St. Wilhelm" des Zeitraums 1975 bis 1993

Im April wird, bedingt durch die Schneeschmelze, die mittlere monatliche Niederschlagssumme durch die des Abflusses übertroffen. Diese Beobachtung bestätigt die zuvor getroffene Entscheidung, das Winterhalbjahr als Zeitraum von November bis einschließlich April abzugrenzen. Somit wird erreicht, dass ein Großteil des während des Winters als Schnee gespeicherten Wasservolumens im selben Halbjahr zum Abfluss kommt. Durch Einsetzen der mittleren Halbjahressummen in Formel 3.26 ergab sich ein sommerlicher bzw. winterlicher Infiltrationskoeffizient von 0,55 bzw. 0,78 und somit ein Infiltrationsparameter von 0,71.

Dabei muss ein systematischer Fehler betrachtet werden, der aufgrund der Konzeption dieser Bestimmungsmethode begangen wird: Grundlage dieser Berechnungsmethode ist die Annahme, dass

vom Abfluss auf die Grundwasserneubildung geschlossen werden kann. Dies ist aber nicht für jeden beliebigen Zeitraum richtig. Im Jahresverlauf kann die Speicherhöhe des Grundwassers schwanken. Dabei ist es in unseren Breiten typischerweise so, dass der Grundwasserspeicher in den Wintermonaten aufgefüllt wird und zum Ende des Frühjahrs seinen Höchststand erreicht. Während des Sommers entleert sich der Speicher bei nur geringer Grundwasserneubildung, so dass er meist zu Beginn des Winters seinen Tiefststand erreicht.

Aus diesen Gründen ist die Reaktion des Grundwasserspeichers leicht verzögert, so dass durch die mengenmäßige Bilanzierung und Übertragung dieser Werte auf die Infiltrationskoeffizienten diese für den Sommer eher überschätzt und für den Winter eher unterschätzt werden. Somit ist der aufgrund dieser Methode ermittelte saisonale Infiltrationsparameter eher zu groß.

5.4.2 Bestimmung der saisonalen Infiltrationsparameter über den Stofftransport

Während die erste Methode zur Bestimmung des saisonalen Infiltrationsparameters auf dem Wasserhaushalt beruhte, bilanzierte der zweite Ansatz den Stofftransport. Aufgrund der Konservativität des Tracers müssten die langfristigen Mittel der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag und Abfluss übereinstimmen. Mithilfe der Methode nach Gleichung 3.27 wurden die Mengen und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von sommerlichem bzw. winterlichem Niederschlag zusammengefasst und die Beiträge des Niederschlages der beiden Halbjahre zur Grundwasserneubildung so gewichtet, dass der $\delta^{18}\text{O}$ -Mittelwert des Abflusses erreicht wurde. Diese Methode liefert zwar ein eindeutiges Ergebnis, ist aber eine reine Anpassungsprozedur, die verhindert, dass der Output systematisch unter- oder überschätzt wird.

Die Mittelwerte des Outputs wurden für die beiden Einzelperioden bzw. für den kombinierten Untersuchungszeitraum mit $-9,96\text{ ‰}$, $-10,05\text{ ‰}$ bzw. $-10,01\text{ ‰}$ bestimmt. Daraus ergaben sich Infiltrationsparameter von 0,63, 0,57 bzw. 0,60. MALOSZEWSKI ET AL. (1992) schätzen die auf diesem Weg ermittelten Werte als glaubwürdiger ein als die über die Wasserbilanz bestimmten. Die mithilfe des Stofftransportes ermittelten Infiltrationsparameter lagen für die betrachteten Zeitreihen zudem mitten in dem von MALOSZEWSKI & ZUBER (1996) angegebenen engeren Intervall der Infiltrationsparameter, welches sich für gemäßigte Klimate von 0,5 bis 0,7 erstreckt.

Aufgrund der Höhenlage des Einzugsgebietes erscheint aber auch der durch die Betrachtung des Wasserhaushaltes berechnete Infiltrationsparameter von 0,71 nicht unrealistisch. Bedingt durch die Höhenlage und die ganzjährig gute Wasserverfügbarkeit (VON WILPERT ET AL. 1996) ist ein hoher Beitrag von sommerlichem Niederschlag begründbar. In den Sommermonaten herrscht die höchste Frequenz konvektiver Starkregenereignisse, in deren Verlauf Niederschlagswasser schnell durch Makroporen unter die Wurzelzone gelangen kann.

Auch in dieser Prozedur wurde ein systematischer Fehler begangen: Beim Gleichsetzen von Input und Outputkonzentration müsste strenggenommen die Verweilzeitstruktur des Wassers als Gewichtung schon mit eingehen. Innerhalb der Periode 1971 bis 2002 trägt nicht jeder $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Inputs in gleicher Weise zum Mittel der Outputfunktion während der Beobachtungsperiode bei. Ein arithmetisches Mittel ist deshalb auch dann ungenügend, wenn es mit der Niederschlagsmenge und dem Infiltrationskoeffizienten gewichtet wird.

5.4.3 Bestimmung der saisonalen Infiltrationsparameter über Kalibrierung

Das Exponential-Piston-Flow-Modell, mit dem alle Modellierungen durchgeführt wurden, beinhaltet zwei Modellparameter, die mittlere Verweilzeit t_t und den Aufteilungsparameter η , der das Verhältnis zwischen Gesamtabfluss und dem Abflussanteil quantifiziert, der durch eine exponentielle Verweilzeitverteilung charakterisiert wird. In einem dritten Ansatz zur Bestimmung des Infiltrationsparameters wurde der Infiltrationsparameter neben den beiden schon bestehenden Kalibrierungsparametern in die Prozedur der Modellkalibrierung aufgenommen.

Das schon beschriebene Trial-and-Error-Verfahren wurde zu diesem Zweck um einen Parameter erweitert und für alle drei Zeitperioden separat durchgeführt. Es wurde jeweils ein Infiltrationsparameter bestimmt und für diesen die Eingangszeitreihe für das Modell bestimmt. In einer zweidimensionalen Matrix wurden die Modellparameter t_t und η variiert und für jede Kombination das Modell ausgeführt und die Modelleffizienz bestimmt. Die jeweils maximalen Modelleffizienzen, die für einen Infiltrationsparameter erreicht werden konnten, wurden zusammen mit den dazugehörigen mittleren Verweilzeiten protokolliert.

Unter den zusammengestellten Datensätzen konnte dann das Maximum aller Parameterkombinationen gesucht werden. Dabei konnte aufgrund von uneindeutigen Modellierungsergebnissen nur für den zweiten Untersuchungszeitraum die Modelleffizienz maximiert werden. Dieses Maximum ergab sich für einen Infiltrationskoeffizienten von 0,87. Für die anderen Datensätze gab es kein eindeutiges Maximum innerhalb des Datensatzes.

5.4.4 Modellierungsergebnisse mithilfe verschiedener Infiltrationsparameter

Für den winterlichen mittleren Infiltrationsparameter (α_w) wurde über die Wasserbilanz (Abschnitt 5.4.1) ein Wert von 0,78 ermittelt. Dieser entspricht auch ungefähr dem Mittelwert der von UHLENBROOK (1999) bestimmten mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten der Monate November bis April, welcher 0,77 beträgt. Er wurde als plausibel angesehen und für die anderen beiden Ansätze, durch die lediglich der Infiltrationsparameter (α) ermittelt werden kann, als winterlicher Infiltrationskoeffizient angesetzt. Letztlich ist bei der saisonalen Gewichtung allein der Infiltrationsparameter von Bedeutung für die Modellierung, da in die Gewichtungsfunktion der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages nur das *Verhältnis* der jahreszeitlichen Beiträge, also der Quotient aus sommerlichem und winterlichem Infiltrationskoeffizient (α_s/α_w), eingeht.

Tab. 5.3 Zusammenfassung der besten Modellierungsergebnisse mit aufgrund der verschiedenen saisonalen Infiltrationsparameter gewichteten und monatlich aufgelösten Inputfunktionen

Bestimmungs- Methode		Zeitraum I 07/1995-12/1997	Zeitraum II 01/1998-06/2000	Zeitraum I + II 07/1995-06/2000
1	α_s/α_w	0,55/0,78	0,55/0,78	0,55/0,78

(Wasser-Bilanz)	α	0,71	0,71	0,71
	t_t	20 Monate	30 Monate	25 Monate
	η	1,02	1,01	1,01
	R_{eff}	-0,150	0,166	0,072
2 (Stoff-transport)	α_s/α_w	0,49/0,78	0,44/0,78	0,47/0,78
	α	0,63	0,57	0,60
	t_t	27 Monate	72 Monate	47 Monate
	η	1,03	1,00	1,01
	R_{eff}	0,014	0,056	0,076
3 (Kalibrierung)	α_s/α_w		0,67/0,78	
	α	<i>kein eindeutiges</i>	0,87	<i>kein eindeutiges</i>
	t_t	<i>Optimum in R_{eff}</i>	19 Monate	<i>Optimum in R_{eff}</i>
	η	<i>bestimmbar</i>	1,01	<i>bestimmbar</i>
	R_{eff}		0,250	

In Tabelle 5.3 sind die jeweils besten Modellierungsergebnisse mit der maximalen Modelleffizienz (R_{eff}) für die verschiedenen Zeiträume und Bestimmungsmethoden der Infiltrationsparameter zusammengestellt. Zusätzlich sind die Modellparameter aufgeführt, bei denen die beste Anpassung erreicht wurde.

Bei der Bestimmung der mittleren Verweilzeit mithilfe der verschiedenen saisonalen Infiltrationsparameter ergab sich innerhalb der untersuchten Zeitreihen eine hohe Spannbreite an Ergebnissen. Die maximale Modelleffizienz wurde für Modelle erreicht, deren mittlere Verweilzeit zwischen 19 und 72 Monaten schwankt. Im Gegensatz zur mittleren Verweilzeit variiert der Aufteilungsparameter innerhalb der Modelle mit der jeweils höchsten Modelleffizienz nur sehr gering. Eine maximale Modelleffizienz ergab sich bei den verschiedenen Kombinationen für Werte zwischen 1,00 und 1,03.

Dabei zeigte sich anhand der ersten beiden Modellierungsreihen, für welche in jedem Zeitabschnitt ein eindeutiges Optimum bestimmt werden konnte, der Vorteil einer verlängerten Zeitreihe. Die extremen Unterschiede in den auf der Basis der Teilperioden bestimmten Ergebnisse konnten durch die Modellierung des Gesamtzeitraumes ausgeglichen werden. Trotzdem wurde mithilfe der zweiten Methode eine mittlere Verweilzeit bestimmt, die mit 47 Monaten fast doppelt so hoch ist wie der für den selben Zeitraum über den ersten Ansatz bestimmten Wert von 25 Monaten.

Die z.T. sehr hohen Verweilzeiten ergeben sich daher, dass aufgrund der Streuung der Messwerte des Outputs lange Verweilzeiten eine ausgeglichene Funktion und damit geringere Residuen bewirken können. Dies bedeutet, dass es für schlechte Anpassungen u.U. dazu kommt, dass die Modelleffizienz durch unrealistisch hohe mittlere Verweilzeiten erhöht wird. Die Methodik der Optimierung der Modelleffizienz zur Kalibrierung kann somit zu unplausibel langen Verweilzeiten führen. Dieses Phänomen konnte insbesondere für den zweiten Ansatz beobachtet werden, bei dem der Infiltrationsparameter über den Stofftransport bestimmt worden war. Die Obergrenze plausibler Lösungen, bei denen keine Verzerrung der mittleren Verweilzeit beobachtet werden konnte, reduzierte sich somit von 72 auf 30 Monate.

Für die einzelnen Kombinationen der Zeitabschnitte und Ansätze zur Bestimmung des Infiltrationsparameters zeigte sich ein jeweils eigenes Niveau der Modelleffizienzen. In einem Fall konnte sogar keine positive Modelleffizienz erreicht werden. Dabei ist innerhalb der verschiedenen

Betrachtungszeiträume kein Muster ersichtlich. Während beim ersten Ansatz (5.4.1) die zweite Periode die höchste Modelleffizienz lieferte, ließ sich mit dem zweiten Ansatz (5.4.2) der gesamte Untersuchungsraum am besten durch das Modell darstellen. Die höchste Modelleffizienz überhaupt wurde für den zweiten Modellierungszeitraum mithilfe des dritten Ansatzes (5.4.3) erreicht.

Für diesen dritten Ansatz gestaltete sich allerdings die eindeutige Bestimmung der mittleren Verweilzeit als schwierig. Dadurch, dass die Optimierung der Modelleffizienz mit der Kalibrierung des Infiltrationsparameters verknüpft war, konnten z.T. keine eindeutigen Maxima der Modelleffizienz gefunden werden. In den Abbildungen 5.8 und 5.9 sind die Ergebnisse von 24 bzw. 14 Sets an Optimierungsdurchläufen zusammengefasst, von denen nur das jeweils beste Modell für jeden angenommenen Infiltrationsparameter in die Darstellung einging. Die schwarze Linie kennzeichnet den Verlauf der maximalen Modelleffizienz, und die Balken zeigen die mittlere Verweilzeit, für die das Optimum der Modelleffizienz erzielt wurde. Der Aufteilungsparameter η wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht in die Abbildungen aufgenommen. Wie auch bei den anderen zwei Ansätzen zur Bestimmung des Infiltrationsparameters schwankte er zwischen 1,00 und 1,03.

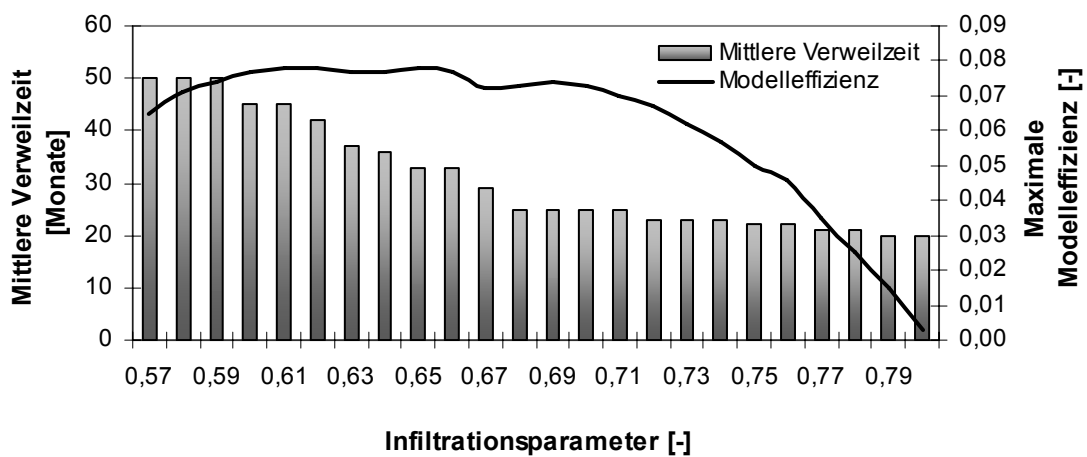


Abb. 5.8 Modelleffizienz und mittlere Verweilzeit als Funktion des Infiltrationsparameters für den Gesamtzeitraum 07/1995 bis 06/2000

Für den Gesamtzeitraum (Abbildung 5.8) ist erkennbar, dass sich die maximal erzielbare Modelleffizienz für Modellierungen, die mit einem Infiltrationsparameter zwischen 0,6 bis 0,7 durchgeführt wurden, nur wenig änderte. Gleichzeitig reichten die durch die Modelle bestimmten mittleren Verweilzeiten von 25 bis 45 Monaten. Somit war eine verlässliche Bestimmung der mittleren Verweilzeit nicht möglich. Für den Zeitraum II (Abbildung 5.9) konnte dagegen ein eindeutiges Maximum der Modelleffizienz durch Kalibrierung ermittelt werden; die mittlere Verweilzeit im Bereich dieses Maximums schwankt nur wenig.

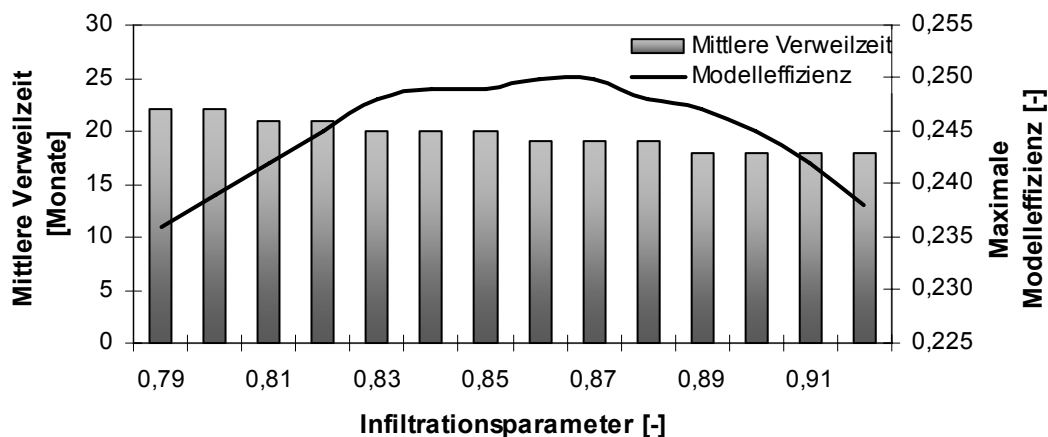


Abb. 5.9 Modelleffizienz und mittlere Verweilzeit als Funktion des Infiltrationsparameters für die Periode 10/1998 bis 06/2000

5.4.5 Fazit

Anhand der durchgeführten Modellierungen zeigte sich für den vorliegenden Datensatz folgender Trend: Mit der Zunahme des Infiltrationsparameters sinkt die mittlere Verweilzeit, für die die Modelleffizienz ein Maximum erreicht. Diese Beziehung gilt für alle untersuchten Zeiträume. Es scheint jedoch, dass dieses Phänomen Zeitreihen-spezifisch ist. GRABCZAK ET AL. (1984) hatten in ihrem Datensatz genau den gegenläufigen Trend beobachtet.

Wie die Modellergebnisse zeigten, konnte in den meisten Fällen schon durch die zusätzliche Gewichtung des Niederschlags mit dem saisonalen Infiltrationskoeffizienten eine Verbesserung der Modelle erreicht werden. Diese Beobachtung stimmt mit der von VITVAR (1998) überein. Aus den realistischen Modellanpassungen, die mit den unterschiedlichen Ansätzen für die verschiedenen Zeiträume erzielt wurden, ließen sich mittlere Verweilzeiten zwischen 19 und 30 Monaten bestimmen. Dieser Wertebereich umschließt sehr gleichmäßig den mithilfe der Amplitudendämpfung ermittelten Wert von 25 Monaten und lässt auf einen Unsicherheitsbereich bei der Bestimmung der mittleren Verweilzeit mithilfe von Lumped-Parameter-Modellen von ca. sechs Monaten schließen.

Durch die Modellierung konnten verschiedene Probleme und Schwachstellen der Methodik aufgezeigt werden. Erstens kommt es bei der Modellanpassung durch Optimierung der Modelleffizienz z.T. zu unplausibel langen Verweilzeiten. Hier ist das Gespür des Modellierers gefragt, diese Verzerrung zu erkennen und das Ergebnis mit Vorbehalt zu betrachten.

Zweitens wird eine gewisse Willkürlichkeit in der Bestimmung der mittleren Verweilzeit deutlich. So ist z.B. erkennbar, dass die auf der Basis des Stofftransportes bestimmten mittleren Verweilzeiten länger sind als die unter Verwendung der Wasserbilanz. Dies ist neben dem oben angesprochenen Problem des Optimierungsverfahrens darauf zurückzuführen, dass die mithilfe des Stofftransport-Ansatzes bestimmten Infiltrationsparameter systematisch niedriger waren als bei den anderen Ansätzen. Es lässt sich folgern, dass die verschiedenen Verfahren zur Ableitung des saisonalen Infiltrationsparameters zwar als mathematisch exakt aber nur eingeschränkt objektiv eingestuft werden können. Sie ermöglichen, dass durch Ausnutzen des Ermessungsspielraums in Bezug auf die zu verwendende Bestimmungsmethode z.T. großer Einfluss auf die Ergebnisse genommen wird.

Drittens kam es durch die Verwendung des Infiltrationsparameters als dritte Kalibrierungsgröße z.T. zu Uneindeutigkeiten bezüglich der Modelloptimierung. Aus diesem Grund wird dieses Verfahren als ungeeignet für die Bestimmung des Infiltrationsparameters angesehen.

5.5 Verwendung von Halbmonatsmitteln in der Outputfunktion

In den Outputfunktionen konnte eine Streuung der Messwerte beobachtet werden, durch die eine Optimierung der Modellparameter erschwert zu werden schien. Sie wird ebenfalls als ein Grund für die Tendenz zur Berechnung von unplausibel langen Verweilzeiten gewertet. Es wurde deshalb

getestet, ob eine gemittelte Outputfunktion eine verbesserte und schärfer definierte Kalibrierung ermöglicht. Dazu wurden die einzelnen $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte eines Halbmonats zu einem anhand der jeweiligen Abflüsse gewichteten Mittelwert reduziert.

Die Modellierungsergebnisse unter Verwendung der neuen gemittelten Outputfunktion zeigten jedoch weder in der Schärfe der Maxima noch in der Anpassungsgüte eine Verbesserung. Der Ansatz wurde deshalb nicht weiter verfolgt. Eine weitere Modifikation der Outputfunktion, die Aussonderung vermutlich durch Direktabfluss beeinflusster Messwerte, wird im Abschnitt 5.10 diskutiert.

5.6 Höhere zeitliche Auflösung der Inputfunktion

Um die Auswirkung der zeitlichen Auflösung auf das Modellierungsergebnis zu beurteilen, wurde die zeitliche Auflösung der Inputfunktion verdoppelt und die folgenden Simulationsreihen mit einer halbmonatlich aufgelösten Inputfunktion durchgeführt. Zur Gewichtung des Inputs wurden die über die Wasserbilanz bestimmten saisonalen Infiltrationskoeffizienten 0,55 bzw. 0,78 verwendet.

Für den Zeitraum 1995-2000 ergab sich dabei eine maximale Modelleffizienz von 0,097 für eine mittlere Verweilzeit von 25 Monaten und einen Aufteilungsparameter von 1,00 (Abbildung 5.10). Im Vergleich zur entsprechenden Modellierung mit monatlicher Auflösung wurde die mittlere Verweilzeit von 25 Monaten bestätigt und der Aufteilungsparameter geringfügig verändert (1,00 statt 1,01). Die Modelleffizienz konnte mithilfe des höher aufgelösten Datensatzes um 35 % (von 0,072 auf 0,097) erhöht werden. Der mittlere berechnete $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Outputs beträgt $-9,99\text{‰}$ und stimmt sehr gut mit dem gemessenen ($-10,01\text{‰}$) überein.

Zusätzlich zur saisonalen Gewichtung des Niederschlages konnte somit eine weitere Modellverbesserung durch die Erhöhung der zeitlichen Auflösung des Modells erreicht werden. Die Modellierungsdurchläufe bestätigten dabei die mittlere Verweilzeit von 25 Monaten. Trotzdem bietet die saisonale Betrachtung keine zufriedenstellende Integration des Prozessverständnisses in die Modellierung. Aus diesem Grund wurden die Möglichkeiten und Auswirkungen von differenzierteren Gewichtungen der Inputfunktion untersucht.

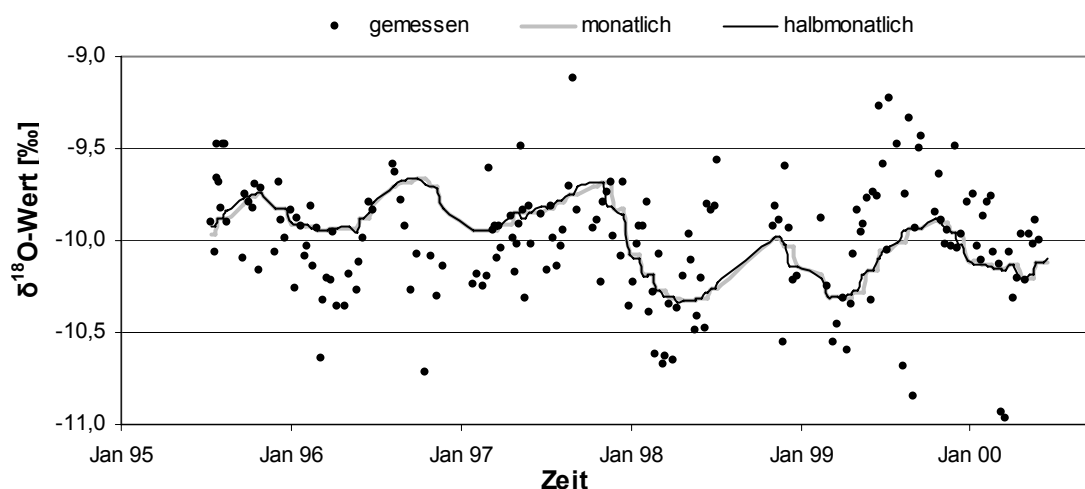


Abb. 5.10 Modellierungsergebnisse unter Verwendung des saisonalen Infiltrationsparameters in monatlicher bzw. halbmonatlicher Auflösung (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 25 Monaten)

5.7 Mittlere halbmonatliche Infiltrationskoeffizienten

Für die folgenden Modellierungen wurde die halbmonatliche Auflösung beibehalten und angestrebt, die Modellergebnisse durch Verbesserung der Infiltrationskoeffizienten zu verbessern. Abbildung 5.11 zeigt den Verlauf der von UHLENBROOK (1999) unter Verwendung des konzeptionellen Niederschlag-Abfluss-Modells HBV (BERGSTRÖM 1992) bestimmten mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten, welche durch Interpolation zu Halbmonatswerten umgewandelt wurden.

Der zeitliche Verlauf des Infiltrationskoeffizienten ist deutlich ausgeprägt. Er erreicht aufgrund der Schneeschmelze sein Maximum im Frühsommer (März/April) und sein Minimum im August. Dieser komplexe Verlauf ließe sich durch eine einfache Sinusfunktion (MCGUIRE ET AL. 2002) nur ungenügend nachstellen.

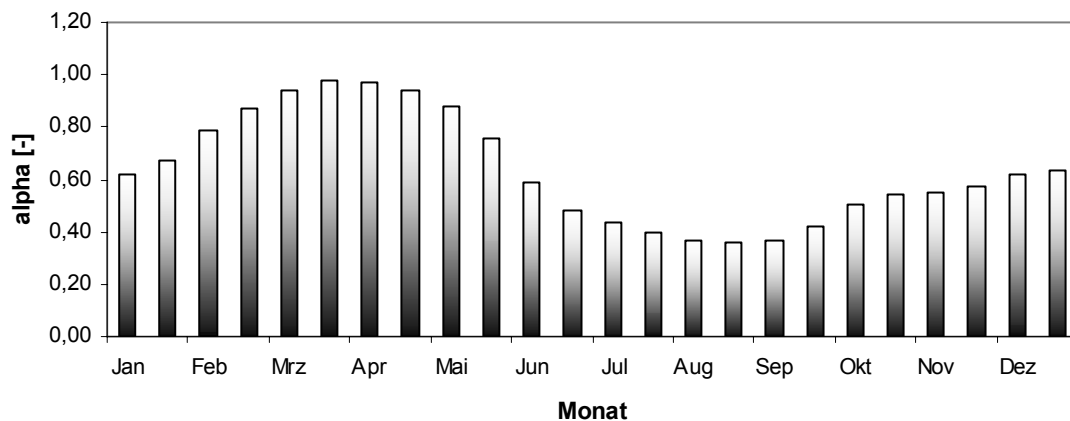


Abb. 5.11 Verlauf der mit HBV modellierten Infiltrationskoeffizienten (nach UHLENBROOK 1999)

Für die halbmonatlich aufgelöste Modellierung mithilfe der Gewichtung über die mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten wurde eine maximale Modelleffizienz bei einer mittleren Verweilzeit von 23 Monaten und einem Aufteilungsparameter von 1,00 erzielt (Abbildung 5.12). Die Modelleffizienz konnte gegenüber dem vorherigen Ansatz weiter gesteigert werden. Sie liegt zudem mit 0,148 höher als der Maximalwert, der für diesen Zeitraum durch Aufnahme des saisonalen Infiltrationsparameters in die Kalibrierung erreicht werden konnte. Der mittlere $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Outputs beträgt für das im Abschnitt 5.6 vorgestellte Modell $-9,99\text{‰}$.

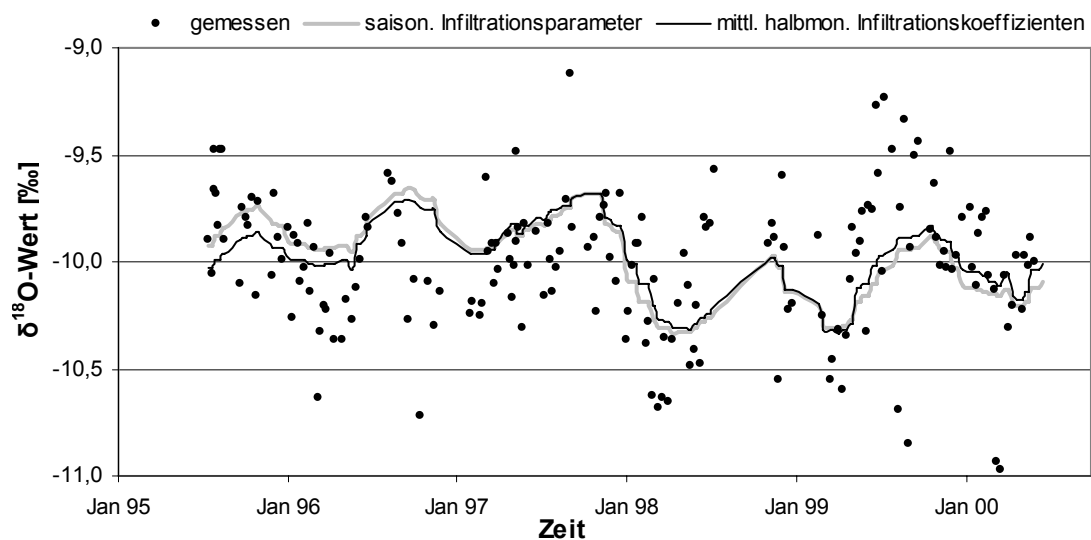


Abb. 5.12 Modellierungsergebnisse mithilfe des saisonalen Infiltrationsparameters bzw. mithilfe der mittleren halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 23 Monaten)

Durch die Verwendung der mittleren halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten konnte die berechnete Kurve im ersten Teil des Untersuchungszeitraumes etwas abgesenkt werden. Trotzdem liegen die berechneten Werte in der ersten Hälfte der untersuchten Zeitreihe eher zu hoch. Aufgrund dieser Beobachtung wurde die Temperaturregression zur Rückwärtsextrapolation der Inputfunktion untersucht. Durch einen Vergleich der synthetischen mit den Messdaten im Zeitraum Oktober 1993 bis Februar 2002 konnte gezeigt werden, dass die Regressionsgleichungen den wahren $\delta^{18}\text{O}$ -Wert überschätzen. Das Mittel für diesen Zeitraum liegt für die synthetischen Werte mit $-9,34\text{‰}$ um $0,24\text{‰}$ höher als der Mittelwert der Messwerte ($-9,58\text{‰}$).

Durch eine Korrektur der künstlichen Inputfunktion konnte die Modelleffizienz erneut um 17% gesteigert werden. Sie erreichte für eine mittlere Verweilzeit von $26,5$ Jahren und einen Aufteilungsparameter von $1,00$ ihr Maximum von $0,173$. In Abbildung 5.13 ist gut zu erkennen, wie aufgrund der modifizierten Temperaturregression in der ersten Hälfte des Untersuchungszeitraumes geringere $\delta^{18}\text{O}$ -Werte berechnet werden. In dem Maß, wie der Anteil des Niederschlagswassers früherer Ereignisse am Abfluss abnimmt, gleicht sich die neue der alten Kurve an.

Diese Betrachtung zeigt, dass nicht automatisch davon ausgegangen werden kann, dass über die Temperaturregression eine regionale Übertragung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte problemlos möglich ist. Ein Grund für die unterschiedlichen Niveaus der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte könnte darin begründet sein, dass bei der Übertragung allein die Temperatur und nicht die Höhenlage der Stationen berücksichtigt wurde. Diese aufgrund tatsächlicher Messwerte vorgenommene Korrektur der Inputfunktion könnte ein Lösungsansatz für das Problem der überschätzten $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss sein, von denen UHLENBROOK (1999) berichtete. Sie bietet eine Alternative zu der von ihm eingeführten zweiten Komponente, mithilfe derer er das Niveau der berechneten Outputfunktion korrigierte (siehe Abschnitt 3.2.4.4).

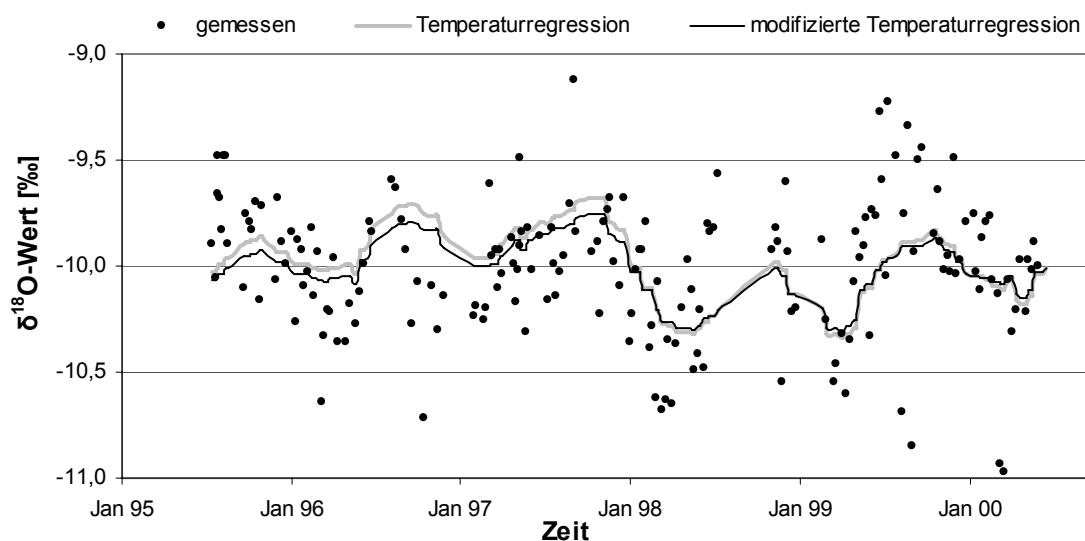


Abb. 5.13 Modellierungsergebnisse bei Rückwärtsextrapolation mithilfe der ursprünglichen bzw. der modifizierten Temperaturregression (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)

Die unter Verwendung des Lumped-Parameter-Modells erzielte Modellgüte konnte durch die Erhöhung der zeitlichen Auflösung, die Einführung von mittleren halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten sowie durch die Modifikation der Temperaturregression jeweils verbessert werden. Die bisherigen Modellergebnisse sind in der Tabelle 5.4 zusammengestellt. Die erreichte Modelleffizienz von 0,173 bleibt deutlich unter dem in Abschnitt 5.3.1 bestimmten Vergleichswert von 0,295, der die Variabilität der Messergebnisse berücksichtigt.

Tab. 5.4 Zusammenfassung der Verbesserungen der Modellgüte aufgrund verschiedener Modellierungsansätze

Modellierungsansatz	Modellparameter	Modelleffizienz
(1) Saisonaler Infiltrationsparameter	$t_i = 25$ Monate, $\eta = 1,01$	$R_{\text{eff}} = 0,072$
(2) Halbmonatliche Auflösung	$t_i = 25$ Monate, $\eta = 1,00$	$R_{\text{eff}} = 0,097$
(3) Mittlere monatliche Infiltrationskoeffizienten	$t_i = 23$ Monate, $\eta = 1,00$	$R_{\text{eff}} = 0,148$
(4) Modifikation der Temperaturregression	$t_i = 26,5$ Monate, $\eta = 1,00$	$R_{\text{eff}} = 0,173$

Die bisherigen Modellierungsreihen waren durchgeführt worden, um die Modellunsicherheit durch den Vergleich der besten Modellergebnisse verschiedener Modellansätze zu bestimmen. In einem zweiten Schritt wurde die Parameterunsicherheit innerhalb eines Ansatzes untersucht. Dazu wurde für das Modell (4) eine Sensitivitätsbetrachtung durchgeführt. Innerhalb eines vorher bestimmten plausiblen Parameterbereichs wurde für jede Parameterkombination eine Modellierung durchgeführt und die Modelleffizienz berechnet. Für die Berechnung wurden die mittlere Verweilzeit und der Aufteilungsparameter in Inkrementen von einem halben Monat bzw. 0,01 variiert. Diese Werte sind in Abbildung 5.14 als „response surface“ dreidimensional aufgetragen.

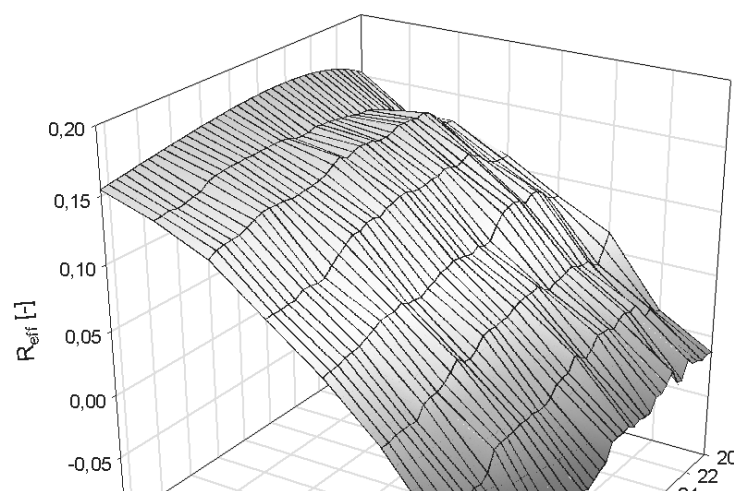


Abb. 5.14 **Sensitivitätsanalyse: Modelleffizienzen für verschiedene Parameterkombinationen des Exponential-Piston-Flow-Modells für das Bruggagebiet**

Zwei lokale Maxima der Modelleffizienz berechneten sich für mittlere Verweilzeiten von 30,5 bzw. 25,5 Monaten und Aufteilungsparameter von 1,01 bzw. 1,02. Das globale Maximum der Modelleffizienz ergab sich für eine mittlere Verweilzeit von 26,5 Monaten und einen Aufteilungsparameter von 1,00, welcher die Untergrenze seines Definitionsbereiches darstellt. Das Maximum ist mit einer Modelleffizienz von 0,173 zwar eindeutig aber nur sehr schwach ausgeprägt. Die mittlere Verweilzeit erweist sich besonders im Bereich des globalen Maximums als wenig sensitiv. Selbst wenn man nur die Parameterkombinationen zuließe, die eine Modelleffizienz von mehr als 0,170 ergeben, würde die Spannweite der mittleren Verweilzeiten von 24,5 bis 30,5 Monaten reichen.

In der Zusammenschau der bisherigen Ergebnisse kann gefolgert werden, dass die wahre mittlere Verweilzeit bei 25 Monaten und damit in der gleichen Größenordnung wie der von UHLENBROOK (1999) bestimmte Wert von 24 Monaten liegt. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass der Unsicherheitsbereich dieses Wertes mit mindestens sechs Monaten anzugeben ist. Die Angabe der wahrscheinlich mittleren Verweilzeit des Wassers im Bruggagebiet konnte aufgrund der verlängerten Zeitreihe auf eine breitere Basis gestellt werden. Eine Einengung des Unsicherheitsbereiches gelang dagegen nicht.

5.8 Methoden zur Rückwärtsextrapolation der Inputfunktion

5.8.1 Zeitlich verkürzte Temperaturregression

Um die Bedeutung der langen Rückwärtsextrapolation der Inputfunktion zu bewerten, wurde die Zeitspanne der synthetischen Werte auf das Fünffache der erwarteten mittleren Verweilzeit reduziert, wie von MALOSZEWSKI (2002) vorgeschlagen. Dazu wurde die Temperaturregression nur um zehn Jahre, von Oktober 1993 bis September 1983, zurückverlängert. Ab Oktober 1993 lagen Messwerte vor. Diese Daten wurden dann mithilfe der Niederschlagsmengen und der mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten gewichtet.

Die Modelleffizienz konnte für eine mittlere Verweilzeit von 27,5 Monaten und einen Aufteilungsparameter von 1,00 optimiert werden. Sie lag mit 0,166 etwas unter dem Maximalwert von 0,173, der mithilfe des Modells mit der langen Inputfunktion ab 1971 erzielt werden konnte. Dieses Ergebnis bestätigt die Bedeutung der langen Rückwärtsextrapolation der Inputfunktion.

5.8.2 Sinusfunktion

In einem zweiten Ansatz wurde für den Zeitraum 1971 bis 1993 eine alternative Inputfunktion erstellt, indem die zuvor (in Abschnitt 5.2) angepasste regelmäßige Sinusschwingung eingesetzt und mit den jeweiligen Niederschlagsmengen und den Infiltrationskoeffizienten gewichtet wurde.

Ein Maximum der Modelleffizienz (0,156) ergab sich dabei für das reine Exponentialmodell mit einer mittleren Verweilzeit von 26 Monaten. Damit ist die Anpassungsgüte etwas schlechter als die Werte, die auf der Temperaturregression basieren. Trotzdem erwies sich dieser Ansatz als eine effektive Methode zur Verlängerung der Inputfunktion für den Fall, dass die erforderlichen Daten zur Erstellung einer Temperaturregression nicht verfügbar sind.

5.8.3 Darstellung des gesamten Inputs über eine Temperaturregression

Schließlich wurde gänzlich auf die gemessenen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag verzichtet und für alle Inputwerte die Regressionsbeziehung über die bodennahe Lufttemperatur verwendet. Dabei konnte im als plausibel angesehenen Parameterbereich kein eindeutiges Optimum der Modelleffizienz erreicht werden. Die Modelleffizienz lag zudem für alle getesteten Kombinationen im negativen Bereich, da die Regressionsbeziehung, wie bereits diskutiert, nicht imstande war, die komplexen Interaktionen der Fraktionierungsprozesse adäquat wiederzugeben. Hiermit konnten die Grenzen einer Temperaturregression aufgezeigt werden. Sie ersetzt in keinem Fall die tatsächlichen Messungen.

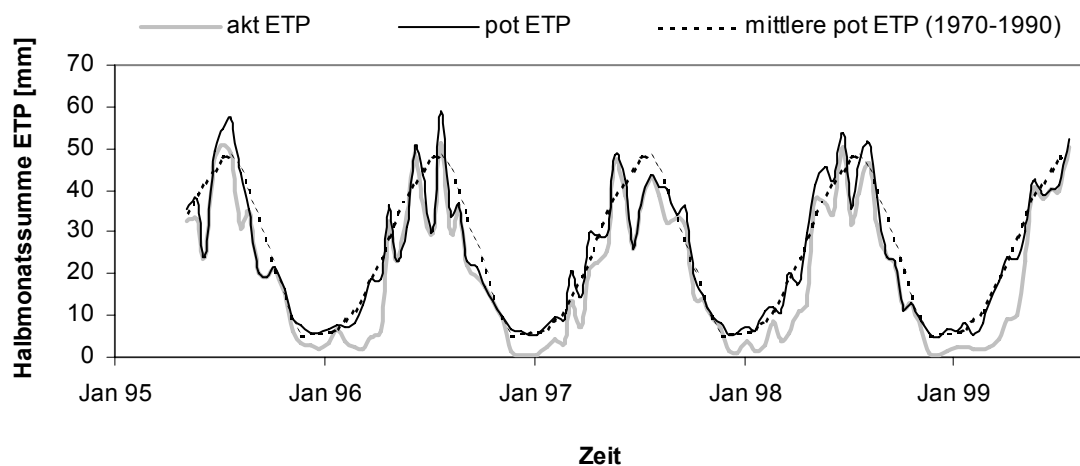
5.9 Halbmonatlich variable Infiltrationskoeffizienten

Das in den vorangegangenen Abschnitten verbesserte halbmonatlich aufgelöste Exponentialmodell mit mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten und korrigierter Temperaturregression erbrachte eine Verbesserung des bisherigen Modells und gibt den gemessenen Verlauf der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss im Zeitraum 1995 bis 2000 zufriedenstellend wieder. Die schon eingangs erkannte Schwierigkeit der Modellierung der Periode 2000 bis 2002 konnte damit allerdings nicht behoben werden. In diesem Zeitraum wurden auch mit dem verbesserten Modell die Messwerte deutlich unterschätzt. Wird das Exponentialmodell mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten für den gesamten Messzeitraum angewandt, so ergibt sich eine Modelleffizienz von $-0,128$.

Ein modelltechnischer Grund hierfür könnte die Unflexibilität der bisher verwendeten Gewichtung sein. Durch die Verwendung von *mittleren* halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten kann der Charakter „nasser“ und „trockener“ Jahre nicht nachgestellt werden. Aus diesem Grund wurde versucht, über die Evapotranspirationsverhältnisse diese Information in die Modellierung einzubeziehen.

5.9.1 Modellierung auf der Basis der Evapotranspirationsbedingungen

Abbildung 5.15 zeigt einen Vergleich der potentiellen mit der aktuellen Verdunstung im Zeitraum Mai 1995 bis Juli 1999. Die potentielle Evapotranspiration wurde mithilfe der TURC-WENDLING-Formel (3.29) durch das TAC^D-Modell berechnet und mithilfe der Bodenfeuchte und der Speicherfüllung der Sättigungsflächen in die aktuelle Evapotranspiration umgerechnet (ROSER 2001). Ebenfalls wurde der mittlere Verlauf der potentiellen Evapotranspiration des Zeitraums 1970-1990 (bestimmt nach LINDSTRÖM & BERGSTRÖM 1992) in die Darstellung aufgenommen. Aus dem dargestellten Vergleich konnte geschlossen werden, dass die Jahresverläufe der Evapotranspiration im Untersuchungsgebiet ein relativ hohes Maß an Beständigkeit aufweisen. Dies zeigt sich daran, dass der langjährige mittlere Verlauf der potentiellen Evapotranspiration die modellierte Zeitreihe der potentiellen Evapotranspiration im Zeitraum 1995-99 gut nachzeichnen kann.



Abb

bis Juli 1999 sowie der mittleren potentiellen Evapotranspiration des Zeitraums 1970 bis 1990

995

Im Vergleich zwischen potentieller und aktueller Evapotranspiration ist folgendes Muster erkennbar: Während der Sommermonate bleibt die aktuelle Verdunstung nur wenig hinter der potentiellen zurück. Dies lässt sich auf das ganzjährig hohe Wasserdargebot (VON WILPERT ET AL.

1996) zurückführen. Während der Wintermonate stagniert die aktuelle Verdunstung im Gegensatz zur potentiellen für einige Zeit auf niedrigem Niveau, bevor sie ab März/April stark ansteigt. Dieses Muster ist innerhalb der untersuchten Zeitreihe ausgesprochen konstant. Der Grund für diese Verzögerung liegt vermutlich in der Schneeschmelze. Die zur Verfügung stehende Energie wird fast komplett für die Schneeschmelze aufgewendet, so dass trotz steigender potentieller Evapotranspiration die aktuelle Verdunstung für einige Zeit stagniert.

Aus diesem Grund wurde die potentielle Evaporation für die Wintermonate korrigiert. Dazu wurde der Verlauf der winterlichen *aktuellen* Evapotranspiration der vier Winter 1995/96 bis 1998/99 gemittelt und zur *mittleren potentiellen* Evaporation der Zeitreihe 1970-1990 in Beziehung gesetzt. Aus den Quotienten der jeweiligen winterlichen Halbmonatswerte wurden Korrekturfaktoren ermittelt, mit deren Hilfe die langfristige *mittlere potentielle* Evapotranspiration in den Wintermonaten auf die langfristige *mittlere aktuelle* reduziert wurde (Abbildung 5.16).

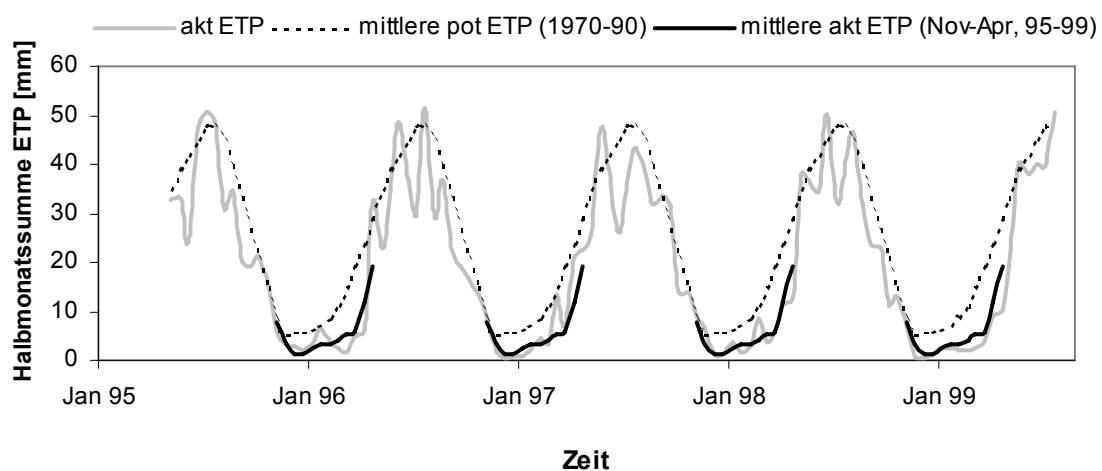


Abb. 5.16 Verlauf der potentiellen und der winterlichen mittleren aktuellen Evapotranspiration im Bruggagebiet sowie der mittleren potentiellen Evapotranspiration des Zeitraums 1970-1990

Für das Sommerhalbjahr konnte kein konstantes Verdunstungsmuster gefunden werden. Es wurde deshalb ein konstanter Korrekturfaktor für die Sommermonate ermittelt, indem ein Mittelwert der Quotienten aus aktueller und potentieller Evapotranspiration für den Zeitraum 1995-99 gebildet wurde. Dieser Mittelwert von 0,93 wurde verwendet, um die sommerliche *potentielle* auf die sommerliche *aktuelle* Evapotranspiration zu korrigieren.

Aus der korrigierten Zeitreihe der potentiellen Evapotranspiration von 1970 bis 1990 sowie aus der Zeitreihe der aktuellen Evapotranspiration von Mai 1995 bis Juli 1999 wurde eine kontinuierliche Funktion der aktuellen Verdunstung erstellt, die die gesamte Zeitspanne der Inputfunktion von 1971 bis 2002 umfasst. Hierbei wurden die verbleibenden Datenlücken (1990-95 und 1999-2002) mithilfe des zuvor bestimmten mittleren Verlaufes der aktuellen Evapotranspiration gefüllt.

Durch Vergleich mit den jeweiligen Niederschlagssummen im entsprechenden Halbmonat wurden nach Formel (3.28) halbmonatlich aufgelöste Infiltrationskoeffizienten bestimmt. Falls die aktuelle Evapotranspiration die Niederschlagssumme überstieg, wurde der entsprechende Infiltrationskoeffizient gleich null gesetzt. Abbildung 5.17 zeigt den mittleren Verlauf der so bestimmten Infiltrationskoeffizienten im Vergleich mit den von UHLENBROOK (1999) unter Verwendung des HBV-Modells bestimmten Werten.

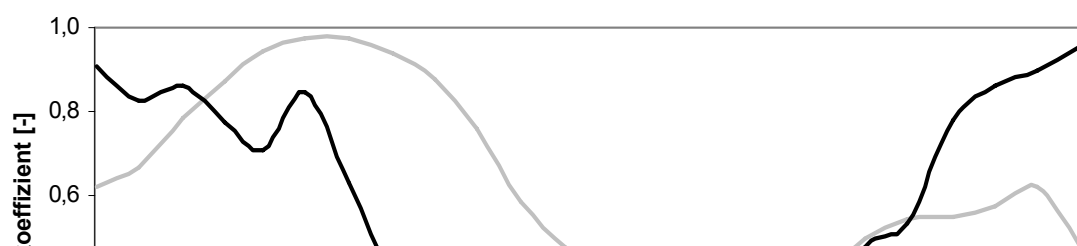


Abb. 5.17 **Verlauf der mittleren halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten**

Während der Monate November bis Februar liegen die über die Evaporationsbedingungen bestimmten Infiltrationskoeffizienten über denen von UHLENBROOK (1999), ansonsten z.T. deutlich darunter. Die maximale Differenz der beiden Verläufe wird im Mai erreicht, wo ersterer einen um 0,7 höheren Wert annimmt. Diese Diskrepanz ist auf die verschiedenen konzeptionellen Ansätze, die den Ableitungsmethoden der Koeffizienten zugrunde lagen, zurückzuführen. Die sehr niedrigen über die Evapotranspirationsbedingungen bestimmten sommerlichen Infiltrationskoeffizienten sind dadurch begründet, dass in diesem Modell die Verdunstung allein aus dem aktuell gefallenem Niederschlag und nicht aus der Gesamtheit des im Boden gespeicherten Wassers gespeist wird. Im Winter kommt es dagegen zu einer Überschätzung der Infiltrationskoeffizienten. Das einfache Modell, das nur Niederschlags- und Verdunstungsmengen vergleicht, berücksichtigt nicht, dass ein Großteil des winterlichen Niederschlages als Schnee fällt und dadurch nicht unmittelbar zur Infiltration zur Verfügung steht.

Durch Mittelung der Einzelwerte ergaben sich für die auf der Basis der Evaporationsbedingungen berechneten sommerlichen bzw. winterlichen Infiltrationskoeffizienten die Werte 0,29 bzw. 0,79, woraus sich ein Infiltrationsparameter von 0,37 berechnete. Die von UHLENBROOK (1999) mithilfe des HBV-Modells bestimmten mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten entsprachen saisonalen Infiltrationskoeffizienten von 0,51 bzw. 0,77 und einem Infiltrationsparameter von 0,66.

Der von UHLENBROOK (1999) bestimmte Infiltrationsparameter wird als viel plausibler angesehen als der mithilfe der Evapotranspirationsverhältnisse ermittelte Wert. Bei letzterem kommt es zu einer Unterschätzung des Beitrags des isotopisch schweren sommerlichen Niederschlages. Zusätzlich bedeutet besonders die Vernachlässigung des Schneespeichers eine schwerwiegende Einschränkung in der Realitätsnähe des Modells. Die Verbesserung, die durch die meist individuelle Berechnung eines Infiltrationskoeffizienten für jeden Halbmonat hätte erzielt werden könnte, wurde durch die Unzulänglichkeiten des Modellkonzeptes im negativen Sinn übertroffen.

In Abbildung 5.18 sind die bisherigen Modellierungsergebnisse denen des neuen Modells für eine mittlere Verweilzeit von 26,5 Monate und einen Aufteilungsparameter von 1,00 für den gesamten Messzeitraum gegenübergestellt. Es wird deutlich, dass das aufgrund der Evapotranspirationsverhältnisse erstellte neue Modell im Gegensatz zu dem zuvor angewandten, auf der HBV-Modellierung basierenden Modell eine Verschlechterung darstellt. Wie zu erwarten war, liegt die berechnete Outputfunktion aufgrund der Unterschätzung des sommerlichen Niederschlagsanteils an der Grundwasserneubildung zu tief. Die Modelleffizienz beträgt für den gesamten Messzeitraum -0,992 und für den Modellierungszeitraum 1995-2000 -0,137.

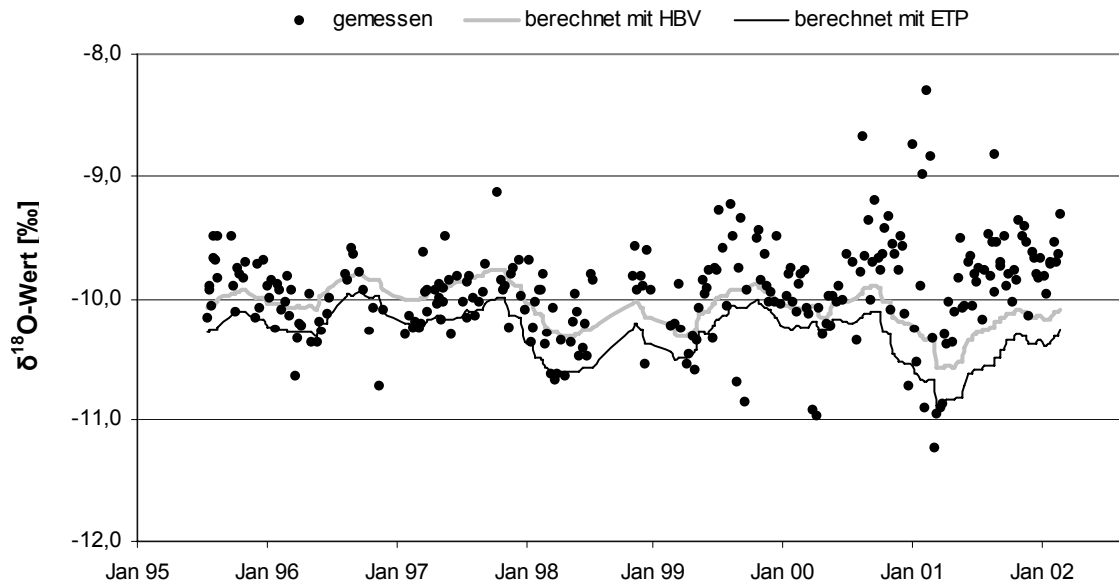


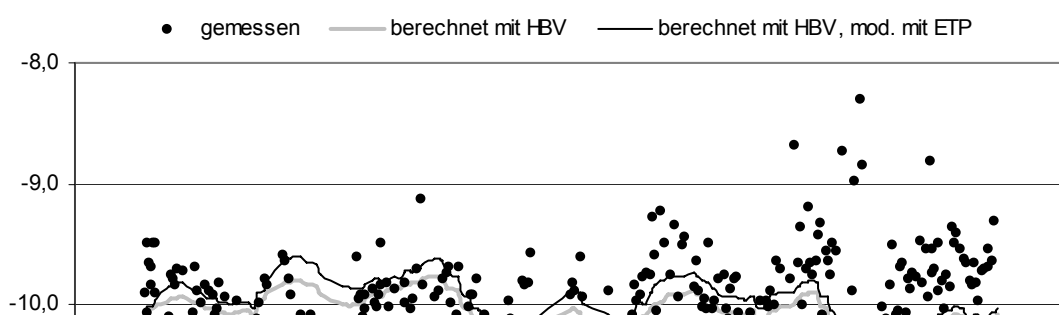
Abb. 5.18 Modellierungsergebnisse unter Verwendung der aufgrund der HBV-Modellierung bzw. der Evapotranspirationsverhältnisse erstellten halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)

5.9.2 Modellierung auf der Basis des HBV-Modells mit Modifikation aufgrund der Evapotranspirationsbedingungen

Aufgrund dieser Ergebnisse wurde das bestehende Modell mit den durch das HBV-Modell berechneten mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten beibehalten. Zur Modellierung von „trockenen“ und „nassen“ Jahren wurden in einer weiteren Variante die Evapotranspirationsbedingungen verwendet, um die HBV-basierten mittleren monatlichen Infiltrationskoeffizienten (α_{HBV}) zu modifizieren. Für jeden Halbmonat wurde die Abweichung der aufgrund der Evapotranspirationsbedingungen berechneten halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten (α_{ETP}) von ihrem jeweiligen langfristigen Mittel ($\alpha_{ETP(1970-90)}$) für diesen Zeitraum berechnet. Mithilfe der folgenden Korrektur wurden modifizierte und halbmonatlich variable Infiltrationskoeffizienten ($\alpha_{HBV, ETP}$) berechnet:

$$\alpha_{HBV,ETP} = \alpha_{HBV} + (\alpha_{ETP} - \overline{\alpha_{ETP(1970-90)}}) \quad (5.1)$$

Für den Gesamtzeitraum bewirkte diese Modifikation zwar mathematisch eine Verbesserung der Anpassungsgüte auf $-0,048$, aber auch diese Modellierung ist inakzeptabel, da sie schlechter ist als die Verwendung des Mittelwertes. Während der zweite Teil der Zeitreihe leicht verbessert dargestellt wurde, verschlechterte sich die Anpassung für die erste Hälfte des Gesamtzeitraums. Für den Modellierungszeitraum 1995-2000 verringerte sich die Modelleffizienz auf $0,065$. Das Ergebnis der durchgeführten Simulation für eine exponentielle Verweilzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Jahren ist in Abbildung 5.19 zu sehen.



$\delta^{18}\text{O}$ -Wert [‰]

Abb. 5.19 Modellierungsergebnisse unter Verwendung der auf der Basis des HBV-Modells erstellten halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten, mit und ohne die Modifikation durch die Evapotranspirationsbedingungen (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)

Das isotopisch höhere Niveau dieser Simulation ist darauf zurückzuführen, dass die Sommerniederschläge wiederum ein hohes Gewicht bekamen. Im Sommer liegen die über die Evapotranspirationsbedingungen berechneten Infiltrationskoeffizienten sehr niedrig. Da der Infiltrationskoeffizient nur zwischen 0 und 1 sinnvoll ist, wurde er bei Unter- bzw. Überschreitung dieser Grenzwerte auf den Grenzwert gesetzt. Dadurch wurden in den Sommermonaten einige Modifikationen des Infiltrationskoeffizienten nach unten (in Richtung eines geringeren Beitrags des Niederschlages an der Grundwasserneubildung) bei null begrenzt, also betragsmäßig verringert. Während der Wintermonate wurden Korrekturen des Infiltrationskoeffizienten nach oben (in Richtung eines höheren Beitrags) durch den Maximalwert 1 begrenzt. Dies führte zusammengenommen zu einer überproportionalen Berücksichtigung des sommerlichen Niederschlages und somit zu höheren $\delta^{18}\text{O}$ -Werten.

5.9.3 Fazit

Die Untersuchungen haben gezeigt, dass durch die Integration der Evaporationsdaten zur Bestimmung der halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten keine Modellverbesserung erzielt werden konnte. Bei der Ableitung der Infiltrationskoeffizienten aus dem Verhältnis von Niederschlag und Verdunstung bewirkt die fehlende Berücksichtigung des als Schnee gespeicherten Wassers große Fehler.

Allerdings brachte auch der zweite Ansatz keine Modellverbesserung. In diesem wurde die Abweichung der oben ermittelten Koeffizienten von ihrem langfristigen Mittel für den jeweiligen Halbmonat berechnet. Mithilfe dieser Abweichung wurde eine Modifikation der HBV-basierten Koeffizienten durchgeführt. Durch die Begrenzung des Infiltrationskoeffizienten auf das Intervall von 0 bis 1 kommt es auch hier zu modelltechnischen Schwierigkeiten.

Schließlich muss berücksichtigt werden, dass die Integration detaillierterer Daten in sehr einfache Modelle grundsätzlich schwierig ist. Aus der fehlenden Verbesserung der Modellgüte kann deshalb nicht darauf geschlossen werden, dass dieser Ansatz grundsätzlich ungeeignet ist. Es bleibt weiterhin die Herausforderung bestehen, die vorliegende Detailinformation für das flächenkonzentrierte Modell nutzbar zu machen.

5.10 Modellierung verschiedener Teilsysteme des Brugggebietes

5.10.1 Analyse der direktabflussfreien Komponenten am Pegel „Oberried“

Es wurde im folgenden angestrebt, einzelne Fließsysteme des Brugggebietes zu modellieren. Um zunächst die schnellste Komponente des Fließsystems zu eliminieren, wurde die Gesamtmenge der am Pegel „Oberried“ gewonnenen Messwerte um die Werte, die vermutlich durch Direktabfluss modifiziert sind, verringert. Diese Abtrennung war bis 10.07.1998 schon von UHLENBROOK (1999) vorgenommen worden, der alle Werte, die bei einem Abfluss von über 800 l/s gemessen wurden, aussortiert hatte. Diese Abtrennung wurde bis 2002 fortgeführt, indem das 70-Quantil des Abflusses zur Zeit der Probenahme als Obergrenze verwendet wurde, so dass der Anteil an herausgefilterten Werten dem des ersten Zeitraumes entsprach. In Abbildung 5.20 sind die mit diesem Verfahren eliminierten Werte in grau eingezeichnet.

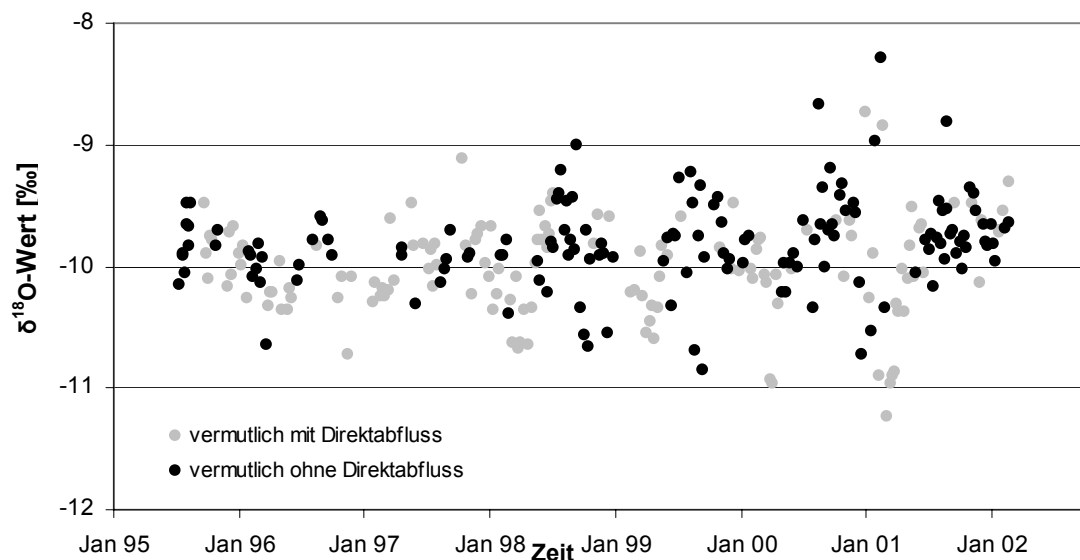


Abb. 5.20 Klassifizierung der $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte am Pegel „Oberried“ bezüglich ihrer Beeinflussung durch direkte Abflusskomponenten

Mithilfe des Momentanabflusses als Entscheidungsgrundlage fallen viele „mittlere“ $\delta^{18}\text{O}$ -Werte aus der Zeitreihe heraus, während nicht alle Extrema eliminiert werden. Diese Beobachtung zeigt, dass der Abfluss allein in diesem Fall kein gutes Kriterium für die Abtrennung der direkten Abflusskomponente darstellt. Auch die Zuhilfenahme der Leitfähigkeit ermöglichte keine plausible Differenzierung.

Um die schon für die anderen Datensätze beobachteten Schwierigkeit in der Modellierung des Zeitraums nach Juni 2000 zu vermeiden, wurde die Modellierung nur für den Zeitraum Juli 1995 bis Juni 2000 vorgenommen. Allerdings ergaben die Modellierungen für die vermutlich nicht durch Direktabfluss beeinflussten Messwerte für diesen Zeitraum im plausiblen Bereich keine positiven Modelleffizienzen. UHLENBROOK (1999) ermittelte für den Zeitraum 1995 bis 1998 die beste Anpassung für das Exponentialmodell mit einer mittleren Verweilzeit von 33 Monaten. Die Modelleffizienz für diese Kombination betrug für den Zeitraum 1995 bis 2000 $-0,194$.

5.10.2 Analyse der Abflusskomponenten an der Quelle „Zipfeldobel“

Des weiteren wurden die Messwerte der Quelle „Zipfeldobel“ ausgewertet. Diese Quelle wird als charakteristisch für das „Fließsystem-2“ (siehe Abschnitt 2.3) angesehen (UHLENBROOK 1999). Analog zum Vorgehen für die Messergebnisse am Pegel „Oberried“ wurden für die Quelle „Zipfeldobel“ die vermutlich durch Direktabfluss modifizierten Messwerte aussortiert. Dabei wurde neben der Schüttung zusätzlich die Leitfähigkeit als Abtrennungskriterium verwendet. An der Quelle „Zipfeldobel“ erwies sich die Leitfähigkeit – im Gegensatz zu den am Pegel „Oberried“ entnommenen Proben – als nützliche Entscheidungshilfe bei der Abtrennung (siehe Abbildung 5.21).

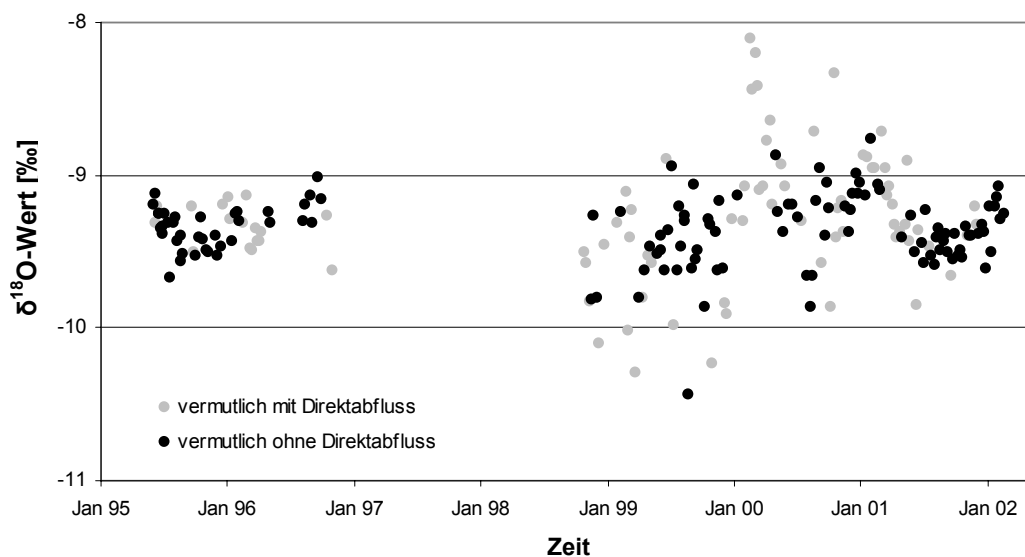
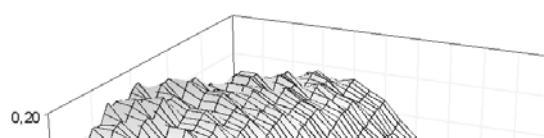


Abb. 5.21 Klassifizierung der $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte an der Quelle „Zipfeldobel“ bezüglich ihrer Beeinflussung durch direkte Abflusskomponenten

Trotzdem gilt auch für die Quelle „Zipfeldobel“, dass nicht alle und nicht allein die extremen Messwerte eliminiert wurden. Da der Input für die Quelle „Zipfeldobel“ aus der Inputzeitreihe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte für das Gesamtgebiet durch Kompensation des Höheneffektes abgeleitet worden war, entstand dieselbe Schwierigkeit bei der Modellierung des Zeitraums nach Juni 2000 wie schon für das Gesamtgebiet. Aus diesem Grund wurde die Kalibrierung ebenfalls für den Zeitraum Juli 1995 bis Juni 2000 vorgenommen, wobei zunächst alle Werte in die Optimierung einbezogen wurden und in einem zweiten Durchgang nur diejenigen, von denen vermutet wird, dass sie nicht durch Direktabfluss beeinflusst sind.

Zur Abschätzung der Sensitivität der Parameter wurden für die beiden Datensätze jeweils die Modelleffizienzen als Funktion der beiden Modellparameter, mittlere Verweilzeit und Aufteilungsparameter, dargestellt. Als plausible Grenzen der Modellparameter wurden eine mittlere Verweilzeit zwischen 25 und 50 Monaten und ein maximaler Aufteilungsparameter von 1,20 angesetzt.

Die Ergebnisse der Modellierung sind in den Abbildungen 5.22 und 5.23 zu sehen. Es sei auf die unterschiedliche Skalierung der z-Achse (Modelleffizienz, R_{eff}) hingewiesen. Die Modellergebnisse zeigen, dass sich für den alle Messwerte umfassenden Kalibrierungssatz ein klareres Maximum mit einer höheren Modelleffizienz ergibt als für den reduzierten Messwertsatz. Bei Berücksichtigung aller Werte ergab sich eine maximale Modelleffizienz von 0,180 bei einer mittleren Verweilzeit von 36,5



Monaten und einem Aufteilungsparameter von 1,20. Dieser Wert entspricht der zugelassenen Obergrenze für die Modellierung (Abbildung 5.22).

Abb. 5.22 Sensitivitätsanalyse: Modelleffizienzen für verschiedene Parameterkombinationen für die Quelle „Zipfeldobel“ unter Berücksichtigung aller Werte

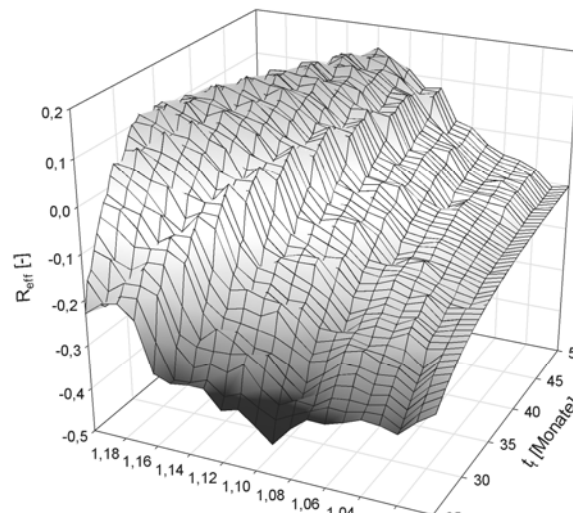


Abb. 5.23 Sensitivitätsanalyse: Modelleffizienzen für verschiedene Parameterkombinationen für die Quelle „Zipfeldobel“ unter Berücksichtigung der nicht durch Direktabfluss beeinflussten Messwerte

Der reduzierte Datensatz ergab eine maximale Modelleffizienz von 0,161 für eine mittlere Verweilzeit von 39 Monaten und einem Aufteilungsparameter von 1,16 (Abbildung 5.23). UHLENBROOK (1999) ermittelte für den Zeitraum 1995 bis 1998 die beste Anpassung für eine mittlere Verweilzeit von 36 Monaten und einem Aufteilungsparameter von 1,12. Die beiden besten Modellergebnisse für den kompletten bzw. den reduzierten Datensatz sind in Abbildung 5.24 dargestellt.

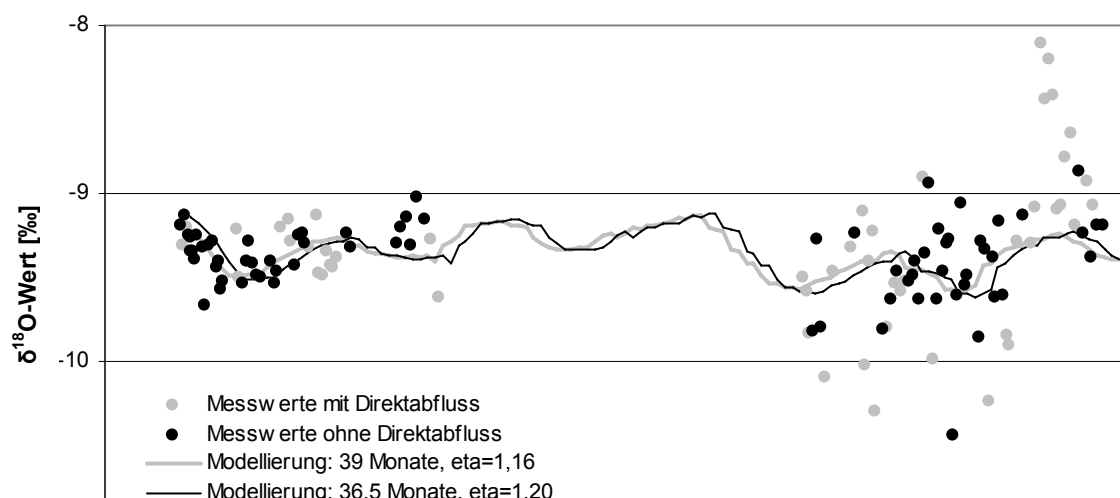


Abb. 5.24 Modellierungsergebnisse der jeweils besten Parameterkombinationen für zwei Messwertreihen der Quelle „Zipfeldobel“

5.10.3 Fazit

Die Modellierung der Teilsysteme hat ein zweigeteiltes Ergebnis erbracht: Einerseits konnte an der Quelle „Zipfeldobel“ die mittlere Verweilzeit des gesamten Quelleinzugsgebietes mit einer höheren Modelleffizienz als für das Gesamtsystem der Brugga am Pegel „Oberried“ bestimmt werden. Sie liegt vermutlich bei ca. 39 Monaten. Dieses Ergebnis bestätigt die zuvor von UHLENBROOK (1999) abgeschätzte Größenordnung von drei Jahren. Wie schon bei der Untersuchung des gesamten Bruggasystems, liegt auch hier die vermutlich mittlere Verweilzeit in der Größenordnung des von UHLENBROOK (1999) geschätzten Wertes. Der Unsicherheitsbereich von sechs Monaten erscheint auch für dieses System plausibel.

Eine grundsätzliche Schwierigkeit zeigte sich bei dem Versuch, die durch Direktabfluss beeinflussten Messwerte aus der Modellierung herauszunehmen. Über einen längeren Zeitraum hinweg konnte mithilfe der Abflussmenge (und an der Quelle „Zipfeldobel“ auch auf der Basis der Leitfähigkeit) keine sinnvolle Abtrennung dieses Einflusses vorgenommen werden. Die Modelleffizienz verringerte sich für beide Messpunkte beträchtlich; am Pegel „Oberried“ waren keine positiven Modelleffizienzen erreichbar.

Es zeigte sich, dass in der Betrachtung der Abflusskomponenten der Übergang von einer Ereignisbeprobung zu einer langjährigen Untersuchung einen großen Schritt bedeutet, der in dieser Arbeit nicht zufriedenstellend vollzogen werden konnte. Abflussmenge und Leitfähigkeit reichen hierbei als Indikatoren für den Grad der Beeinflussung durch direkte Abflusskomponenten nicht aus.

5.11 Analyse von Schwachstellen in der Lumped-Parameter-Modellierung

Es konnte gezeigt werden, dass das Exponentialmodell mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten für den Zeitraum 1995 bis Mitte 2000 die Inputfunktion gut in die Outputfunktion umwandelt. Die Ergebnisse für den Zeitraum ab Mitte 2000 blieben auch bei Integration der Evapotranspirationsverhältnisse in die Modellierung schlecht. Es wurden daraufhin potentielle Schwachstellen des Modells untersucht. Im folgenden sollen prinzipielle Unsicherheitsaspekte aufgezeigt und nach Möglichkeit mit Daten belegt werden, um in einem weiteren Schritt ihre Auswirkungen auf die Modellierung abzuschätzen. Schließlich soll untersucht werden, wie die gewonnenen Erkenntnisse dazu benutzt werden können, das bisherige Modell aufgrund eines räumlich distribuierten Prozessverständnisses zu verbessern.

5.11.1 Ableitung des $\delta^{18}\text{O}$ -Gebietsmittels für den Input

Zur Ableitung des $\delta^{18}\text{O}$ -Gebietsmittels für den Input waren die Messwerte mithilfe des Konzentrationshöhengradienten auf die flächengewichtete mittlere Höhe des Einzugsgebietes von 986 m NN transformiert worden. Diese einfache Lösung muss allerdings hinterfragt werden. Es ist bekannt, dass die Niederschlagsmenge mit der Höhe tendenziell zunimmt. Dabei zeichnet sich der Niederschlag in höheren Lagen durch höhere $\delta^{18}\text{O}$ -Werte aus. Des weiteren sollte der Beitrag des Niederschlages verschiedener Höhenstufen an der Grundwasserneubildung bei der Ableitung der repräsentativen Höhe in Bezug auf den $\delta^{18}\text{O}$ -Wert berücksichtigt werden.

Innerhalb des von UHLENBROOK (1999) entwickelten konzeptionellen modularen TAC-Modells (Tracer-aided catchment model) ist das Bruggagebiet in elf Höhenstufen (Intervalle von je 100 m) gegliedert. Innerhalb des Gebietes werden sieben Zonen gleicher Abflussbildung ausgewiesen, deren prozentualer Anteil an den einzelnen Höhenstufen ebenfalls bekannt ist. Diese Informationen wurden im Sinne eines flächendistribuierten Prozessverständnisses in die Neuberechnung der repräsentativen Einzugsgebieteshöhe für den $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Niederschlages einbezogen.

Für die Berechnung des Niederschlagshöhengradienten standen acht Niederschlagsstationen innerhalb und eine Station einige km außerhalb des Einzugsgebietes zur Verfügung. Die mittleren Jahressummen des Niederschlages wurden in Bezug auf den durch den Windeinfluss entstandenen Messfehler korrigiert (siehe Abschnitt 4.2.1). Die Abhängigkeit der Niederschlagshöhe N_i [mm] von der mittleren Höhe der Höhenstufe h_i [m NN] wurde am besten durch die Funktion $N_i = 2088 * (1 - e^{-0,0025 * h_i})$ mit einem Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0,86$ dargestellt (vgl. Abbildung 2.4). Diese Gleichung wurde verwendet, um den mittleren Gebietsniederschlag dieser Höhenzone zu berechnen.

Entsprechend Formel (5.1), welche die Verteilungen der Flächen und Niederschlagsmengen auf die Höhenstufen berücksichtigt, wurde die repräsentative Höhe des Einzugsgebietes in Bezug auf den Niederschlagsinput ermittelt.

$$h = \sum_{i=1}^{11} \left[h_i * \frac{F_i}{\sum F_i} * \frac{N_i}{N} \right] \quad (5.1)$$

mit	h	Repräsentative Höhe in Bezug auf den Gebietsniederschlag [m NN]
	h_i	Mittlere Höhe der Höhenzone i [m NN]
	F_i	Fläche der Höhenzone i [km ²]
	F	Gesamtfläche des Einzugsgebietes [km ²]
	N_i	Mittlere Niederschlagssumme der Höhenzone i [mm]
	N	Flächengewichtete mittlere Niederschlagssumme des Einzugsgebietes [mm], berechnet als

$$N = \sum \left[\frac{F_i}{\sum F_i} N_i \right] \quad (5.2)$$

Anhand dieser Berechnung ergab sich eine flächen- und niederschlagsgewichtete repräsentative Höhe von 997 m NN. Entsprechend des Höhenkonzentrationsgradienten entspricht dies einem Wert, der um 0,02 ‰ niedriger ist als der in der Modellierung verwendete $\delta^{18}\text{O}$ -Wert. Aufgrund der Unsicherheiten der für diese Berechnung verwendeten Daten ist dieses Ergebnis allerdings nicht signifikant. Der sich ergebender Korrekturbetrag für die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte liegt zudem eine Zehnerpotenz unterhalb des Messfehlers, welcher 0,2 ‰ beträgt (vgl. Abschnitt 4.1).

Die der obigen Berechnung zugrunde liegende Flächenverteilung auf die Höhenstufen im Bruggagebiet ist in Abbildung 5.25 durch die dünne schwarze Linie („alle Flächen“) wiedergegeben. Zusätzlich sind noch zwei weitere Flächenverteilungen auf die verschiedenen Höhenstufen eingezeichnet, die auf der Basis der dominanten Abflussbildungsmechanismen bzw. der charakteristischen Grundwasserneubildungsverhältnisse bestimmter Flächen berechnet wurden.

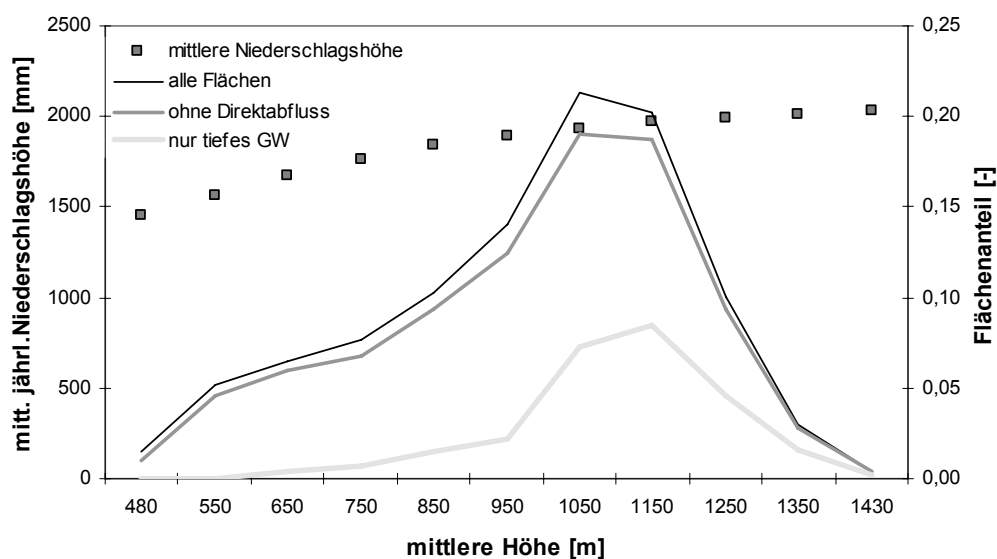


Abb. 5.25 Flächenanteile auf verschiedenen Höhenstufen unter Berücksichtigung der Abflussbildung

Zunächst wurden alle Flächen, auf denen Direktabfluss gebildet wird, von der Berechnung ausgeschlossen. Dazu wurde angenommen, dass auf den Sättigungsflächen und auf 50% der versiegelten Flächen Direktabfluss stattfindet (dunkelgraue Linie). In der dritten Verteilungsberechnung wurden schließlich nur die Flächenanteile berücksichtigt, auf denen tiefes Grundwasser gebildet wird. Dies sind die Moränen und die Hochlagen (hellgraue Linie). Es ist zu erkennen, wie in der genannten Sequenz der Flächenverteilungen Modus und Schwerpunkt in Richtung der höheren Lagen verschoben werden.

Aufgrund der durchgeführten Berechnungen ergab sich für die direktabflussfreien Flächen eine repräsentative Höhe von 1001 m NN. Bei alleiniger Berücksichtigung der zu tiefem Grundwasser (unterhalb der Deckschichten) beitragenden Flächen berechnete sich für die repräsentative Höhe ein nochmals höherer Wert von 1108 m NN.

In Tabelle 5.5 sind die Ergebnisse der Berechnungen sowie die theoretisch notwendigen Korrekturen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zusammengefasst. Die darin aufgeführten Korrekturwerte müssten sowohl auf die Messwerte als auch auf die über Temperaturregression bestimmte synthetische Inputfunktion angewandt werden. Demnach müsste die gesamte Inputfunktion um einen Wert zwischen -0,02 ‰ und -0,27 ‰ abgesenkt werden. Im Rahmen der Signifikanzbewertung dieser Ergebnisse muss gesagt werden, dass der durch die aufgezeigten Ungenauigkeiten verursachte Fehler die Messungenauigkeit von 0,2 ‰ höchstens leicht übertrifft.

Tab. 5.5 Notwendige Korrekturen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zur Berücksichtigung der Flächen- und Niederschlagsverteilung

Flächenberücksichtigung	Repräsentative Höhe	Korrektur des $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes
<i>Zum Vergleich: Ohne Berücksichtigung des Niederschlages</i>		
alle Flächen gleich gewichtet	986 m NN	
<i>Mit Berücksichtigung der Niederschlagsverteilung</i>		
alle Flächen gleich gewichtet	997 m NN	-0,02 ‰
ohne Flächen mit Direktabfluss	1001 m NN	-0,03 ‰
nur Flächen mit tiefer Grundwasserbildung	1108 m NN	-0,27 ‰

Auch wenn diese Betrachtung eine Annäherung an die Realität darstellt, so bleibt sie hinter deren Komplexität zurück. Der Niederschlagshöhengradient, die Niederschlagsverteilung und die Prozesse der Abflussbildung variieren zeitlich und räumlich. Für eine detailliertere räumliche Betrachtung standen zu wenig Daten zur Verfügung, als dass für den Modellierungszeitraum diese Variabilität hätte aufgegliedert werden können.

5.11.2 Anreicherungs Vorgänge in den Speichern

Sofern Evaporation aus dem Boden-, Schnee- oder Interzeptionsspeicher stattfindet, kommt es zu einer Anreicherung der schweren Isotope und damit zu einem Anstieg der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte (siehe Abschnitt 3.1.5). Im Gegensatz zu dem zuvor behandelten Fehler zeigt die Anreicherung aufgrund von Verdunstung einen saisonalen Verlauf. Ihre Auswirkung liegt vermutlich im Bereich von wenigen Zehntel Promille.

BRODERSEN ET AL. (2000) haben z.B. eine mittlere Anreicherung des Niederschlagswassers durch fraktionierende Interzeptionsverdunstung und den Isotopenaustausch mit dem Wasserdampf der Atmosphäre in der Größenordnung von 0,38 ‰ bzw. 0,36 ‰ gemessen. Es kann davon ausgegangen werden, dass die Effekte der Isotopenanreicherung den Messfehler der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte übertreffen.

Die Bedeutung dieser Anreicherungsprozesse ist vermutlich saisonal variabel. Insgesamt wirkt dieser Prozess dem zuvor identifizierten systematischen Fehler entgegen. Für eine experimentell fundierte Modifikation der Inputfunktion zur Berücksichtigung der beiden genannten Effekte fehlen die Daten.

5.11.3 Wirkung des Schneespeichers

Im Vergleich zur isotopischen Anreicherung durch Verdunstung wird die Wirkung des Schneespeichers als bedeutendere Fehlerquelle eingestuft. Fehler ergeben sich dabei einerseits durch die Konzeption des Infiltrationskoeffizienten und andererseits durch die im Bruggagebiet vorgenommene Messprozedur.

Der Infiltrationskoeffizient quantifiziert den Anteil des aktuell gefallenen Niederschlages, der nach Infiltration zur Grundwasserneubildung beiträgt. Dabei ist er nicht in der Lage, z.B. als Schnee gespeichertes von verdunstetem Wasser zu unterscheiden. Beide Größen sind aus diesem Betrachtungswinkel in Hinblick auf die Grundwasserneubildung Verluste. Aus diesem Grund kann kein Niederschlag berücksichtigt werden, der über ein Messintervall hinaus als Schnee gespeichert wurde, wodurch es zu einer Unterschätzung des Beitrages von leichtem Schneeschmelzwasser zur Grundwasserneubildung und damit zu einer Überschätzung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte kommen kann.

Um diese Unzulänglichkeit des Modells zu überwinden, könnte ein Speicherglied in das Faltungsintegral eingebaut werden, sofern die dazu benötigten Daten über den Inhalt und den Zustand des Schneespeichers vorliegen. Im Bruggagebiet werden bislang nur ein Niederschlagsmesser für flüssigen Niederschlag betrieben. Messdaten über Schneehöhen, z.B. aus Schneelysimetern, gibt es nur für ausgewählte Perioden. Auch wurden keine Langzeitmessungen zum Isotopengehalt des Schneeschmelzwassers durchgeführt. Somit ist es nicht möglich, das tatsächlich an der Bodenoberfläche ankommende Wasser hinsichtlich seiner Menge und seines $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes zu quantifizieren und in die Modellierung miteinzubeziehen. Anhand einer kurzen Zeitreihe, für die einige Daten vorliegen, soll die Problematik der fehlenden Berücksichtigung der Schneeschmelze verdeutlicht werden.

Die zweite Fehlerquelle beruht auf der fehlenden Erfassung von Wasseräquivalenten der Schneedecke. Die in der Modellierung verwendeten Niederschlagshöhen beziehen sich - wie oben bereits ausgeführt - im wesentlichen auf den flüssigen Niederschlag. Dieser Fehler kann durch Korrekturfaktoren nur unzureichend behoben werden, so dass der als Schnee fallende Niederschlag nicht für die Gewichtung verwendet werden kann.

5.11.3.1 Auswertung der Beobachtungen im Frühjahr 1996

Das Ausmaß, in dem der Schneespeicher und die Schneeschmelze zur Veränderung der $\delta^{18}\text{O}$ -Inputfunktion beitragen können, wurde anhand einer ausgewählten Zeitreihe im Frühjahr 1996, für die Schnee- und Abflussmessungen von HILDEBRAND (1996) vorlagen, untersucht. Aufgrund der Ergebnisse dieser Untersuchung wurde angestrebt, die Modellierung innerhalb des durch die Datenverfügbarkeit vorgegebenen Rahmens zu verbessern.

Abbildung 5.26 zeigt die Zeitreihen von Abfluss und Niederschlag vom 14.02.1996 bis 23.04.1996. Als Besonderheit fällt der steile Anstieg des Abflusses in der zweiten Märzhälfte auf. Die Tagessumme des Abflusses betrug am 20.03.1996 1,2 mm (entsprechend $0,4 \text{ m}^3/\text{s}$). Drei Tage später erreichte sie 5,97 mm (entsprechend $2,29 \text{ m}^3/\text{s}$). Der gemessenen Spitzenwert des Abflusses betrug $2,72 \text{ m}^3/\text{s}$ und wurde am 23.03.1996 um 4:00 Uhr erreicht.

Vergleicht man die zu der Zeit gefallene Niederschlagsmenge mit der des Ereignisses vom 10.04. bis 14.04.1996, so ist erkennbar, dass die Niederschlagsmengen der beiden Ereignisse durchaus vergleichbar sind. Trotzdem kam es beim Ereignis im April nur zu einem leichten Anschwellen der Abflussganglinie.

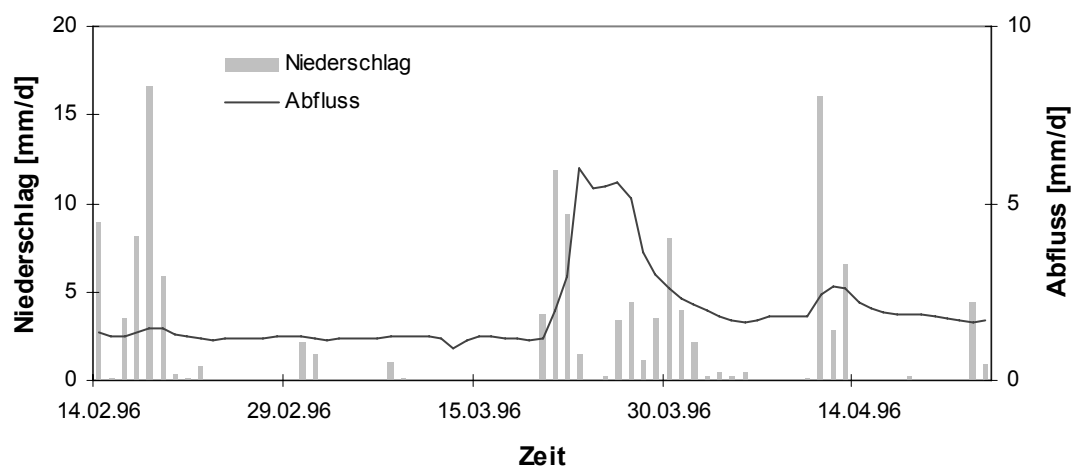


Abb. 5.26 Tageswerte des Niederschlages und des Abflusses im Bruggagebiet, Pegel „Oberried“ (Uhlenbrook et al. 1999)

Aus Abbildung 5.27 ist erkennbar, dass es in der zweiten Märzhälfte zusätzlich zum Niederschlagsereignis zu einem Anstieg der bodennahen Lufttemperaturen kam. In diesem Zeitraum stieg das Tagesmittel der bodennahen Lufttemperatur innerhalb von 12 Tagen (12.03.96 bis 24.03.96) um fast 20°C (von $-8,1^\circ\text{C}$ auf $11,5^\circ\text{C}$). Dies führte zu einem abrupten Abschmelzen eines großen Teiles der Schneedecke (Abbildung 5.28).

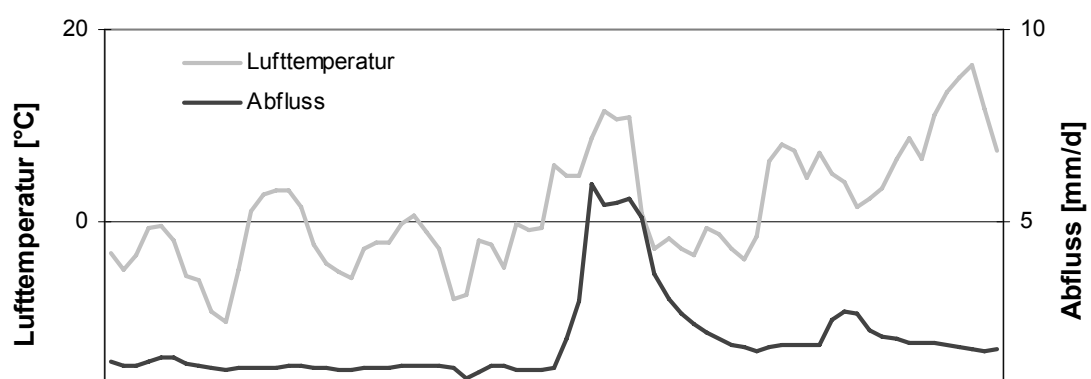


Abb. 5.27 Tageswerte der mittleren Lufttemperatur im Brugggebiet und des Abflusses am Pegel „Oberried“ (UHLENBROOK ET AL. 1999)

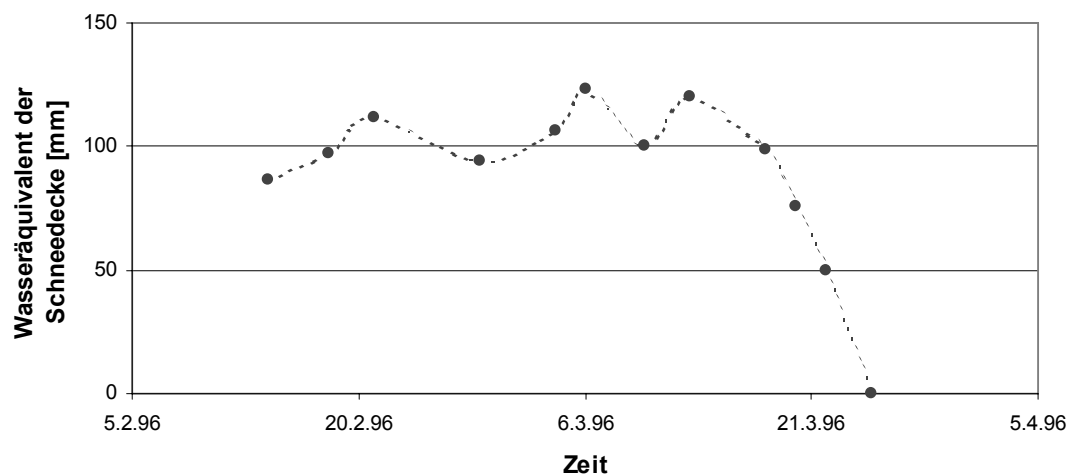


Abb. 5.28 Wasseräquivalent der Schneedecke an der Schneestechstelle beim Klimaturm St. Wilhelm (HILDEBRAND 1996)

In Abbildung 5.29 wurden die Verläufe der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte in Niederschlag, Schneedecke und Abfluss innerhalb des betrachteten Zeitraums zusammengefasst. Die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der Schneedecke waren zunächst konstant. Erst in der Phase des intensivierten Abschmelzens kam es zu einem Anstieg. Dies ist dadurch zu erklären, dass das isotopisch leichte Wasser zuerst schmolz und es dadurch zu einer Anreicherung von ^{18}O in der festen Phase kam. Der isotopisch schwerere Schnee schmolz zuletzt.

Zudem stieg die Isotopenkonzentration des Niederschlages in diesem Zeitraum, was zusammen mit dem Anstieg der bodennahen Lufttemperatur auf einen Warmlufteinbruch hindeutet. Dabei wurden warme Luftmassen mit einem höheren Gehalt an ^{18}O niederschlagswirksam. Es kann davon ausgegangen werden, dass ein Teil des Niederschlages auch in der Schneedecke gespeichert wurde, so dass auch dieser Prozess zum Anstieg der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte in der Schneedecke beitrug.

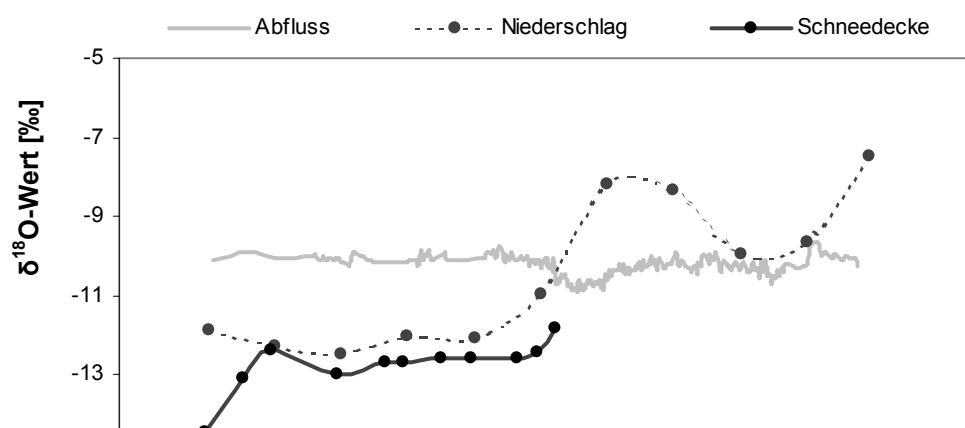


Abb. 5.29 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag und in der Schneedecke am Klimaturm „St. Wilhelm“ sowie im Abfluss am Pegel „Oberried“ (HILDEBRAND 1996)

Trotz eines Anstieges der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag sanken die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss zum selben Zeitpunkt für ca. eine Woche ab und erreichten dann wieder das ursprüngliche Niveau. Hier ist der Einfluss des Schneeschmelzwassers zu erkennen, welches, z.T. auch als Direktabfluss, für eine begrenzte Zeit die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss absenkte. Das Ausmaß dieser Absenkung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte reichte aus, um eine Ganglinienseparation durchzuführen (HILDEBRAND 1996).

5.11.3.2 Modellierung unter Einbezug der Schneeschmelze

Für den Zeitraum 1995 bis 1999 lagen über das TAC^D-Modell (ROSER 2001) ermittelte Werte der mittleren Schneeschmelze im Bruggagebiet in stündlicher Auflösung vor. Die Daten wurden zu Halbmonatsmitteln aggregiert und zu den bisherigen Niederschlagssummen addiert, um somit das gesamte an der Bodenoberfläche ankommende Wasser zu modellieren. Die Modellierung wurde mit den beiden obigen Ansätzen zur Bestimmung von halbmonatlich variablen Infiltrationskoeffizienten (siehe Abschnitte 5.9.1 und 5.9.2) wiederholt.

Dabei zeigte sich keine Verbesserung der Modellierungsergebnisse, sondern eine leichte Verschlechterung. Die Modelleffizienzen betrugen für die mit dem Exponentialmodell durchgeführte Modellierung ($t_t = 26,5$ Monate) 0,152 (bei Verwendung der HBV-basierten Infiltrationskoeffizienten) bzw. -0,292 (bei Verwendung der durch die Evapotranspirationsverhältnisse modifizierten Infiltrationskoeffizienten). Die Modellierungsergebnisse für das erste der beiden Modelle sind in Abbildung 5.30 zu sehen. Wie erwartet zeigte sich, dass die Berücksichtigung der Schneeschmelze zu leicht niedrigeren $\delta^{18}\text{O}$ -Werten im Winter führt.

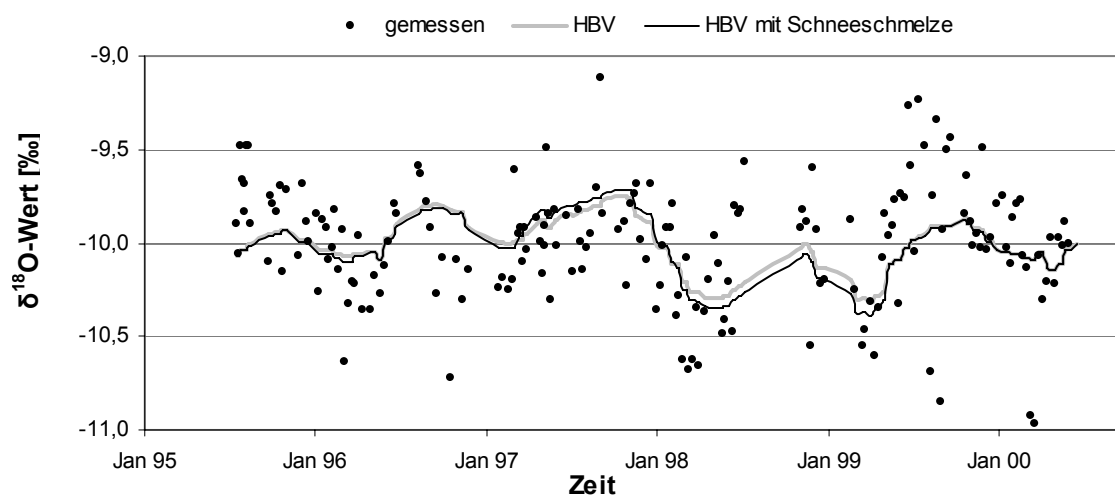


Abb. 5.30 Modellierungsergebnisse unter Verwendung der auf der Basis des HBV-Modells erstellten halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten, mit und ohne Berücksichtigung der Schneeschmelze (exponentielle Fließzeitverteilung mit einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten)

5.11.4 Fazit

Durch die Betrachtung der Unsicherheiten des Lumped-Parameter-Modells konnten folgende Schwachstellen festgestellt werden: Erstens werden durch die nicht prozessorientierte Ableitung des $\delta^{18}\text{O}$ -Gebietsmittels der Inputfunktion vermutlich zu hohe $\delta^{18}\text{O}$ -Werte berechnet, während die Vernachlässigung der Anreicherungsprozesse den gegenläufigen Effekt hat.

Zweitens wurde als bedeutsame Schwachstelle die unzureichende Messung und modelltechnische Umsetzung aller den Schneespeicher betreffenden Prozesse erkannt. Aufgrund der Methode der Niederschlagsmessung wird fester Niederschlag kaum erfasst. Ebenso gibt es nur wenige Messdaten über den Verlauf der Schneeschmelze und den $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Schmelzwassers. Die Unzulänglichkeit aus modelltechnischer Hinsicht besteht darin, dass das Modell nur den innerhalb eines Zeitschritts gefallen Niederschlag gewichten kann. Eine Speicherung, z.B. als Schnee, ist bislang im Modell nicht umgesetzt. Das gesamte Wasser, das nicht im selben Zeitintervall ins Grundwasser übertritt, wird damit als Verlust angesehen.

Die Berücksichtigung der stündlich modellierten Schneeschmelzmengen der Jahre 1995 bis 1999 brachte allerdings keine Modellverbesserung. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, dass neben der Wassermenge auch der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert der Schneeschmelze entscheidend ist. Anhand einer kurzen Zeitreihe detaillierter Messungen konnte der Einfluss der Schneeschmelze auf den $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Abflusses gezeigt werden. Mit der Verbesserung des Modellkonzeptes bedarf es deshalb einer Anpassung der Messroutine zur Beschaffung der benötigten Daten.

5.12 Spektralanalyse

5.12.1 Spektralanalyse von Niederschlag und Abfluss

In Abbildung 5.31 sind die mithilfe der Fourier-Transformation berechneten Leistungsdichtespektren der Wasserflüsse im Bruggagebiet, jeweils für Niederschlags- bzw. Abflussmengen, dargestellt. Im Gegensatz zum Verlauf des Leistungsdichtespektrums des Niederschlages, das KIRCHNER ET AL. (2000) im Hafengebiet berechneten (Abbildung 3.9), zeigt der Input im Bruggagebiet kein weißes Rauschen, sondern eine leichte Abnahme der Leistungsdichte mit kürzeren Perioden. Die Langzeitvariation der Niederschlagsintensitäten ist folglich höher als die in kurzen Zeitfenstern. Dies bedeutet, dass die saisonale Variabilität der Niederschlagsintensität im Mittel höher ist als die stündliche. Verschiedene Ereignisse, z.B. zu verschiedenen Jahreszeiten, weichen in ihrer Intensität folglich stärker voneinander ab als die Variabilität der Niederschlagsintensitäten während eines Ereignisses.

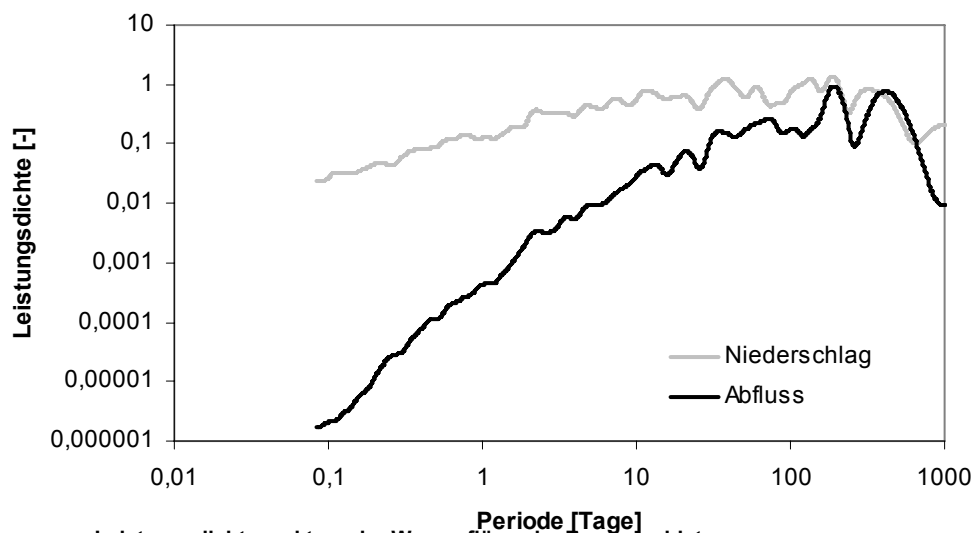


Abb. 5.31 Leistungsdichtespektren der Wasserflüsse im Bruggagebiet

Diese Beobachtung lässt sich dadurch bestätigen, dass es im Untersuchungsgebiet verschiedene Niederschlagstypen gibt, die jeweils durch eigene Intensitäts-Zeitverteilungen charakterisiert sind. Diese verschiedenen Niederschlagstypen dominieren während bestimmter Jahreszeiten. Aufgleitende Warmfronten ergeben im Winterhalbjahr meist lange anhaltende Niederschläge geringer Intensität, während es bei konvektiven Ereignissen, welche bevorzugt im Sommer auftreten, eher zu hohen Niederschlagsintensitäten kommt. Es ist laut KIRCHNER (2002) ein allgemeines Phänomen natürlicher Prozesse, dass die Leistungsdichtespektren entweder ein weißes Rauschen oder eine Abnahme der Leistungsdichte zu kürzeren Perioden hin zeigen.

Das Leistungsdichtespektrum der Abflussmengen bewegt sich für Perioden von mehr als 100 Tagen in der Größenordnung des Niederschlages. Mit der Abnahme der Periode zeigt es einen im Vergleich zum Leistungsdichtespektrum des Niederschlages steileren Abfall. Deutlich zu sehen sind auch die Maxima der Leistungsdichte bei ca. 180 bzw. 365 Tagen. Diese Maxima sind – verglichen mit der restlichen Kurve – beim Abfluss deutlicher ausgeprägt als beim Niederschlag.

Der steile Abfall der Leistungsdichte des Outputspektrums verdeutlicht die zunehmende Dämpfung der hydraulischen Impulse mit steigender Frequenz: Während lang anhaltende Schwankungen des hydraulischen Potentials im Einzugsgebiet kaum bis gar nicht gedämpft werden,

kommt es bei hochfrequenten Signalen zu einer Dämpfung. In bezug auf die hydraulischen Impulse wirkt das Einzugsgebiet wie ein fraktaler Filter.

Die sowohl im Niederschlag wie auch im Abfluss zu erkennenden Maxima der Spektraldichte bei einem halben und einem Jahr sind eine Bestätigung für den bimodalen jährlichen Verlauf beider Zeitreihen, wie er auch in Abbildung 2.3 zu sehen ist. Dabei sind die Maxima bei einer Periode von ca. 180 bzw. 365 Tagen beim Abfluss ausgeprägter. Dies bedeutet, dass der Abfluss eine gleichmäßigere Jahresschwankung aufweist als der Niederschlag. Der Grund hierfür ist darin zu suchen, dass sich der Abfluss aus der Modifikation des Niederschlagsinputs durch den Verlust der Verdunstung ergibt. Da die Verdunstung durch einen sehr regelmäßigen Jahresgang charakterisiert ist, erhöht sie die Regelmäßigkeit des zeitlichen Verlaufes des Abflusses gegenüber der des Niederschlags.

5.12.2 Modellierung der hydraulischen Übertragungsfunktion

Da das Leistungsdichtespektrum des Inputs nicht als weißes Rauschen betrachtet werden kann, stellt das Spektrum des Outputs nicht direkt die Wirkung des Systems dar. Vielmehr muss eine Übertragungsfunktion berechnet werden, indem gemäß Gleichung 3.34 das Leistungsdichtespektrum des Outputs durch das des Inputs dividiert wird. Das Ergebnis dieser Operation ist in Abbildung 5.32 zu sehen.

Die ermittelte Übertragungsfunktion zeigt im Bereich von 1 bis 100 Tagen eine dem Potenzgesetz folgende Steigung, die auf eine Verteilung der Impulslaufzeiten entsprechend einer Gammaverteilung hindeutet. Mit Abnahme der Periodenlänge wird die Steigung der Übertragungsfunktion steiler. Dies ist ein Hinweis auf eine exponentielle Laufzeitenverteilung.

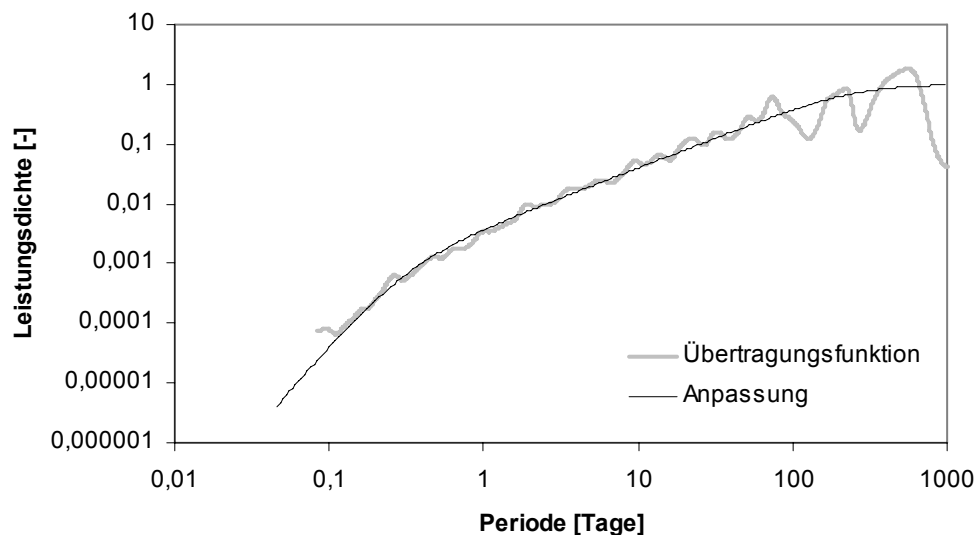


Abb. 5.32

KIRCHNER (2002) erreichte eine gute Annäherung an die beobachtete Übertragungsfunktion mithilfe einer Reihenschaltung zweier hydrologischer Systeme. Er nahm an, dass die Abflussbildung an Hängen mithilfe der räumlich integrierten Advektions-Dispersions-Gleichung (KREFT & ZUBER 1978) zu beschreiben ist. Diese räumliche Integration gleicht der Gammaverteilung. KIRCHNER (2002) kalibrierte eine mittlere Verweilzeit von 20 Tagen, so dass die für die Gammaverteilung

charakteristische Steigung von 1 im logarithmierten Leistungsdichtespektrum für Perioden zwischen einem und 100 Tagen dominiert. Die Abflusskonzentration im Gerinne approximiert er durch einen Linearspeicher (dessen Reaktion einer Exponentialverteilung entspricht) mit einer mittleren Verweilzeit von acht Stunden. Die exponentialverteilten Verweilzeiten bewirken im Frequenz-Raum einen steileren Anstieg des Leistungsdichtespektrums, wie es für Perioden von weniger als einem Tag in Abbildung 5.32 besonders deutlich wird.

Auf diese Weise konnte mithilfe der Spektralanalyse zum ersten Mal eine Abschätzung der Fortpflanzungsgeschwindigkeiten der hydraulischen Impulse im gesamten Untersuchungsgebiet vorgenommen werden. Dabei zeigte sich ein fraktales Dämpfungsmuster der hydraulischen Impulse im Bruggagebiet. Sowohl bei der Gamma- wie auch bei der Exponentialverteilung, mithilfe derer KIRCHNER (2000) die empirisch ermittelte Übertragungsfunktion nachstellte, liegt das stärkste Gewicht jeweils auf dem Zeitpunkt null, wodurch eine schnelle Reaktion des Gebietes charakterisiert wird.

5.12.3 Spektralanalyse der $\delta^{18}\text{O}$ -Konzentrationen

In Abbildung 5.33 sind die Leistungsdichtespektren verschiedener $\delta^{18}\text{O}$ -Zeitreihen aufgetragen. Jeweils zwei Spektren stammen von Zeitreihen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Niederschlag bzw. im Abfluss. Dabei umfasst jeweils ein Datensatz nur die Messwerte, die im Rahmen der Routinemessungen erhoben wurden, während der zweite auch die aus Intensivmesskampagnen stammenden Werte mit einschließt.

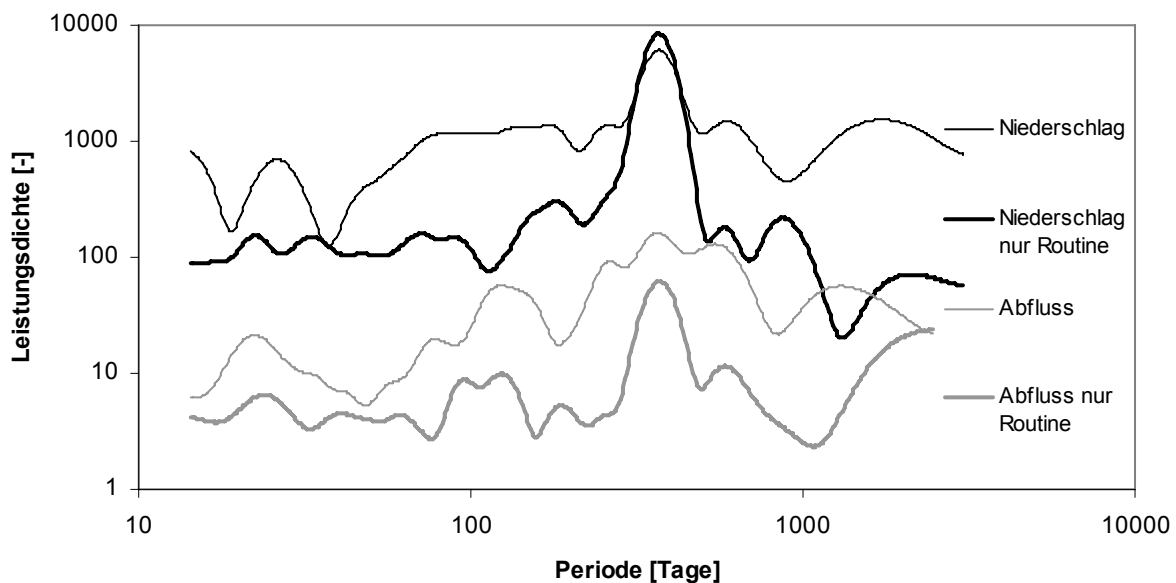


Abb. 5.33 Leistungsdichtespektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages und des Abflusses im Bruggagebiet

Zunächst ist zu erkennen, dass die Spektren, die sowohl Routinemessungen wie auch Intensivmesskampagnen beinhalten, durch eine höhere Leistungsdichte gekennzeichnet sind. Diese Beobachtung lässt sich dadurch erklären, dass die Intensivkampagnen, die meist zur Zeit von Niederschlagsereignissen und Hochwasserabflussbedingungen durchgeführt wurden, ein anderes Systemverhalten widerspiegeln als die Routinemessungen alleine. FENG ET AL. (2002) stellten bereits

fest, dass sich die Leistungsdichten der Konzentrationen des hydrochemischen Tracers Chlorid in Zeiten hohen Abflusses erhöhen.

Bei zu geringer zeitlicher Auflösung (im Vergleich zur Prozessskala) kommt es zu einer Verzerrung des Spektrums. Durch diesen sogenannten „Aliasing-Effekt“, der in Abschnitt 3.3.5 erklärt wurde, kommt es zu verfälschten Ergebnissen. Diese Einschränkung der Glaubwürdigkeit der Leistungsdichtespektren gilt auch dann, wenn diese, wie im vorliegenden Fall, mithilfe der modifizierten Form der Fourier-Transformation erstellt wurden, die die Analyse nicht-äquidistanter Messwerte ermöglicht. Da für die hochfrequenten Messungen nur für jeweils kurze Zeitabschnitte Messungen vorlagen, sind diese Daten besonders anfällig für den „Aliasing-Effekt“ und müssen deshalb mit der erforderlichen Zurückhaltung gedeutet werden.

In Abbildung 5.34 ist das Ergebnis der „Wavelet“-Transformation dieser Zeitreihe dargestellt. Ziel dieser Umformung ist ebenfalls die Darstellung diskreter, im Zeit-Raum erhobener Messwerte im Frequenz-Raum. Der Vorteil dieser Transformation besteht darin, dass sie einige Probleme und Ungenauigkeiten, die sich bei der Fourier-Transformation aufgrund der ungleichmäßigen Verteilung der Einzelwerte ergeben, umgehen kann. Die „Wavelet“-Transformation teilt die Zeitreihe in Stücke auf, die dieselbe Länge haben wie die Periode, für die die Leistungsdichte berechnet werden soll. Die Prozedur analysiert diese Stücke getrennt und bildet dann den Mittelwert dieser Ergebnisse. Für jede zu analysierende Periode des Spektrums wird dieses Verfahren wiederholt, um somit das gesamte Spektrum zusammenzusetzen.

Aufgrund dieses Vorgehens wird die gesamte Zeitreihe für die Berechnung ihrer Leistungsdichte am kurzperiodischen Ende des Spektrums in viele kurze Teile zerlegt, so dass der letztendliche Wert als Mittelwert aus vielen Analyseergebnissen einzelner Teilstücke zusammengesetzt wird. Am langperiodischen Ende hingegen kann die Zeitreihe aufgrund der benötigten Länge der Teilstücke nur in wenige Stücke geteilt werden, so dass sich der berechnete Wert nur aus wenigen Einzelwerten ergibt und somit weniger verlässlich ist als die Werte bei kurzen Perioden. Diese Einschränkung gilt prinzipiell auch für die gewöhnliche Fourier-Transformation. In Hinblick auf die Fragwürdigkeit der Ergebnisse im langperiodischen Bereich kann vermutet werden, dass der Einbruch der Leistungsdichte der allein auf Routinemessungen beruhenden Inputfunktion zwischen 1000 und 2000 Tagen in Abbildung 5.34 nicht den wahren Verlauf der Leistungsdichte widerspiegelt.

Ein Vergleich der beiden Leistungsdichtespektren im kurzperiodischen Bereich kann dagegen zur Validierung der mithilfe der gewöhnlichen Fourier-Transformation erzielten Ergebnisse verwendet werden. Vergleicht man den (verlässlicheren) kurzperiodischen Bereich des „Wavelet“-Inputspektrums inklusive der Messwerte aus Intensivkampagnen (Abbildung 3.34) mit dem entsprechenden Fourier-Spektrum (Abbildung 3.33), so fallen die zwei Minima des Fourier-Spektrums zwischen 10 und 100 Tagen auf, die sich im „Wavelet“-Spektrum nicht wiederfinden. Es kann mit einiger Sicherheit davon ausgegangen werden, dass diese Minima ebenfalls nicht echt sind, sondern Artefakte der Umformungsprozedur darstellen (KIRCHNER 2000).

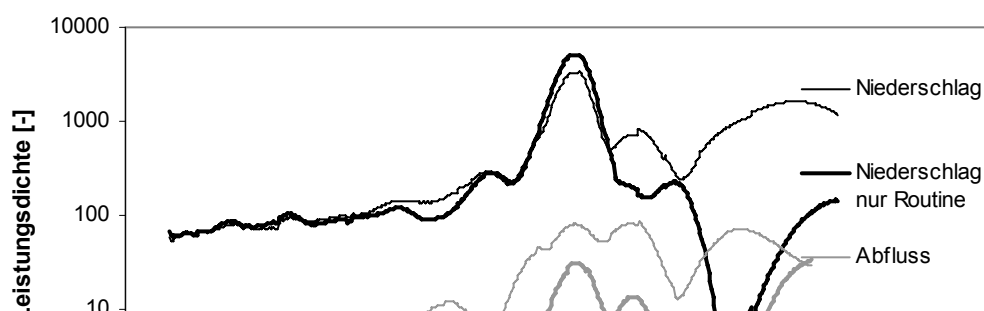


Abb. 5.34, „Wavelet“-Spektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Niederschlages und des Abflusses im Bruggagebiet

Aus dem Vergleich der jeweiligen Leistungsdichtespektren, die allein auf Routinemessungen beruhen bzw. den Spektren, die einige Intensivkampagnen umfassen, kann geschlossen werden, dass durch die Integration der Intensivkampagnen die Leistungsdichteverteilung verzerrt und somit nicht das wahre Spektrum erzeugt wird. FENG ET AL. (2002) machten darauf aufmerksam, welche große Messdatendichte für eine detaillierte Spektralanalyse wünschenswert wäre. Diese Datendichte liegt derzeit noch in keinem hydrochemischen Datensatz vor. In der weiteren Betrachtung stehen deshalb die Leistungsdichtespektren der Routinemessungen im Vordergrund.

Abgesehen von einem Maximum bei einem Jahr zeigt der Verlauf der Leistungsdichte des Inputs ein weißes Rauschen (Abbildung 5.33). Über das Zeitfenster von 10 bis 3000 Tagen ist die gemessene Variabilität des $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes im Niederschlag fast konstant. Diese Beobachtung ist auch im Zeit-Raum nachvollziehbar. Messkampagnen haben gezeigt, dass der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Niederschlages auch in kurzen Zeiträumen sehr variabel ist. In Abbildung 4.6 ist ersichtlich, wie innerhalb von einigen Tagen der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert des Niederschlages fast die gesamte Spannweite der achtjährigen Aufzeichnung erreicht.

Für die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Abfluss konnte – entgegen der Erwartungen – ebenfalls keine eindeutige Steigung nachgewiesen werden. Die Funktion ist eher als ein weißes Rauschen auf ca. 20 mal niedrigerem Niveau zu charakterisieren. Somit ist für das Gesamtsystem keine wellenlängenabhängige Dämpfung festzustellen, wie KIRCHNER ET AL. (2000) es für das Hafengebiet beobachten konnten. Stattdessen findet eine mehr oder weniger konstante Dämpfung in allen Zeitskalen statt. Sowohl Input als auch Output sind als relativ regelmäßige Jahresschwankungen mit weißem Rauschen zu charakterisieren. Die von KIRCHNER ET AL. (2000) angewandte Methode zur Ableitung der mittleren Verweilzeit aus einem fraktalen Dämpfungsmuster kann aufgrund dieser Beobachtung nicht auf das Bruggagebiet übertragen werden.

5.12.4 Interpretation der Analyseergebnisse

Vergleicht man die Abbildungen 5.31 und 5.33 miteinander, so fällt der Kontrast zwischen der Fortpflanzung der hydraulischen Impulse einerseits und der Bewegung des Wassers andererseits auf. Den Niederschlagsimpulsen folgt meist eine direkte Reaktion des Abflusses, wohingegen Fluktuationen in der $\delta^{18}\text{O}$ -Konzentration gedämpft und verzögert werden. Dieser unterschiedliche Charakter muss allerdings kein Widerspruch sein. Auch KIRCHNER ET AL. (2000) sind bei ihren Untersuchungen auf unterschiedliche Muster gestoßen. Die Ergebnisse zeigen vielmehr, dass hydraulische und hydrochemische Impulsfortpflanzung tatsächlich entkoppelt sind und von einander getrennt betrachtet werden müssen.

Diese Entkoppelung lässt sich darauf zurückführen, dass an der Abflussbildung infolge eines Niederschlagsereignisses auch Vorereigniswasser beteiligt ist. Über Druckübertragungsmechanismen bewegt sich der hydraulische Impuls dabei schneller als das Wasser selber. Die Spektralanalyse bestätigt somit die schon bereits mithilfe von Tracern und Fließmodellen erzielte Erkenntnis, dass die Fortpflanzung der Druckwelle von der des eigentlichen Wassers zu trennen ist.

Je länger die Periode einer Schwankung im Input, desto geringer ist allgemein die zu erwartende Dämpfung. Beim Vergleich des Input- und Outputspektrums eines Systems ist deshalb zu erwarten, dass sich die Leistungsdichtespektren von Input und Output für lange Perioden einander annähern. Dies ist für die $\delta^{18}\text{O}$ -Spektren der Routinemessungen auch andeutungsweise zu erkennen. Da die mittlere Verweilzeit des Wassers im Bruggagebiet im Vergleich zu dem von KIRCHNER ET AL. (2000) untersuchten Hafengebiet mehr als doppelt so hoch ist (2 Jahre im Vergleich zu 0,9 Jahren), wird vermutet, dass auch die beiden Leistungsdichtespektren sich erst bei längeren Perioden als die in Abbildung 5.33 gezeigten überlagern. Die Verlängerung des Leistungsdichtespektrums bedarf allerdings einer Verlängerung der Messzeitreihe.

Bei der Beurteilung des weißen Rauschens muss weiterhin in Betracht gezogen werden, dass auch durch die Messungenauigkeit eine solche stochastische Schwankung erzeugt wird. Das weiße Rauschen kann nicht unter die Schwelle sinken, die durch die Messgenauigkeit vorgegeben wird. Aus dem Vergleich der beiden Routinespektren kann geschlossen werden, dass zumindest das weiße Rauschen der Inputfunktion nicht (allein) durch die Messungenauigkeit hervorgerufen werden kann. Da sowohl Input- als auch Outputfunktion in identischer Weise analysiert wurden, müssten sich die beiden Spektren decken, sofern sie beide allein durch die Messungenauigkeit bedingt wären. Um festzustellen, ob das Spektrum des Outputs das weiße Rauschen der Messgenauigkeit schon erreicht hat, müsste mithilfe eines Zufallsgenerators ein synthetischer Datensatz hergestellt werden, der dieselbe Varianz wie der beobachtete Datensatz hat. Dieser Datensatz müsste dann auf dieselbe Weise analysiert und mit dem Messdatensatz verglichen werden.

Die mittlere Verweilzeit konnte nicht, wie erhofft, aus der Übertragungsfunktion der Leistungsdichtespektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte abgeleitet werden. Allerdings boten die Amplituden der beiden Spektren bei einer Periode von einem Jahr die Möglichkeit, die in 5.2 durchgeführte Prozedur für diese Werte zu wiederholen. Aus den Leistungsdichtespektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Routinemessungen (Abbildung 5.33) wurden für die Input- bzw. Outputfunktion die jeweiligen Leistungsdichten durch Wurzelziehen in die mittleren Amplituden der Jahresgänge umgeformt. Dabei ergaben sich die Werte 91,8 bzw. 7,9, welche dann in Gleichung 3.6 eingesetzt wurden und eine mittlere Verweilzeit von 22 Monaten ergaben. Dieses Ergebnis bestätigte, dass sich die Werte der Leistungsdichte in der richtigen Größenordnung bewegen.

Aus dem Leistungsdichtespektrum der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte konnte (unter der Annahme, dass das weiße Rauschen des Outputs nicht das Niveau des Analysefehlers erreicht hat) abgelesen werden,

dass die Schwankungen des Inputs durch das Gesamtsystem auf allen Wellenlängen etwa gleich stark gedämpft werden. Diese Beobachtung lässt allerdings nicht automatisch den Schluss zu, dass es keine fraktalen Fließprozesse im Bruggagebiet gibt. KIRCHNER (2002) sieht folgende Möglichkeiten zur Erklärung dieses konstanten Dämpfungsmusters: Entweder wird Niederschlagswasser nach einem Ereignis sehr schnell abgeführt, so dass dieses zur Zeit der Routinemessung schon aus dem System verschwunden ist, oder ein bedeutender Anteil des Wassers gelangt in tiefere Grundwasserspeicher mit sehr langer Verweilzeit und gleichmäßiger Dämpfungswirkung.

Als Erklärung der letztendlich konstanten Dämpfung kommt auch eine Überlagerung der Dämpfungsmuster der verschiedenen Abflusskomponenten in Frage. Aufgrund der bisherigen (durch Zeitreihenanalyse erzielten) Forschungsergebnisse konnten im Bruggagebiet drei Hauptabflusskomponenten ausgewiesen werden (UHLENBROOK 1999, UHLENBROOK ET AL. 2002). Es soll im folgenden der Versuch unternommen werden, die aus der Spektralanalyse gewonnenen Ergebnisse mit dem bisherigen Stand der Abflussbildungsforschung im Bruggagebiet (siehe Abschnitt 2.3) zu vergleichen und eine Hypothese bezüglich der Dämpfungsmuster der verschiedenen Abflusskomponenten zu formulieren.

Erstens wird vermutet, dass im Einzugsgebiet ein Langzeitspeicher wirkt, der eine steile Abnahme der Leistungsdichte im kürzerperiodischen Bereich bewirkt. Diesen Langzeitspeicher stellt das tiefe Grundwasser (Fließsystem-1) dar, in dem 19,5 % des Niederschlages im Mittel sechs bis neun Jahre gespeichert werden. Besonders in Perioden von kleiner einem Jahr werden die hydrochemischen Impulse wellenlängenabhängig gedämpft. Diese Dämpfung würde sich aus der verzögerten Reaktion und den Vermischungsprozessen, wie sie z.B. im tiefen Grundwasser stattfinden, ergeben. Für Perioden von mehr als einem Jahr findet nur eine geringe Dämpfung statt, so dass der Speicher in dieser Zeitskala wirksam die hydrochemischen Impulse weiterleitet.

Zweitens gibt es im Bruggagebiet eine schnelle Komponente des Direktabflusses. Sofern diese im kurzperiodischen Bereich die geringste Dämpfung erfährt, könnte sie den Abfall der Leistungsdichte mit abnehmenden Perioden überdecken. Dies könnte der Fall sein, wenn ein Teil des Niederschlages auf relativ direkten Wegen, z.B. durch Makroporenfluss oder über versiegelte oder Sättigungsflächen in das Gerinne gelangt und abfließt. Mit zunehmender zeitlicher Länge dieses Prozesses würde allerdings auf dem Weg des Wassers ins Gerinne eine Dämpfung durch Vermischung mit Vorereigniswasser anderer isotopischer Zusammensetzung stattfinden. Ebenfalls könnte es durch Ausdruckmechanismen dazu kommen, dass das eigentliche Niederschlagswasser z.T. durch Vorereigniswasser in der Abflussbildung ersetzt wird. Auch dieser Prozess würde eine Dämpfung des Signals bewirken. Es ist somit nachvollziehbar, dass diese Komponente besonders im kurzperiodischen Bereich wirksam ist und nur einer geringen Dämpfung unterliegt.

Durch Direktabfluss werden im langfristigen Mittel 11 % des Niederschlages von Sättigungsflächen, versiegelten Flächen und makroporendominierten Blockschutthalten innerhalb von Stunden bis Tagen aus dem Gebiet geführt. Dabei ist der Abtransport vermutlich nicht so schnell, dass das Signal bei wöchentlichem Messturnus nicht mehr erfasst werden könnte. Diese Signale werden relativ gut weitergeleitet und können die starke Dämpfung, die durch den Langzeitspeicher verursacht wird, im hochfrequenten Bereich des Spektrums ausgleichen.

Drittens könnte zwischen diesen beiden bereits genannten Abflusskomponenten das Fließsystem-2 eingeordnet werden, welches vor allem im Bereich von Monaten bis Jahren wirksam ist. Dies bedeutet, dass es in diesem Zeitfenster Impulse gut weiterleitet, was sich im Leistungsdichtespektrum als geringe Dämpfung der Impulse widerspiegelt. Mit einer mittleren Verweilzeit von 2-3 Jahren werden in den mittelfristigen Speichern der Hanggrundwasserleiter 69,4 % des langfristigen Abflusses gebildet. Damit sich eine über das gesamte Spektrum mehr oder weniger konstante Leistungsdichte ergibt, wie es in Abbildung 5.33 zu beobachten ist, müsste diese

mittelfristige Komponente zeitlich genau zwischen den beiden anderen Komponenten wirksam sein und ihr Leistungsdichtemuster müsste gerade die Dämpfung der anderen komplementär ergänzen.

Aus dieser Betrachtung ergibt sich ein Ansatzpunkt für weitere Forschung. Statt vom Leistungsdichtespektrum auf die Verweilzeitstruktur zu schließen, könnte der entgegengesetzte Weg gegangen werden. Die drei ausgewiesenen Abflusskomponenten sollten auf numerischem Weg jeweils in separate Leistungsdichtespektren umgesetzt werden, welche dann entsprechend der Abflussanteile der Komponenten zu theoretischen Leistungsdichtespektren kombiniert werden können.

Dieses theoretische Leistungsdichtespektrum könnte dann mit dem beobachteten verglichen werden, um die bislang gültige Hypothese bezüglich der Verteilungsfunktion und des langfristigen Abflussanteils der einzelnen Komponenten zu prüfen. Dabei könnte einerseits ein „Langzeitspektrum“ erzeugt werden, in dem die langfristigen Abflussanteile der drei Hauptkomponenten berücksichtigt werden. Andererseits könnten bei der Erstellung des theoretischen Leistungsdichtespektrums auch verschiedene Abflusssituationen mit vorher bestimmten Abflussanteilen nachempfunden werden. Hier bieten besonders die Messwerte aus Intensivkampagnen die Gelegenheit, die Hypothese zur Beteiligung direkter Komponenten bei Hochwassersituationen zu prüfen.

5.12.5 Fazit

Auf der Basis der Leistungsdichtespektren der Wasserflüsse konnte eine Abschätzung der Laufzeit der hydraulischen Impulse im Untersuchungsgebiet vorgenommen werden. Hier konnte die Beobachtung des fraktalen Verhaltens von hydrologischen Systemen bestätigt und weitere Einblicke in die Natur von Leistungsdichtespektren sowie von „Wavelet“-Transformationen gewonnen werden. Aufgrund des für das Bruggagebiet errechneten Musters der Leistungsdichtespektren der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte konnte die von KIRCHNER ET AL. (2000) vorgestellte Methode zur Ableitung der mittleren Verweilzeit aus dem Leistungsdichtespektrum nicht angewendet werden. Anhand der Beobachtungen konnten lediglich Vermutungen aufgestellt werden, wie die bestehenden Hypothesen zur Abflussbildung im Bruggagebiet mit dem beobachteten Leistungsdichtespektrum vereinbar sind.

Gleichzeitig öffnete sich dabei ein neues Forschungsfeld: Die Hypothesen zur Abflussbildung sollten in ein theoretisches Leistungsdichtespektrum übertragen und mit dem aus Messwerten berechneten Spektrum verglichen werden. Dies wäre eine innovative Vorgehensweise im Bruggagebiet, da die bislang durchgeführten Betrachtungen auf den Zeit-Raum beschränkt waren. Es wird deshalb vermutet, dass dieser Ansatz einen wertvollen Beitrag zur Validierung der Prozessvorstellungen liefern kann.

6 Schlussfolgerungen und Ausblick

Die Schlussfolgerungen aus den Einzelergebnissen dieser Arbeit sind anhand der vier eingangs formulierten Fragen gegliedert. Die einzelnen Abschnitte enden mit einem Ausblick und Empfehlungen für die weitere Forschung.

1. Welche mittleren Verweilzeiten können für das Einzugsgebiet der Brugga und für das Teilsystem „Zipfeldobel“ aufgrund der neuen verlängerten Messreihe ermittelt werden?

Über eine Optimierung der Modelleffizienz wurden für den Zeitraum 1995 bis 2000 mithilfe verschiedenster Ansätze für das Bruggagebiet mittlere Verweilzeiten von 19 bis 30 Monaten ermittelt. Die beste Modellanpassung (mit einer Modelleffizienz von 0,173) ergab sich für das halbmonatlich aufgelöste Exponentialmodell mit mittleren halbmonatlichen Infiltrationskoeffizienten und einer mittleren Verweilzeit von 26,5 Monaten. Die Modelleffizienz für dieses Modell ist an dem Vergleichswert von 0,295 zu messen, der die natürliche Streuung der Messwerte berücksichtigt und somit die bestmögliche Anpassung quantifiziert.

Während die Modellierung für den Zeitraum 1995 bis 2000 zufriedenstellend war, kam es im letzten Teil des Gesamtzeitraums (2000 bis 2002) zu Unterschätzungen der gemessenen $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Abflusses durch das Modell. In diesem Zeitraum scheint es im Untersuchungsgebiet eine besondere und bislang noch nicht näher erfasste Konstellation verschiedener Parameter gegeben zu haben, die durch das Modell nur ungenügend verarbeitet wurde.

Unter Verwendung der Methode der Amplitudendämpfung, welche eine Exponentialverteilung unterstellt, wurde eine mittlere Verweilzeit von 25 Monaten ermittelt. Nach der Fourier-Transformation war eine entsprechende Betrachtung im Frequenz-Raum möglich, die eine mittlere Verweilzeit von 22 Monaten ergab. In der Zusammenschau dieser Ergebnisse wird angenommen, dass die wahre mittlere Verweilzeit mit großer Wahrscheinlichkeit bei ca. 25 Monaten und damit in der gleichen Größenordnung wie der von UHLENBROOK (1999) ermittelte Wert von 24 Monaten liegt. Für die Quelle „Zipfeldobel“ ergab sich die beste Modellanpassung für eine mittlere Verweilzeit von 39 Monaten. Auch für dieses Teilsystem war die aufgrund der verlängerten Zeitreihe berechnete mittlere Verweilzeit mit dem von UHLENBROOK (1999) bestimmten Wert von 36 Monaten vergleichbar.

Die Ergebnisse bezüglich der mittleren Verweilzeit haben ihre Relevanz in der Beurteilung des Bruggagebietes in Hinblick auf Katastrophen oder langfristige Schadstoffeinträge. Sie sind ebenfalls ein Anhaltspunkt, um abzuschätzen, wie und in welchem zeitlichen Rahmen sich Landnutzungsänderungen auf das hydrologische System dieses Gebietes auswirken. Unter der Bedingung, dass sich ein Stoff konservativ verhält und unverzögert mit dem Wasser transportiert wird, können die Ergebnisse aus den Sauerstoff-18-Zeitreihen direkt übertragen werden. In den meisten Fällen muss allerdings zusätzlich noch Wechselwirkungen dieses Stoffes berücksichtigt werden. Für eine umfassende Beschreibung der angenommenen Altersstruktur des Wassers bedarf es neben der mittleren Verweilzeit auch einer Angabe über die Verweilzeitverteilung, aus der zu entnehmen ist, wie schnell eine Antwort des Systems zu erwarten ist und mit welchem Langzeitrückhalt zu rechnen ist.

Neben der Bestimmung der mittleren Verweilzeit konnte im Rahmen dieser Arbeit eine Prozedur erstellt und getestet werden, die analog zu *FLOW PC* Berechnungen des Faltungsintegrals der Lumped-Parameter-Modelle automatisch durchführt und dabei die Modellparameter variiert.

Neben dem höheren Grad der Automatisierung konnte die Modelleffizienz als strengeres Gütemaß eingeführt werden. Diese verbesserte Prozedur hat sich als effektiv erwiesen.

2. Welche Modellunsicherheiten lassen sich aus der Brugga-Messreihe von 1995 bis 2002 für die Lumped-Parameter-Modelle ableiten?

Aus der oben aufgezeigten Spannweite der plausiblen Modellergebnisse sowie aus der Betrachtung der Sensitivität der mittleren Verweilzeit im Modell konnte ein Unsicherheitsbereich von sechs Monaten abgeleitet werden. Aufgrund der verlängerten Zeitreihe konnte die Bestimmung der mittleren Verweilzeit auf eine breitere Basis gestellt werden; der Unsicherheitsbereich konnte allerdings nicht verringert werden. Die Gründe für diese Unsicherheiten sind in (1) fehlerhaften Eingangsdaten, (2) der Gewichtung des Niederschlages zur vereinfachten Umsetzung der Grundwasserneubildung sowie (3) der nur geschätzten Altersstruktur des Wassers begründet.

Bei der Durchführung der Modellierungen traten verschiedene praktische Probleme auf: Erstens kam es bei einigen Modellansätzen durch die Methode der Optimierung der Modelleffizienz zu unplausibel langen mittleren Verweilzeiten. Zweitens ergab die Verwendung des Infiltrationsparameters als dritte Kalibrierungsgröße uneindeutige Ergebnisse. Schließlich musste im Rahmen der Bestimmung der mittleren Verweilzeit über die Lösung des inversen Problems festgestellt werden, dass diese Methode ein gewisses Maß an Willkürlichkeit beinhaltet. Abhängig von den Modellannahmen und den gewählten Methoden zur Bestimmung der Infiltrationsparameter konnte das Ergebnis im vorhinein in die eine oder andere Richtung modifiziert werden.

Der relativ hohe Unsicherheitsbereich und die praktischen Probleme bei der Modellierung bedeuten Einschränkungen für die Anwendbarkeit und Aussagekraft des Modells. Deshalb sollten die Lumped-Parameter-Modelle nur als Abschätzungsverfahren angesehen werden. Falls vermutet wird, dass die Fließzeiten zumindest annähernd exponentialverteilt sind, sollte in Erwägung gezogen werden, ob für die gewünschte Anwendung die Methode der Amplitudendämpfung nicht ebenfalls ausreichend gute Ergebnisse bei geringerem Mess- und Rechenaufwand liefert.

3. In wieweit sind die Lumped-Parameter-Modelle in der Lage, das räumliche Prozessverständnis modelltechnisch umzusetzen?

Während es einerseits gelang, durch die Erhöhung der zeitlichen Auflösung und die Korrektur der synthetischen Eingangsfunktion die Modelleffizienz zu steigern, erbrachte die Integration der Evapotranspirationsverhältnisse und der Schneeschmelze keine Modellverbesserung. Neben der unzureichenden Datenqualität könnte die Begründung darin liegen, dass das Modell aufgrund seiner starken Vereinfachung nicht in der Lage war, die zusätzlichen Daten gewinnbringend umzusetzen. Als weiterer Forschungsaspekt wird deshalb die Integration von prozessorientierten und ggf. auch räumlich differenzierten Daten in das Lumped-Parameter-Modell vorgeschlagen.

Als erster Schwachpunkt der Modellierung wurde die Unsicherheit der Eingangsdaten festgestellt. Diese Unsicherheit betrifft einerseits das Gebietsmittel des Niederschlages in bezug auf Menge und $\delta^{18}\text{O}$ -Wert. Besonders schwierig erscheint in diesem Zusammenhang die Erfassung des festen Niederschlages. Andererseits zeigt auch die Outputfunktion eine nicht zu vernachlässigende Varianz, die durch wöchentliche Momentanmessungen nicht ausreichend erfasst wird.

Der zweite große Unsicherheitsbereich der Lumped-Parameter-Modelle ist in der Modellstruktur begründet. Zur Modellierung der Grundwasserneubildung wird im Modell ein bestimmter Anteil des Niederschlages als zum Abfluss beitragend bestimmt. Der Schwachpunkt dieses Ansatzes besteht darin, dass die reine Mengenbilanzierung die komplexen Wasserbewegungen im Boden sowie die isotopisch relevanten Wechselwirkungen mit der Atmosphäre nicht adäquat nachvollziehen kann.

Dieses Problem wird zusätzlich dadurch verstärkt, dass das Lumped-Parameter-Modell in der bisherigen Form jeweils nur den aktuell gefallenen Niederschlag berücksichtigt und bilanziert. Da das infiltrierte Wasser allerdings nicht als horizontales Band gleichmäßig durch den Boden perkoliert, kommt es dadurch zu Fehleinschätzungen. Eine weitere Folge dieser vereinfachten Konzeption besteht darin, dass das Modell nicht in der Lage ist, Niederschlagswasser über das betrachtete Zeitintervall hinaus zu speichern. Somit sind differenziertere Betrachtungen des Bodenwassers und des Schneespeichers nicht möglich.

Für die weitere Forschung wird deshalb empfohlen, eine mindestens halbmonatlich aufgelöste Modellierung der Wasserflüsse mithilfe eines prozess-basierten und modularen Niederschlags-Abfluss-Modells durchzuführen. Daneben bedarf es der Veränderung der Messroutine. Es wird vorgeschlagen, durch Verknüpfung von Fernerkundungsmethoden und Vor-Ort-Messungen ein Verfahren zu entwickeln, mithilfe dessen die Ausdehnung des Schneespeichers bestimmt werden kann.

Zur Berücksichtigung der zusätzlichen Daten müsste die Modellkonzeption geändert werden: Eine Möglichkeit stellt hierzu die Einführung eines Speicherterms in das Modell dar, der den Schneespeicher separat betrachtet und das Schneeschmelzwasser ggf. zum Niederschlagsinput addiert. Ein vergleichbarer Speicher könnte auch für den Boden erstellt werden, so dass die Verdunstung auf den gesamten verfügbaren Wasserkörper im Boden angewendet werden könnte statt nur auf den aktuell gefallenen Niederschlag. Weiterhin sollte die Erhebung der Eingangsdaten dahingehend geändert werden, dass als Inputfunktion das an der Bodenoberfläche auftreffende flüssige Wasser betrachtet wird, indem das Schneelysimeter um eine Messvorrichtung zur Erfassung des aus ihm abfließenden Wassers erweitert wird.

4. Wie lassen sich die Modellansätze von KIRCHNER ET AL. (2000) bezüglich der Analyse der wellenlängenabhängigen Dämpfung der Chloridzeitreihen des Niederschlages auf das Bruggagebiet übertragen?

Mithilfe der Spektralanalyse konnte zum ersten Mal eine Abschätzung der mittleren Laufzeiten der hydraulischen Impulse im Bruggagebiet vorgenommen werden. Diese betragen 20 Tage im Grundwasserkörper bzw. acht Stunden im Gerinnespeicher. Es konnte gezeigt werden, dass die Dämpfung der hydraulischen Impulse einen fraktalen Prozess darstellt.

Der fraktale Charakter konnte für die Variation der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte in Niederschlag und Abfluss nicht direkt nachgewiesen werden. Aufgrund des fast konstanten Dämpfungsmusters war zudem eine Ableitung der mittleren Verweilzeit nach der von KIRCHNER ET AL. (2000) vorgeschlagenen Methode nicht möglich. Es wird vermutet, dass sich der konstante Dämpfungsfaktor von 20 aus einer Überlagerung verschiedener Dämpfungsmuster ergibt, und dass diese Muster mit den einzelnen Abflusskomponenten korrespondieren.

In einem nächsten Schritt sollten die bisherigen Ergebnisse der Spektralanalyse hinsichtlich einer Validierung der derzeitigen Hypothesen bezüglich der langfristigen Abflusskomponenten im Bruggagebiet verwendet werden. Für die drei von UHLENBROOK ET AL. (2002) ausgewiesenen

langfristigen Hauptabflusskomponenten könnten theoretische Leistungsdichtespektren berechnet und entsprechend des Abflussanteils miteinander kombiniert werden. Durch einen Vergleich dieses Spektrums mit dem bereits berechneten könnte eine Überprüfung und ggf. eine Modifikation dieser Hypothesen vorgenommen werden. Die zukünftige Forschung auf diesem Gebiet könnte somit zu einer Verringerung der dritten Modellunsicherheit, welche in der abgeschätzten Altersstruktur des Wassers begründet ist, beitragen.

Literaturverzeichnis

- AMIN, I.E., CAMPANA, M.E. (1996): A general lumped parameter model for the interpretation of tracer data and transit time calculations in hydrologic systems. *Journal of Hydrology* 179: 1-21.
- ANDERSEN, L.J., SEVEL, T. (1974): Six years' environmental tritium profiles in the unsaturated zones, Grønhøj, Denmark. *Isotope Techniques in Groundwater Hydrology*. IAEA, Vol. I: 3-20. Wien.
- ANDREWS, J.N., FONTES, J.C., ARANYOSSY, J.F., DODO, A., EDMUNDS, A.W., TRAVI, Y. (1993): The evolution of the alkaline groundwaters in the continental Intercalaire aquifer of the Ihazer plain, Niger. *Water Resources Research* 30(1): 45-61.
- ARAGUAS-ARAGUAS, L., FROELICH, K., ROZANSKI, K. (2000): Deuterium and oxygen-18 isotope composition of precipitation and atmospheric moisture. *Hydrological Processes* 14: 1341-1355.
- BAERTSCHI, P. (1976): Absolute ^{18}O content of Standard Mean Ocean Water. *Earth and Planet. Science Letters* 31: 341-344.
- BÁRDOSSY, A. (1998): Statistische Untersuchung der Niederschlagsänderungen aus hydrologischer Sicht. In: Lozán, José L.: *Warnsignal Klima: wissenschaftliche Fakten*, Berlin, Parey.
- BARNES, J.C. & TURNER, J.V. (1998): Isotopic Exchange in Soil Water. In: Kendall, C. & McDonnell, J.J. (1998): *Isotopes in Catchment Hydrology*. Elsevier/North Holland Publ. Comp., Amsterdam.
- BERGMANN, H., SACKL, B., MALOSZEWSKI, P., STICHLER, W. (1986): Hydrological investigations in a small catchment area using isotope data series. In: *Proc. 5th Int Symp. On Underground Water Tracing*, 22-27 September 1986, Athen, 255-272. Institute of Geology and Mineral Exploration, Athen.
- BERGSTRÖM, S., (1992): The HBV model - its structure and applications. Norrköping, Sweden.
- BIEHLER, D. (1995): Kluftgrundwässer im kristallinen Grundgebirge des Schwarzwaldes - Ergebnisse von Untersuchungen in Stollen. *Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten (TGA)*, C 22, Tübingen.
- BISSOLLI, P. (2000): Kommen Westwetterlagen häufiger vor als früher? In: *Klimastatusbericht des DWD 1999*. Eigenverlag, Offenbach.
- BLISS, C.I. (1970): *Periodic Regressions, Statistics in Biology, Volume II*. McGraw-Hill Book Co., New York, USA. S. 219-287.

- BRODERSEN, C., POHL, S., LINDENLAUB, M., LEIBUNDGUT, CH., V. WILPERT, K. (2000): Influence of vegetation structure on isotope content of throughfall and soil water. *Hydrological Processes* 14: 1439-1448.
- CASPARY, H.J. (1998): Hochwasserverschärfung infolge von Klimaänderungen. In: Lozán, J.L.: *Warnsignal Klima: wissenschaftliche Fakten*, Berlin, Parey.
- CHEN, J., WHEATER, H.S., LEES, M.J. (2002): Identification of processes affecting stream chloride response in the Hafren catchment, mid-Wales. *Journal of Hydrology* 264: 12-23.
- CLARK, I.D., FRITZ, P. (1997): *Environmental Isotopes in Hydrogeology*. Lewis Publishers, New York. 328 S.
- COOPER, L.W. (1998): Isotopic Fractionation in Snow Cover. In: Kendall, C. & McDonnell, J.J. (1998): *Isotopes in Catchment Hydrology*. Elsevier/North Holland Publ. Comp., Amsterdam.
- DANSGAARD, W. (1954): The O-18 abundance in fresh water. *Geochim. Cosmochim. Acta* 6: 241-269.
- DANSGAARD, W. (1964): Stable isotopes in precipitation. *Tellus* 16(4): 436-468.
- DAWSON, T.E. & EHLERINGER, J.R. (1998): Plants, isotopes and water use: a catchment-scale perspective. In: Kendall, C. & McDonnell, J.J. (1998): *Isotopes in Catchment Hydrology*. Elsevier/North Holland Publ. Comp., Amsterdam.
- DEWALLE, D.R., EDWARDS, P.J., SWISTOCK, B.R., ARAVENA, R., DRIMMIE, R.J. (1997): Seasonal isotope hydrology of three Appalachian forest catchments. *Hydrological Processes* 11: 1895-1906.
- DIDSZUN, J., (2000): Abflussbildung an Hängen. Diplomarbeit am Institut für Hydrologie der Universität Freiburg.
- DINCER, T. & DAVIS, G.H. (1967): Some consideration on tritium dating and the estimates of the tritium input function. *Memories Int. Ass. Hydrogeology*, 8, Congress of Istanbul, Turkey: 267-286.
- DINCER, T., PAYNE, B.R., FLORKOWSKI, T., MARTINEC, T., TONGIORGI, E. (1970): Snow-melt runoff from measurements of tritium and oxygen-18. *Water Resources Research* 6: 110-120.
- DUFFY, C. J. & GELHAR, L. W. (1985): A frequency domain approach to water quality modeling in groundwater: Theory. *Water Resources Research* 21: 1175-1184.

- DVWK, DEUTSCHER VERBAND FÜR WASSERWIRTSCHAFT UND KULTURBAU (1996): Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen. Merkblätter zur Wasserwirtschaft, 238, Kommissionsvertrieb Wirtschafts- und Verlagsgesellschaft Gas und Wasser mbH, Bonn.
- ERIKSSON, E. (1958): The possible use of tritium for estimating groundwater storage. *Tellus* 10: 472-478.
- FENG, X., KIRCHNER, J.W., NEAL, C. (2002): Spectral analysis of chemical time series from long-term catchment monitoring studies: Hydrochemical insights and data requirements. Eingereicht bei *Water, Air, and Soil Pollution*, 17.08.2002.
- FLEMING, S.W., LAVENUE, A.M., ALY, A.H., ADAMS, A. (2002): Practical applications of spectral analysis to hydrologic time series. *Hydrological Processes* 16: 562-574.
- FORSCHUNGSGRUPPE FLIEßGEWÄSSER (1994): Fließgewässertypologie. Ecomed Verlag, Landsberg am Lech.
- FREY, M. (1999): Tracerhydrologische Untersuchungen im Brugga-Einzugsgebiet: Gase, Silikat und stabile Isotope. Diplomarbeit am Institut für Hydrologie der Universität Freiburg.
- GAT, J.R., MOOK, W.G., MEIJER, H.A.J. (2000): Volume II - Atmospheric Water. In: MOOK, W.G. (2000): Environmental isotopes in the hydrological cycle. IAEA Technical documents in hydrology, No. 39.
- GELHAR, L.W., WELTY, C., REHFELDT, K.R. (1992): A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research* 28: 1955-1974.
- GERSTENGARBE, F.-W., WERNER, P.C., RÜGE, U. (1999): Katalog der Großwetterlagen (1881-1998) nach Paul Hess und Helmuth Brezowsky. 5. Auflage. Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung, Potsdam.
- GOODE, D.J. (1996): Direct simulation of groundwater age. *Water Resources Research* 32: 289-296.
- GRABCZAK, J., MALOSZEWSKI, P., ROZANSKI, K., ZUBER, A. (1984): Estimation of the tritium input function with the aid of stable isotopes. *Catena* 11: 105-114.
- HÄDRICH, F. & STAHR, K. (1992): Die Böden in der Umgebung von Freiburg i.Br. In: Mäckel, R. & Metz, B. (1992): Schwarzwald und Oberrheintiefland. Freiburger Geographische Hefte, Heft 36, Universität Freiburg, Institut für Physische Geographie, Freiburg.

- HAGGERTY, R., WONDZELL, S.M., JOHNSON, M.A. (2002): Power-Law Residence Time Distribution in the Hyporheic Zone of a 2nd Order Mountain Stream. *Geophysical Research Letters* 29.
- HERRMANN, A., MALOSZEWSKI, P., RAU, R., ROSENOW, W., STICHLER, W. (1984): Anwendung von Tracertechniken zur Erfassung des Wasserumsatzes in kleinen Einzugsgebieten. Ein Forschungskonzept für die Oberharzer Untersuchungsgebiete. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen* 28, 3: 65-74.
- HERMANN, A., KOLL, J., LEIBUNDGUT, CH. MALOSZEWSKI, P., RAU, R., RAUERT, W., STICHLER, W. (1986): Anwendung von Tracertechniken zur Erfassung des Wasserumsatzes in kleinen Einzugsgebieten. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen* 30: 85-92.
- HERMANN, A., KOLL, J., LEIBUNDGUT, DH. MALOSZEWSKI, P., RAU, R., RAUERT, W., STICHLER, W. (1989): Wasserumsatz in einem kleinen Einzugsgebiet im paläozoischen Mittelgebirge (Lange Bramke, Oberharz). Eine hydrologische Systemanalyse mittels Umweltisotopen als Tracer. *Landschaftsökologie und Umweltforschung*, Heft 17. Braunschweig.
- HILDEBRAND, A. (1996): Abflussganglinienseparation im Einzugsgebiet der Brugga (Südschwarzwald) mit stabilen Isotopen und hydrochemischen Tracern im Frühjahr 1996. Diplomarbeit am Institut für Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg.
- HIMMELBLAU, D.M., BISCHOFF, K.B., (1968): *Process analysis and Simulation: Deterministic Systems*, Wiley, New York.
- IAEA, INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY (2001): *Isotope Hydrology Information System*. <http://isohis.iaea.org>. 20.05.2002
- KÄSS, W. (1992): *Lehrbuch der Hydrogeologie*, Band 9: Geohydrologische Markierungstechnik. Gebr. Bornträger. Berlin, Stuttgart.
- KENDALL, C. & CALDWELL, E.A. (1998): *Fundamentals of Isotope Geochemistry*. In: KENDALL, C. & McDONNELL, J.J. (1998): *Isotopes in Catchment Hydrology*. Elsevier/North Holland Publ. Comp. Amsterdam.
- KENDALL, C., McDONNELL, J.J. (1998): *Isotopes in Catchment Hydrology*. Elsevier/North Holland Publ. Comp. Amsterdam.
- KIRCHNER, J.W., FENG, X., NEAL, C. (2000): Fractal stream chemistry and its implications form contaminant transport in catchments. *Nature* 403: 524-527.

- KIRCHNER, J.W., FENG, X., NEAL, C. (2001): Catchment-scale advection and dispersion as a mechanism for fractal scaling in stream tracer concentrations. *Journal of Hydrology* 254: 82-101.
- KIRCHNER, J.W. (2002): Persönliche Mitteilung. Telefonat am 16.10.2002. J.W. Kirchner ist Professor für *Earth and Planetary Science* an der *University of California at Berkeley* sowie Direktor der *Central Sierra Field Research Stations*.
- KLEIN, G. (1994): Regionalisierung von Niederschlag mit Hilfe digitaler Geländeinformation - Entwicklung eines geoökologischen Modells zur routinemäßigen Ableitung hochauflösender Niederschlagskarten. *Freiburger Geographische Hefte* 44, Universität Freiburg, Institut für Physische Geographie, Freiburg.
- KNOBLOCH, A. (1999): Untersuchung des Stoffhaushaltes im Einzugsgebiet der Brugga unter besonderer Berücksichtigung der Bedeutung von Abflussereignissen. Diplomarbeit am Institut für Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg.
- KÖNIGER, P. (2002): Persönliche Mitteilung. Dr. P. Königer ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität in Freiburg.
- KREFT, A., ZUBER, A. (1978): On the physical meaning of the dispersion equation and its solution for different initial and boundary conditions. *Chem. Eng. Sci.* 33: 1471-1480.
- LAMPARSKI, F. (1985): Der Regenwurm *Lumbricus badensis*: seine Wohnröhre, seine Verbreitung und sein Einfluss auf die Böden im Südschwarzwald. Dissertation, Universität Freiburg, Institut für Bodenkunde und Waldernährungslehre, Freiburg.
- LEIBUNDGUT, CH. (1984): Zur Erfassung hydrologischer Messwerte und deren Übertragung auf Einzugsgebiete verschiedener Dimensionen. *Geomethodica* 9: 141-170.
- LINDENLAUB, M. (1998): Abflusskomponenten und Herkunftsräume im Einzugsgebiet der Brugga. Dissertation, Universität Freiburg, Institut für Hydrologie, Freiburg.
- LINDENLAUB, M., LEIBUNDGUT, CH., MEHLHORN, J., UHLENBROOK, S. (1997): Interactions of hard rock aquifers and debris cover for runoff generation. *IAHS-Publ.* 241, 63-74.
- LINDSTRÖM, G. & BERGSTRÖM, S. (1992): Improving the HBV and PULSE-models by use of temperature anomalies. *Vannet i Norden*, No. 1, 16-23.

- MALOSZEWSKI, P. (2002): Persönliche Mitteilungen im Juli und September 2002. Prof. Dr.-Ing. P. Maloszewski leitet die Forschungsgruppe Hydrogeologie am GSF-Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit.
- MALOSZEWSKI, P., RAUERT, W., STICHLER, W. UND HERRMANN, A. (1983): Application of flow models in an alpine catchment area using tritium and deuterium data. *Journal of Hydrology* 66: 319-330.
- MALOSZEWSKI, P., RAUERT, W., TRIMBORN, P. HERRMANN, A., RAU, R. (1992): Isotope hydrological study of mean transit times in an alpine basin (Wimbachtal, Germany). *Journal of Hydrology* 140: 343-360.
- MALOSZEWSKI, P. & ZUBER, A. (1982): Determining the turnover time of ground water systems with the aid of environmental tracers, I. Models and their applicability, *Journal of Hydrology* 57: 207-231.
- MALOSZEWSKI, P. & ZUBER, A. (1993): Principles and practice of calibration and validation of mathematical models for the interpretation of environmental tracer data in aquifers, *Advanced Water Resources* 16: 173-190.
- MALOSZEWSKI, P. & ZUBER, A. (1996): Lumped parameter models for the interpretation of environmental tracer data. *Manual on Mathematical Models in Isotope Hydrology*, IAEA-TECDOC-910, 9-58, IAEA, Wien, 1996.
- MALOSZEWSKI, P. & ZUBER, A. (1998): A general lumped parameter model for the interpretation of tracer data and transit time calculation in hydrologic systems. *Comments. Journal of Hydrology* 204: 297-300.
- MARGRITA, R., GUIZERIX, J., COROMPT, P., GAILLARD, B., CALMELS, P., MANGIN, A., BAKALOWICZ, M. (1984): Reflexions sur la théorie des traceurs: applications en hydrologie isotopique. Technical Report No. 270, S. 563-678. International Atomic Energy Agency, Wien.
- MARTINEC, J., SIEGENTHALER, U., OESCHGER, H., TONGIORGI, E. (1974): New insights into the runoff-mechanisms by environmental isotopes. In: *Isotope Techniques in Groundwater Hydrology*. IAEA, Vol. I: 3-20. Wien
- MCDONNELL, J.J., STEWARD, M.K., OWENS, I.F. (1991): Effect of catchment-scale subsurface-mixing on stream isotopic response. *Water Resources Research* 33: 91-109.
- MCGUIRE, K.J., DEWALLE, D.R., GBUREK, W.J. (2002): Evaluation of mean residence time in subsurface waters using oxygen-18 fluctuations during drought conditions in the mid-Appalachians. *Journal of Hydrology* 261: 132-149.

- MONBARON, E. (1998): Modeling of environmental tracer data in Brugga catchment (Germany). Diplomarbeit, EPF Lausanne, Schweiz.
- MOOK, W.G. (2000): Volume I Introduction: Theory, Methods, Review. In: MOOK, W.G. (2000): Environmental isotopes in the hydrological cycle. IAEA Technical documents in hydrology, No. 39. Paris.
- MOSER, H. & RAUERT, W. (1980). Lehrbuch der Hydrogeologie - Isotopenmethoden in der Hydrologie. Gebr. Bornträger, Berlin, Stuttgart.
- MOSER, H. & STICHLER, W. (1971): Die Verwendung des Deuterium- und Sauerstoff-18-Gehalts bei hydrologischen Untersuchungen. Geol. Bavarica 64: 7-35.
- MULLER, R.A. & MACDONALD, G.J. (2000): Ice Ages and Astronomical Causes. Praxis Publishing, London.
- NASH, J.E. & SUTCLIFFE, J.V. (1970): River flow forecasting through conceptual models; Part I - A Discussion of principles. Journal of Hydrology 10: 282-290.
- NEUMAN, S.P. (1990): Universal scaling of hydraulic conductivities and dispersivities in geologic media. Water Resources Research 26: 1749-1758.
- NIR, A. (1964): On the interpretation of tritium age measurements of groundwater. Journal of Geophysical Research 69: 2589-2595.
- PARLOW, E. & ROSNER, H.-J. (1992): Klima am südlichen Oberrhein. In: Mäkel, R. & Metz, B. (1992): Schwarzwald und Oberrheintiefland. Freiburger Geographische Hefte, Heft 36, Universität Freiburg, Institut für Physische Geographie, Freiburg.
- PEARCE, A.J., STEWART, M.K., SKLASH, M.G. (1986): Storm runoff generation in humid headwater catchments. 1. Where does the water come from? Water Resources Research 22: 1263-1272.
- PREUß, W. & WENISCH, G. (1998): Lehr- und Übungsbuch Mathematik für Elektro- und Automatisierungstechniker. Fachbuchverlag Leipzig. 249 S.
- PRZEWLOCKI, K. (1975): Hydrologic interpretation of the environmental isotope date in the Eastern Styrian Basin. Steirische Beiträge zur Hydrologie 27: 85-133.
- RANK, D., VÖLKL, G., MALOSZEWSKI, P., STICHLER, W. (1992): Flow dynamics in an Alpine karst massif studied by means of environmental isotopes. Isotope Techniques in Water Resources Development 1991. IAEA, Wien, S. 425-450.

- REKLIP (1995): Klimaatlas Oberrhein Mitte-Süd, Atlas Climatique du Fossé Rhénan Méridional. Zürich-Offenbach-Strasbourg.
- RICHTER, D. (1995): Ergebnisse methodischer Untersuchungen zur Korrektur des systematischen Messfehlers des Hellmann-Niederschlagsmessers. Berichte des Deutschen Wetterdienstes, Offenbach am Main.
- ROHDE, A. (1998): Snowmelt-Dominated Systems. In: Kendall, C. & McDonnell, J.J. (1998): Isotopes in Catchment Hydrology. Elsevier/North Holland Publ. Comp., Amsterdam.
- ROHDE, A., NYBERG, L., BISHOP, K. (1996): Transit times for water in a small till catchment from a step shift in the oxygen-18 content of the water input. Water Resources Research 32: 3497-3511.
- ROSER, S. (2001): Flächendetaillierte Weiterentwicklung des prozessorientierten Einzugsgebietsmodells TAC und Visualisierung der Modellergebnisse mit einem dynamischen GIS. Diplomarbeit am Institut für Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg.
- SCARGLE, J. D. (1982): Studies in astronomical time series analysis II. Statistical aspects of unevenly spaced data. Astrophysical Journal 263: 835-853.
- SCHÖNWIESE, C.-D. (2000): Praktische Statistik für Meteorologen und Geowissenschaftler. Gebr. Borntraeger, Berlin, Stuttgart.
- SIMIC, E., DESTOUNI, G. (1999): Water and solute residence times in a catchment: stochastic-mechanistic model interpretation of ^{18}O transport. Water Resources Research 35: 2109-2119.
- SOULSBY, C., MALCOLM, R., HELLIWELL, R., FERRIER, R.C. (1999): Hydrochemistry of montane springs and their Influence on streams In the Cairngorm mountains, Scotland. Hydrology and Earth Sciences 3: 409-419.
- SOULSBY, C., MALCOM, R., HELLIWELL, R., FERRIER, R.C., JENKINS, A. (2000): Isotope hydrology of the Allt a' Mharcaidh catchment, Cairngorms, Scotland: implications for hydrological pathways and residence times, Hydrological Processes 14: 747-762.
- STEWART, M.K., McDONNELL, J.J. (1991): Modelling Base Flow Soil Water Residence Times from Deuterium Concentrations. Water Resources Research 27: 2681-2693.
- STICHLER, W., MALOSZEWSKI, P., MOSER, H. (1986): Modelling of River Water Infiltration Using Oxygen-18 Data. Journal of Hydrology 83: 355-365.

- STOBER, I. (1995): Die Wasserführung des kristallinen Grundgebirges. Ferdinand-Enke-Verlag, Stuttgart.
- UHLENBROOK, S. (1999): Untersuchung und Modellierung der Abflussbildung in einem mesoskaligen Einzugsgebiet, Freiburger Schriften zur Hydrologie, Band 10. Institut für Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg. 201 S.
- UHLENBROOK, S., SEIBERT, J., ROHDE, A., LEIBUNDGUT, CH. (1999): Prediction uncertainty of conceptual rainfall-runoff models caused by problems to identify model parameters and structure. Hydrological Science Journal 44: 279-299.
- UHLENBROOK, S., FREY, M., LEIBUNDGUT, CH., MALOSZEWSKI, P. (2002): Hydrograph separations in a mesoscale mountainous basin at event and seasonal timescales. Water Resources Research 38: 31/1-31/14.
- VITVAR, T. (1998): Water residence times and runoff generation in a small prealpine catchment. Züricher Geographische Hefte 71. Zürich.
- VROEIJENSTIJN, A. (1997): Analysis of the Runoff Processes in the Brugga Catchment by Hydrograph Separations. Abschlussarbeit zur Erringung des Master-Grades in Zusammenarbeit mit dem Institut für Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg.
- WAGNER, W., GEYH, M.A. (1999): Application of Environmental Isotope Methods for Groundwater Studies in the ESCWA Region. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. Geologisches Jahrbuch, Reihe C, Heft 67.
- WEISCHET, W. (1979): Naturraum und Klima. In: Zöttl, H.W. (1979): Exkursionsführer zur Jahrestagung der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft. Mitteilungen der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft, Band 28: 3-21.
- WENDLING, U. (1995): Zur Verdunstungsberechnung auf der Grundlage der FAO-Referenzverdunstung. In: Peschke, G. (1996): Wasser im System Boden-Pflanze-Atmosphäre. IHI-Schriften, Heft 2, 139-149.
- WENNINGER, J. (2002): Experimentelle Untersuchung zur Dynamik von Hanggrundwasser und dessen Übertritt in die Talaue und den Vorfluter im Bruggaeinzugsgebiet. Diplomarbeit am Institut für Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg.
- VON WILPERT, K., KOHLER, M., ZIERLEWANG, D. (1996): Die Differenzierung des Stoffhaushaltes von Waldökosystemen durch die waldbauliche Behandlung auf einem Gneis-Standort des Mittleren

Schwarzwaldes. Mitteilungen der Forstlichen Versuchsanstalt Baden-Württemberg, Heft 197, Freiburg.

YEVJEVICH, V. (1972): Probability and Statistics in Hydrology. Water Resources. Fort Collins, CO, USA.

YURTSEVER, Y. (1995): An overview of conceptual model formulations for evaluation of isotope data in hydrological systems. IAHS Publication 229: 3-12.

YURTSEVER, Y. (2000): Volume VI - Modelling. In: MOOK, W.G. (2000): Environmental isotopes in the hydrological cycle. IAEA Technical documents in hydrology, No. 39.

Anhang

Herleitung der Formel zur Kalibrierung des Infiltrationsparameters

Die mittlere Isotopenkonzentration des gesamten Messintervalls lässt sich darstellen durch die Gewichtung der Einzelwerte c_i mit den dazu gehörigen Niederschlagshöhen N_i und Infiltrationskoeffizienten α_i :

$$\bar{c}_{in} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i N_i c_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i N_i} \quad (A1)$$

Es wird angenommen, dass die mittlere Isotopenkonzentration des Inputs gleich der mittleren Isotopenkonzentration im Output ist.

$$\bar{c}_{out} = \bar{c}_{in} \quad (A2)$$

Bei zeitlich äquidistanten Messungen errechnet sich die mittlere Outputkonzentration als

$$\bar{c}_{out} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i}{n} \quad (A3)$$

Durch Umstellen von Formel A1 und Einsetzen von Formel A2 erhält man

$$\bar{c}_{out} \sum_{i=1}^n \alpha_i N_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i N_i c_i \quad (A4)$$

Die Summen können jahreszeitlich aufgelöst und die monatlichen Infiltrationskoeffizienten durch die jahreszeitlichen ersetzt und aufgrund ihrer Konstanz vor das Summenzeichen gesetzt werden:

$$\bar{c}_{out} \left(\alpha_s \sum_s N_i \right) + \alpha_w \left(\sum_w N_i \right) = \alpha_s \left(\sum_s N_i c_i \right) + \alpha_w \left(\sum_w N_i c_i \right) \quad (A5)$$

Im nächsten Schritt werden die saisonalen Infiltrationskoeffizienten faktorisiert.

$$\alpha_s \left(\bar{c}_{out} + \sum_s N_i - \sum_s N_i c_i \right) = \alpha_w \left(\sum_w N_i c_i - \bar{c}_{out} \sum_w N_i \right) \quad (A6)$$

Im letzten Schritt findet die Umformung entsprechend der Definition des Infiltrationsparameters,

$$\alpha = \frac{\alpha_s}{\alpha_w} \quad (A7)$$

statt, und man erhält die gesuchte Gleichung

$$\alpha = \frac{\alpha_s}{\alpha_w} = \frac{\sum_w N_i c_i - \bar{c}_{out} \sum_w N_i}{\bar{c}_{out} \sum_s N_i - \sum_s N_i c_i} \quad (A8)$$

mit	α	Infiltrationsparameter
	α_w	Infiltrationskoeffizient für das Winterhalbjahr (November bis April)
	α_s	Infiltrationskoeffizient für das Sommerhalbjahr (Mai bis Oktober)
	N_i	Niederschlagsmenge im betrachteten Zeitintervall i
c_i		Inputkonzentration in der Niederschlags-Probe des Zeitintervalls i
	$\bar{c}_{out}$	Outputkonzentration, gemittelt über den gesamten Messzeitraum

Die Indizes s bzw. w unter den Summenzeichen bezeichnen die Aufsummierung über die Sommer- bzw. die Wintermonate.

Ehrenwörtliche Erklärung

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

Freiburg, 11. Dezember 2002

Falk Scissek