

FREIBURGER SCHRIFTEN ZUR HYDROLOGIE

Band 3

Bernd Bucher

**Optimierung von Grundwasser-
Meßnetzen mit Kriging - Verfahren**

63 Abbildungen, 6 Tabellen

1994

Professur für Hydrologie an der Universität Freiburg i. Br.

Freiburger Schriften zur Hydrologie

Herausgegeben von / Edited by:

Prof. Dr. Ch. Leibundgut
Dr. habil. S. Demuth
Professur für Hydrologie, Universität Freiburg i.Br.

Schriftleitung / Editorial office:

Ingeborg Vonderstraß

© Copyright: Professur für Hydrologie, Universität Freiburg i. Br., 1993

Verlag und Vertrieb / Published and saled by:

Professur für Hydrologie
Universität Freiburg i. Br.
im Selbstverlag
Anschrift: Werderring 4, D-79098 Freiburg

ISSN 0945-1609

Unterstützt durch / Supported by:

Förderverein Hydrologie an der Albert-Ludwigs-Universität
Freiburg i. Br.

Bernd Bucher

**Optimierung von Grundwasser - Meßnetzen
mit Kriging - Verfahren**

Vorwort

In der vorliegenden Arbeit widmet sich der Verfasser dem Forschungsschwerpunkt "Regionalisierung" und setzt damit die an der Professur für Hydrologie bestehende Tradition auf diesem Gebiet fort. Während in den vergangenen Jahren sonst hauptsächlich Themen zur Regionalisierung von Niedrigwasser behandelt wurden, beschäftigt sich diese Untersuchung mit der Problematik Grundwasser.

Die Analyse und Optimierung von Meßnetzen mit modernen geostatistischen Methoden wird hier am Beispiel eines Grundwassermessnetzes erarbeitet. Herr Dr. Bucher leistet mit seiner Studie, die er im Rahmen einer Dissertation erarbeitet hat, einen wesentlichen Beitrag zur Methoden-Entwicklung des Kriging-Verfahrens. Dieses Verfahren hat gegenüber traditionellen geostatistischen Ansätzen den Vorteil, Aussagen zu treffen, wie sich Veränderungen am Meßnetz auf die Genauigkeit der räumlichen Schätzung auswirken. Der Anstoß für die Bearbeitung des Themas kam, wie dies in der Hydrologie häufig der Fall ist, aus der hydrologischen Praxis.

Wir danken dem Autor für seine konstruktive Zusammenarbeit während der Erarbeitung und Drucklegung der Arbeit und dem "Förderverein Hydrologie" für die finanzielle Unterstützung.

Christian Leibundgut Siegfried Demuth
Herausgeber

Inhalt

1	Einleitung	4
1.1	Problemstellung und Zielsetzung	4
1.2	Charakterisierung von Grundwassermeßnetzen	4
1.3	Die Qualität eines Grundwassermeßnetzes	5
2	Die Analyse und Optimierung hydrologischer Meßnetze	7
2.1	Notwendigkeit, Ziele	7
2.2	Probleme	9
2.3	Methoden	12
2.3.1	Korrelationsanalyse	13
2.3.2	Kalman-Filter	13
2.3.3	Kriging	14
3	Das Kriging-Verfahren	16
3.1	Einführung	16
3.2	Einfaches Kriging	18
3.2.1	Das Semivariogramm und der Nuggeteffekt	18
3.2.2	Das Kriging-Gleichungssystem	22
3.2.3	Die Kreuzprüfung	25
3.3	Universal Kriging	26
3.4	Kriging mit generalisierten Kovarianzen	31
3.5	Multivariate Verfahren	34
3.5.1	Einleitung	34
3.5.2	Cokriging	34
3.5.3	Weitere Verfahren	36
3.6	Kriging in Kombination mit deterministischen Verfahren	36
3.6.1	Allgemeine Vorgehensweise	36
3.6.2	Grundwassermodellierung	39
3.7	EDV-Realisation	41

4	Das Untersuchungsgebiet "Obere Schwalm"	43
	4.1 Gebietsbeschreibung	43
	4.2 Das Grundwassernetz	46
	4.2.1 Grundwasserstand	46
	4.2.2 Grundwasserbeschaffenheit	48
5	Analyse des Grundwasserstands-Meßnetzes	51
	5.1 Universal Kriging	51
	5.2 Kriging mit generalisierten Kovarianzen	58
	5.3 Cokriging unter Einbeziehung der Geländehöhe	58
	5.4 Kriging in Kombination mit einem Grundwassermodell	64
	5.4.1 Modellaufbau, Daten, Simulation	64
	5.4.2 Kriging mit den Residuen	68
	5.5 Ansätze zur Optimierung des Meßnetzes	71
	5.5.1 Beziehung zwischen Meßnetzdichte und Standardschätzfehler	71
	5.5.2 Ein Optimierungsbeispiel	74
6	Analyse des Meßnetzes zur Beobachtung der Grundwasserbeschaffenheit	79
	6.1 Einfaches Kriging	79
	6.1.1 Semivariogramm und Kreuzprüfung	79
	6.1.2 Interpolation	86
	6.2 Cokriging	92
	6.3 Ansätze zur Optimierung des Meßnetzes	94
	6.3.1 Beziehung zwischen Meßnetzdichte und Standardschätzfehler	94
	6.3.2 Möglichkeiten der Optimierung	96
7	Diskussion und Schlußfolgerungen	100
	7.1 Vergleichende Bewertung der Kriging-Verfahren	100
	7.2 Eignung des Kriging-Verfahrens zur Analyse von Meßnetzen	102
	7.3 Eignung des Kriging-Verfahrens zur Optimierung von Meßnetzen	104

8	Zusammenfassung	106
9	Extended Summary	108
	Literatur	110

1 Einleitung

1.1 Problemstellung und Zielsetzung

In vielen Ländern wird zur Versorgung der Bevölkerung mit Trink- und mit Brauchwasser in erster Linie Grundwasser herangezogen. In den vergangenen Jahrzehnten wurde diese Ressource vielerorts in quantitativer und qualitativer Hinsicht sehr beansprucht. Wasserwirtschaftliche und ökologische Probleme, z.B. durch zu starke Grundwasserabsenkungen oder durch Grundwasserverunreinigungen, sind keine Seltenheit. Sie machen darauf aufmerksam, daß Grundwasser mit großer Sorgfalt bewirtschaftet und geschützt werden muß.

Dies ist allerdings nur möglich, wenn ausreichende Informationen zum Grundwasserhaushalt und zur Grundwasserbeschaffenheit im Gebiet vorliegen. Durch punktuelle Messungen des Grundwasserstandes und der Wasserbeschaffenheit an Grundwassermeßstellen werden diese notwendigen Informationen gesammelt. Meßstellen, die mit der gleichen Zielsetzung in einem Gebiet betrieben werden, bilden in ihrer Gesamtheit ein Meßnetz.

Für viele Fragestellungen reicht es jedoch nicht aus, nur punktuelle Daten zu erheben. Häufig wird die Verteilung der Meßgröße im Raum benötigt, so daß Schätzverfahren eingesetzt werden müssen. Die Genauigkeit der jeweiligen Schätzung ist in hohem Maße abhängig von der Qualität und dem Umfang der Punktmessungen.

Beim Aufbau und beim Betreiben eines Meßnetzes stellt sich daher sehr häufig die Frage, in welcher räumlichen Dichte und an welchen Standorten Meßstellen am zweckmäßigsten einzurichten sind. In der Praxis werden die Meßpunkte in der Regel mehr oder weniger "nach Gefühl" und nach den örtlichen Gegebenheiten festgelegt. Offen bleibt dabei, in welchem Ausmaß sich dadurch jeweils die Zuverlässigkeit der räumlichen Schätzung verändert.

Bislang wurden nur wenige Untersuchungen zur Analyse und Optimierung von Grundwassermeßnetzen durchgeführt. Dies gilt vor allem auch für Meßnetze zur Beobachtung der Grundwasserbeschaffenheit.

Das Ziel dieser Arbeit ist demnach, Verfahren zur Analyse der Meßnetzqualität anzuwenden und deren Eignung zu prüfen. Dabei werden sowohl rein statistische Ansätze als auch Verfahren, die die physikalischen Kenntnisse über die Grundwasserströmung miteinbeziehen, eingesetzt. Darauf aufbauend werden Möglichkeiten und Grenzen der Optimierung von Grundwassermeßnetzen aufgezeigt.

1.2 Charakterisierung von Grundwassermeßnetzen

Zur Erfassung der Grundwassersituation in einem Untersuchungsgebiet müssen Messungen durchgeführt werden. Damit sollen die für viele Fragestellungen bedeutsamen Größen wie Grundwasserstand, Flurabstand, Fließrichtung und Fließgeschwindigkeit des Grundwassers,

Lage der Wasserscheiden und Grundwasserbilanzen ermittelt werden. Alle quantitativen Größen lassen sich von Grundwasserstandsmessungen ableiten, sofern zusätzliche Informationen über die geologischen und hydrologischen Gegebenheiten vorhanden sind.

Da eine direkte Beobachtung des Grundwasserstandes nicht möglich ist, werden in Bohrlöcher Filterrohre eingebracht und darin die Höhe des Grundwasserstandes gemessen. In einer korrekt eingerichteten Meßstelle entspricht die Standrohrspiegelhöhe in der Meßstelle der piezometrischen Höhe im Aquifer am Meßfilter. Das Messen dieser Höhe mit einer Brunnenpfeife oder einem Lichtlot ist einfach und - verglichen mit vielen anderen hydrologischen Messungen - recht genau.

Aufgrund der zunehmenden Belastung des Grundwassers mit Schadstoffen hat das Interesse an der Grundwasserqualität in den letzten Jahren stark zugenommen. Deshalb wurden in jüngster Zeit verstärkt Meßnetze zur Überwachung der Grundwasserbeschaffenheit eingerichtet.

Informationen über den physikalischen, chemischen und biologischen Zustand des Grundwassers erhält man durch die Analyse von Wasserproben vor Ort oder im Labor, die an Grundwassermeßstellen, Entnahmebrunnen oder Quellen entnommen werden. Es ist daher möglich, beim Aufbau eines Meßnetzes zur Erfassung der Grundwasserbeschaffenheit teilweise auf das Netz zur Grundwasserstandsmessung zurückzugreifen. Allerdings sind Messungen der Grundwasserbeschaffenheit wesentlich schwieriger und teurer. Der Ausbau der Meßstellen muß zusätzlichen Anforderungen genügen (z.B. Innendurchmesser, Material) und die Probenahme ist oft langwierig und fehleranfällig (s. DEUTSCHER VERBAND FÜR WASSERWIRTSCHAFT UND KULTURBAU 1982, SCHENK 1983, TOUSSAINT 1987).

1.3 Die Qualität eines Grundwassermeßnetzes

Wie bereits beschrieben wurde, können Grundwasserdaten bislang nur punktuell erhoben werden. Zur Bearbeitung der meisten Fragestellungen werden allerdings nicht nur der einzelne, punktbezogene Meßwert, sondern auch die räumliche Verteilung und häufig auch der zeitliche Verlauf der Meßgröße benötigt.

Es ist einleuchtend, daß die notwendigen Schätzungen im Raum und in der Zeit umso besser gelingen, je mehr Informationen zur Verfügung stehen. Es besteht eine positive Korrelation zwischen der Zuverlässigkeit der Schätzung und dem ihr zugrunde liegenden Informationsgehalt. Jedoch wird nicht nur die Qualität und der Umfang der Messungen, sondern auch das Schätzverfahren selbst die Genauigkeit der Schätzung bestimmen.

In dieser Arbeit wird die Interpolation in der Zeit nicht bearbeitet. Typische hydrologische Meßnetze liefern nämlich meist Datensätze mit recht langen Zeitreihen an wenigen Orten, so daß die Information in der Zeit häufig umfangreicher ist als im Raum. Hinzu kommt, daß im Grundwasserbereich die zeitliche Interpolation in der Regel einfacher durchzuführen ist als die Schätzung im Raum. Demzufolge wird die Qualität eines Grundwassermeßnetzes hier durch die Genauigkeit definiert, mit der das räumliche Verhalten der Meßgröße im Untersuchungsgebiet erfaßt werden kann.

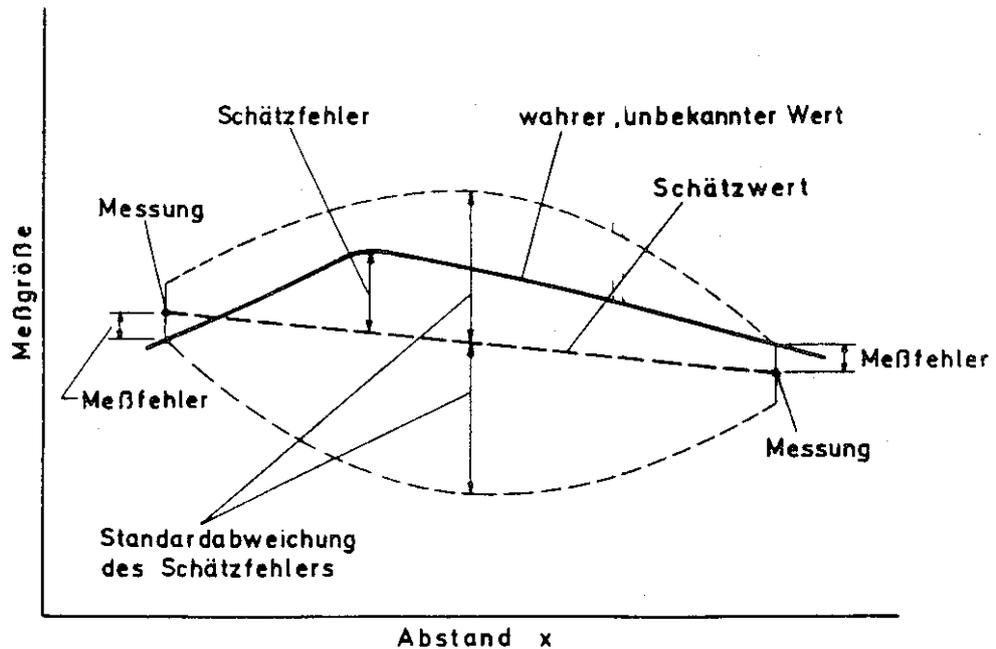


Abb.1.1 Schematische Darstellung des Meßfehlers, des Schätzfehlers und der Standardabweichung des Schätzfehlers

Üblicherweise wird die Standardabweichung des Schätzfehlers als Maß für die Qualität eines Meßnetzes herangezogen (WMO 1981). In der Abbildung 1.1 ist der Meßfehler, der Schätzfehler (Interpolationsfehler) und die Standardabweichung des Schätzfehlers schematisch dargestellt. An den Meßpunkten verhindert nur der Meßfehler, daß der wahre Wert bekannt wird. Mit zunehmender Entfernung von der Meßstelle wird der Schätzwert immer unsicherer, da der Interpolationsfehler hinzukommt. Die Standardabweichung des Schätzfehlers (Standardschätzfehler) stellt eine Art Hüllkurve dar, innerhalb der sich der wahre (unbekannte) Schätzfehler mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit befindet (Kap. 3.2.2). In der Mitte zwischen zwei Meßpunkten ist die Unsicherheit am größten.

Zur Bestimmung der Qualität von Meßnetzen wird eine Methode benötigt, mit der der Schätzwert und dessen Genauigkeit an beliebigen Stellen im Untersuchungsgebiet berechnet werden kann. In dem folgenden Kapitel werden mögliche Verfahren vorgestellt und diskutiert. Die ausgewählten Kriging-Verfahren werden daraufhin detailliert beschrieben (Kap. 3) und anschließend beispielhaft zur Analyse und Optimierung existierender Meßnetze eingesetzt.

2 Die Analyse und Optimierung von Meßnetzen

2.1 Notwendigkeit und Ziele

Meßnetze sind organisierte Systeme zum Sammeln spezifischer Informationen (LANGBEIN 1965). Hydrologische Informationen werden benötigt, um anstehende und zukünftige wasserwirtschaftliche Fragestellungen beantworten zu können. Der Aufbau und die Betriebsweise des Meßnetzes bestimmen ganz entscheidend den Umfang und die Qualität der gesammelten Informationen.

Es ist daher erstaunlich, daß auch heute noch nur in Ausnahmefällen hydrologische Meßnetze mit wissenschaftlichen Methoden geplant, aufgebaut und betrieben werden. Häufig sind bestehende Meßnetze das mehr oder weniger zufällige Ergebnis einer Reihe von Ad-hoc-Antworten auf Fragen, die in der Vergangenheit beantwortet werden mußten (RODDA 1969). Dies ist zu bedauern, da falsch dimensionierte Meßnetze weitreichende Folgen haben können.

Unzureichende Meßnetze können beispielsweise dazu führen, daß

- Planungen von wasserwirtschaftlichen Maßnahmen erschwert und verzögert werden,
- Veränderungen im Wasser- und Naturhaushalt nicht rechtzeitig erkannt und quantifiziert werden,
- der Erfolg bzw. Mißerfolg von durchgeführten Maßnahmen nicht zuverlässig erfaßt und beurteilt werden kann.

Diese Beispiele machen deutlich, daß durch unzureichende hydrologische Messungen durchaus beträchtliche wirtschaftliche und ökologische Verluste entstehen können.

Andererseits haben auch zu aufwendige, zu dichte Meßnetze negative Auswirkungen:

- Die Kosten für den Betrieb des Meßnetzes sind so hoch, daß andere wichtige Aufgaben nicht oder nicht im notwendigen Umfang durchgeführt werden können.
- Ein "Datenwust" sammelt sich an, der den Überblick erschwert sowie den Datenzugriff und die Auswertung verlangsamt.
- Die Datenkontrolle und weitergehende Datenauswertung kommt zu kurz, da zuviel Energie und Geld für den Ausbau und die Unterhaltung des Meßnetzes eingesetzt wird.

Die häufig anzutreffende Aussage, "je mehr Daten desto besser", läßt sich also bei näherer Betrachtung nicht aufrechterhalten. Vielmehr sollte das Ziel darin bestehen, ein Meßnetz so zu strukturieren, daß es mit möglichst geringem Aufwand die notwendigen hydrologischen Informationen liefert.

Die Höhe des Schätzfehlers wird zum einen von dem Ausmaß der räumlichen und zeitlichen Schwankungen der hydrologischen Variablen im Untersuchungsgebiet bestimmt. Der Schätzfehler wächst in der Regel mit zunehmender Variabilität der Meßgröße. Zum anderen ist die Höhe des Schätzfehlers abhängig von

- der Genauigkeit der (Punkt-) Messungen (Meßfehler),
- der Anzahl und Verteilung der Meßstellen (räumlicher Aspekt),
- der Häufigkeit und Dauer der Messungen (zeitlicher Aspekt),
- dem verwendeten Schätzverfahren (räumliche und zeitliche Interpolation).

Ein genaueres Meßverfahren, zusätzliche oder besser verteilte Meßstellen sowie häufigere Messungen verkleinern den Schätzfehler. Auch aufwendige und ausgeklügelte Methoden zur räumlichen und zeitlichen Interpolation der Punktmessungen können unter Umständen zu einer Verringerung der Schätzfehler beitragen.

Mit der Durchführung solcher Maßnahmen sind in der Regel zusätzliche Kosten verbunden. Dabei ist zu beachten, daß die Beziehung zwischen Schätzfehler und Kostenaufwand nicht linear ist. Je kleiner der Schätzfehler bereits ist, desto höher sind die Kosten ihn nennenswert zu verringern (s. Abb. 2.1). Der Grund dafür ist, daß die Redundanz in den Meßdaten anwächst. Die räumliche und zeitliche Erhaltungsneigung vieler hydrologischer Größen bewirkt, daß mit zunehmender Meßdichte der Informationsgewinn durch zusätzliche Meßstellen bzw. Messungen abnimmt.

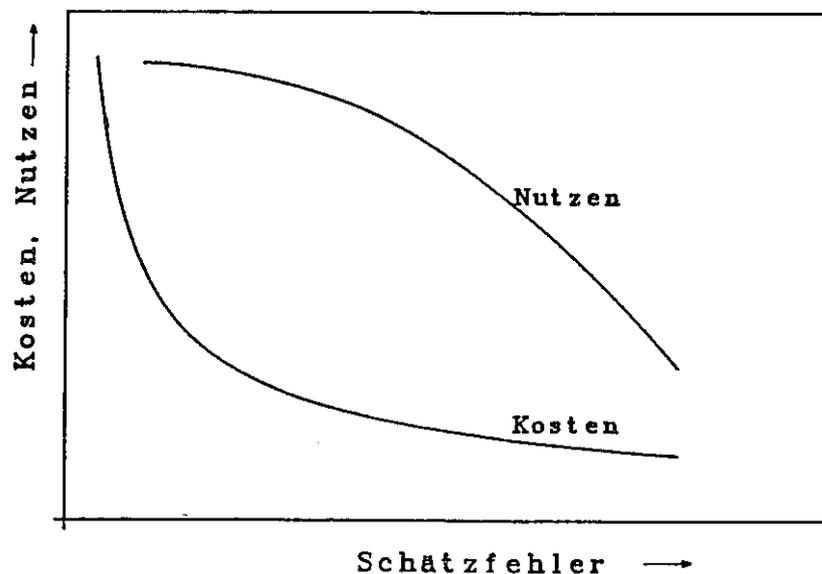


Abb. 2.1 Beziehung zwischen Schätzfehler, Kosten und Nutzen (schematisch)

Andererseits nimmt der Nutzen von Meßnetzen durch eine Reduzierung der Schätzfehler zu. Beispielsweise werden dann detaillierte Auswertungen und Studien möglich, die die Planung und den Entscheidungsprozess erleichtern. Das Risiko von Fehleinschätzungen und Fehlentscheidungen wird durch eine Verbesserung der Datengrundlage geringer. Zum Beispiel kann die Dimensionierung von Bauwerken wie Brunnen, Hochwasserrückhaltebecken, Stauhaltungen etc. präziser durchgeführt werden, so daß kostspielige Sicherheitsaufschläge vermieden werden können. Auch die Folgen solcher Maßnahmen auf den Wasserhaushalt können beim Vorliegen von geeignetem Datenmaterial besser und zuverlässiger im voraus geklärt werden.

Der Zuwachs an Nutzen wird jedoch in der Regel umso geringer sein, je kleiner der Schätzfehler bereits ist. Denn mit zunehmender Datenfülle wird die Wahrscheinlichkeit größer, daß auch mit noch so umfangreichen und detaillierten Auswertungen die Zuverlässigkeit der Aussagen nicht mehr gesteigert werden kann. Es kann auch vorkommen, daß ein Teil der gesammelten Daten anschließend nicht verwendet wird, da er für die Bearbeitung der anstehenden Aufgaben nicht benötigt wird. Informationen, die nicht verwendet werden, sind ohne Wert und deshalb - für die aktuelle Fragestellung - nutzlos.

Es sind sogar Fälle beschrieben worden (MOSS 1979), bei denen zusätzliche Daten das Planungsergebnis verschlechtert haben. Dies kann dann auftreten, wenn Verfahren, die anhand einer schwachen Datenbasis entwickelt wurden, zur Auswertung von umfangreichem Datenmaterial eingesetzt werden.

Die Abb. 2.1 macht deutlich, daß es einen Schätzfehlerbereich gibt, bei dem mit relativ geringen Kosten ein hoher Nutzen erreicht werden kann. Ein Meßnetz, das sich in diesem Bereich befindet, ist als optimal anzusehen, da mit ihm die notwendigen Informationen auf effektive Weise beschafft werden können. Ein Ausbau des Meßnetzes wäre unzweckmäßig, da ein überproportionaler Anstieg der Kosten die Folge wäre. Umgekehrt würde eine Reduzierung des Meßnetzes den Nutzen erheblich verringern. Bei der Planung und dem Betrieb hydrologischer Meßnetze sollte daher das Ziel verfolgt werden, diesen optimalen Bereich zu erreichen.

2.2 Probleme

Die Optimierung eines Meßnetzes ist theoretisch dann möglich, wenn

- der Verwendungszweck der Meßdaten,
- der Schätzfehler des Meßnetzes,
- der Nutzen und dessen Beziehung zum Schätzfehler,
- der finanzielle Aufwand für das Meßnetz

bekannt sind. In der Realität sind diese Voraussetzungen in der Regel nicht gegeben. Die Gründe dafür sind:

- (1) Hydrologische Meßnetze werden normalerweise nicht nur für einen Anwendungszweck eingerichtet. Da die Beziehung zwischen Nutzen und Schätzfehler für jede

Anwendung unterschiedlich ist, können solche Meßnetze nicht für alle Zwecke optimal sein.

- (2) In vielen Fällen sind Meßreihen von mehreren Jahren und Jahrzehnten notwendig, bevor aussagekräftige Untersuchungen durchgeführt werden können. Dadurch ist man gezwungen, vorsorglich bereits heute Messungen vorzunehmen, ohne daß die zukünftigen Fragestellungen genau definiert werden können. Zum Zeitpunkt der Installation des Meßnetzes sind die zukünftigen Anwendungen nicht alle bekannt.
- (3) Bei vielen Anwendungen ist es schwierig oder gar unmöglich, den Nutzen der Daten zu quantifizieren. Dies gilt insbesondere dann, wenn ökologische Aspekte eine Rolle spielen.
- (4) Da die Meßgröße zwischen zwei Punktmessungen - im Raum und in der Zeit - immer unbekannt ist, kann der konkrete Schätzfehler nicht bestimmt werden (vgl. Abb. 1.1). Mit geeigneten Methoden ist es jedoch unter bestimmten Annahmen möglich, das Intervall des Schätzfehlers zu berechnen. In diesem Intervall befindet sich der tatsächliche Schätzfehler mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit. Die Methoden sind allerdings erst dann einsetzbar, wenn bereits Messungen in ausreichendem Umfang vorliegen (s. Kap. 3). Ein optimales Meßnetz kann somit nicht von Beginn an geplant und eingerichtet werden.
- (5) Die Höhe der Kosten und des Nutzens sind zeitabhängig. Während die Gesamtkosten mit dem Aufbau des Meßnetzes kontinuierlich anwachsen, tritt der Nutzen erst später ein. Dadurch ist es schwierig, Kosten und Nutzen bereits bei der Installation des Meßnetzes abzuwägen.
- (6) Zur Bestimmung der flächenhaften Verbreitung oder des zeitlichen Verlaufs hydrologischer Größen werden verschiedene Schätzalgorithmen eingesetzt. Dies können simple Interpolationsverfahren, aber auch komplexe deterministische Simulationsmodelle sein. Ein fortgeschrittenes, hochentwickeltes Verfahren kann unter Umständen mit wenigen Meßdaten zu den gleich großen Schätzfehler führen, wie einfache Verfahren mit vielen Messungen. Doch auch das Gegenteil kann eintreten: Ein Verfahren mit einer Vielzahl von Parametern braucht möglicherweise mehr Daten um die gleiche Genauigkeit zu erreichen, wie ein einfaches Verfahren. Das bedeutet, daß mehrere gleichwertige Kombinationen von Meßdaten und Schätzverfahren existieren können.

Das sind die wesentlichen Gründe, warum ein wirklich optimales Meßnetz nicht zu planen und zu betreiben ist (s. a. RODRIGUEZ-ITURBE, MEJIA 1974, MOSS 1982). Da der komplexe Zusammenhang zwischen Schätzfehler, Nutzen und Kosten nicht genau zu erfassen ist, kann das Optimum nicht eindeutig festgelegt werden.

Um dennoch für praktische Anwendungen die Effizienz eines Meßnetzes zumindest annähernd beurteilen und - falls notwendig - verbessern zu können, muß der Optimierungsvorgang vereinfacht werden. Dies geschieht dadurch, daß anstatt des schwierig zu quantifizierenden Nutzens ein Grenzwert der Standardabweichung des Schätzfehlers als Zielgröße eingeführt wird, der nicht überschritten werden sollte. Dieser Grenzwert kann für jede Region, für jedes Teilgebiet anhand von allgemeinen hydrologischen und wasserwirtschaftlichen Überlegungen festgelegt werden. Dabei können Kriterien, wie z.B. die wasserwirtschaftliche Bedeutung des Raumes,

seine Nutzungsintensität oder seine Sensitivität gegenüber Veränderungen, herangezogen werden (BRACHT, ROMIJN 1985).

Daran anschließend muß die Meßnetzkonfiguration gefunden werden, die mit dem geringsten Aufwand (Kosten) den gewählten Grenzwert einhält. Ebenso kann man von den zur Verfügung stehenden finanziellen Mitteln ausgehen und dann das Meßnetz so einrichten, daß die Standardabweichung des Schätzfehlers minimal wird.

In jedem Fall wird dazu ein im statistischen Sinne optimales Schätzverfahren benötigt. Das heißt, daß es in der Lage sein sollte, Schätzungen im Raum oder in der Zeit so durchzuführen, daß der Schätzfehler im Mittel so gering wie möglich ist. Darüberhinaus muß mit dem Verfahren die Zuverlässigkeit der Schätzung für jeden Schätzpunkt quantifiziert werden können. In Kap. 2.3 werden die zur Verfügung stehenden Verfahren vorgestellt und diskutiert.

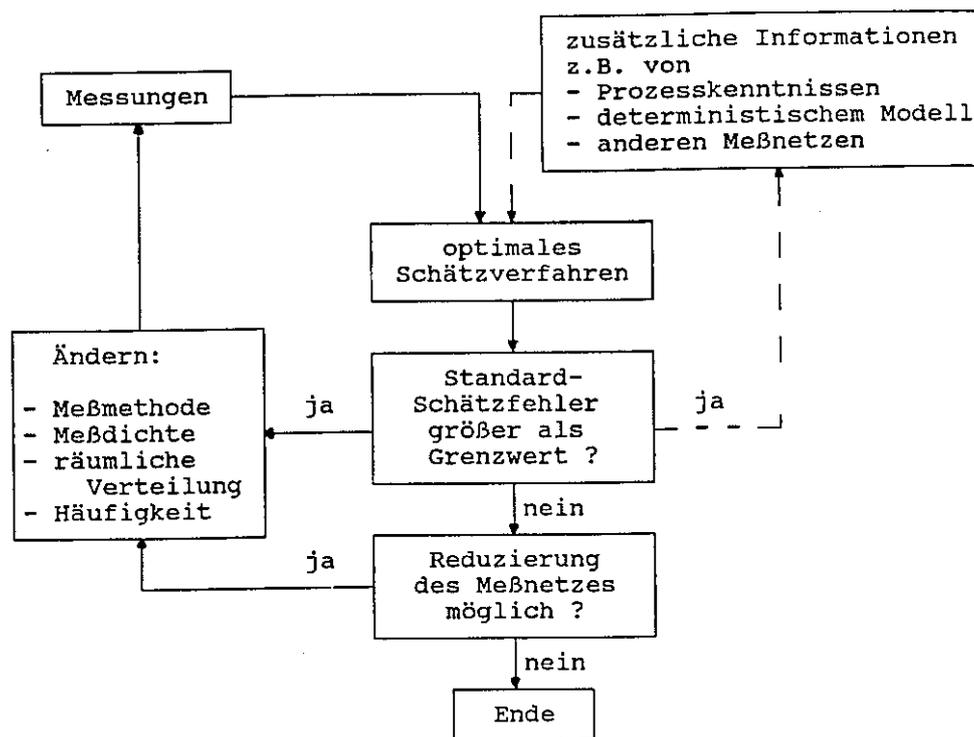


Abb. 2.2 Schematische Darstellung der Meßnetzoptimierung

In der Abbildung 2.2 wird dieser vereinfachte Optimierungsvorgang veranschaulicht. Mit einem Schätzverfahren wird das bestehende Meßnetz analysiert, d.h. die Standardabweichung des

Schätzfehler wird im Untersuchungsgebiet räumlich differenziert berechnet. Ist sie geringer als der vorgegebene Grenzwert, kann der Aufwand zum Betreiben des Meßnetzes dadurch reduziert werden, daß die Anzahl der Meßstellen oder die Häufigkeit der Messungen reduziert wird. Ist sie größer als der gewünschte Grenzwert, werden zusätzliche oder besser positionierte Messungen im Raum oder in der Zeit benötigt.

Eine Reduzierung der Schätzfehler kann jedoch nicht allein durch einen erhöhten Meßaufwand erreicht werden (s. Abb. 2.2). Durch das Einbeziehen zusätzlicher Informationen, z.B. von Kenntnissen über hydrologische Prozesse oder Daten aus anderen Meßnetzen, kann die Genauigkeit der Schätzung ebenfalls erhöht werden (siehe Kap. 3.5 und 3.6).

Es bleibt festzuhalten, daß auf diese Weise eine Optimierung von Meßnetzen nur eingeschränkt möglich ist. Doch allein schon die Analyse von Meßnetzen kann von großem Nutzen sein. Beim Einsatz von deterministischen Modellen können dann beispielsweise die Eingabedaten innerhalb des Vertrauensintervalls der Schätzung variiert werden, so daß die Zuverlässigkeit des Modellprognosen bestimmt werden kann. Auf der anderen Seite kann die Kenntnis der räumlichen Verteilung der Unsicherheit in den Meßdaten die Modelleichung erleichtern und verbessern (DELHOMME 1978).

2.3 Methoden

Zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen wird eine Methode benötigt, die optimal zwischen den Meßwerten im Raum und/oder in der Zeit interpoliert. Noch wichtiger ist, daß mit ihr nicht nur der Schätzwert, sondern auch die Unsicherheit der Schätzung für jeden Schätzpunkt bestimmt werden kann.

Deterministische Verfahren, mit denen die physikalischen Prozesse in hydrologischen Systemen simuliert werden, können zur räumlichen und zeitlichen Interpolation hydrologischer Größen eingesetzt werden. So lassen sich mit Niederschlag-Abfluß-Modellen bzw. Flußgebietsmodellen einige Komponenten des Wasserkreislaufs in ihrer räumlichen und zeitlichen Verteilung berechnen (siehe z.B. OSTROWSKI 1982, VOGELBACHER 1985). Im Grundwasserbereich können deterministische Grundwasserströmungsmodelle zur Simulation des räumlichen und zeitlichen Verhaltens der Grundwasserpotentiale eingesetzt werden (s. Kap. 3.6.2).

Deterministische Modelle haben sich in manchen Teildisziplinen der Hydrologie mittlerweile sehr bewährt. Sie haben allerdings den Nachteil, daß mit ihnen die Genauigkeit der Berechnungen nicht bestimmt werden kann. Hinzu kommt, daß für manche hydrologischen Prozesse, z.B. die Niederschlagsbildung, noch keine geeigneten deterministischen Ansätze vorhanden bzw. möglich sind.

Mit der stochastischen Beschreibung hydrologischer Prozesse kann der Einfluß der Datengrundlage auf die Zuverlässigkeit der Berechnungsergebnisse erfaßt werden. Dadurch sind stochastische Ansätze prinzipiell zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen geeignet. Dies soll allerdings nicht bedeuten, daß keine deterministischen Komponenten mit verwendet werden könnten. Im Gegenteil, der kombinierte deterministisch-stochastische Ansatz kann unter Umständen das Ergebnis deutlich verbessern (s. Kap. 3.6).

Von den stochastischen Verfahren können im wesentlichen drei zur Meßnetzanalyse eingesetzt werden (GEER 1987):

- (1) Die Korrelationsanalyse
- (2) Das Kalman-Filter
- (3) Das Kriging-Verfahren

Im folgenden werden diese Methoden und ihre Einsatzmöglichkeiten kurz vorgestellt.

2.3.1 Korrelationsanalyse

Die Korrelationsanalyse dient allgemein dazu, den statistischen Zusammenhang zwischen zwei Variablen zu quantifizieren. Bei der Analyse von Meßnetzen kann sie dazu verwendet werden, die Beziehung in den Meßdaten von benachbarten Stationen zu quantifizieren. Hohe Korrelationskoeffizienten weisen auf einen sehr ähnlichen Gang in den Meßreihen und damit auf einen hohen Anteil redundanter Informationen hin. Umgekehrt sollten in Bereichen, wo der Korrelationskoeffizient zwischen benachbarten Stationen klein wird, zusätzliche Meßstellen errichtet werden.

Dieses klassische statistische Verfahren gehört zu den ersten, die zur Analyse von Meßnetzen eingesetzt wurden (siehe RODDA 1969). HERSHFIELD (1965) führte mit dieser Methode beispielsweise Untersuchungen über Niederschlagsmeßnetze durch und wählte einen Schwellenwert von $r=0.9$, der zwischen den benachbarten Stationen im Untersuchungsgebiet nicht unterschritten werden sollte. Andere, z.B. KAGAN (1966), HUTCHINSON (1970), haben den Korrelationskoeffizienten zwischen allen Meßstationen im Bearbeitungsgebiet berechnet und gezeigt, daß er mit zunehmender Entfernung der Stationen abnimmt. Auf dieser Grundlage können dann für das jeweilige Gebiet Mindestabstände zwischen Meßstationen abgeleitet werden.

Die Korrelationsanalyse wurde bislang vorwiegend zur Analyse von Niederschlagsmeßnetzen eingesetzt. Seine Anwendung ist begrenzt auf Variable, die normalverteilt sind oder die in eine Normalverteilung transformiert werden können. Nachteilig ist, daß für die Anwendung dieses Verfahrens möglichst lange, homogene Meßreihen vorliegen müssen, damit aussagekräftige Korrelationskoeffizienten berechnet werden können. Es kommt hinzu, daß es zur räumlichen Interpolation und zur Berechnung des Standardschätzfehlers nicht eingesetzt werden kann.

2.3.2 Kalman-Filter

Das Kalman-Filter ist ein systemtheoretisches, lineares Schätzverfahren, das Anfang der sechziger Jahre entwickelt wurde. In der zweiten Hälfte der siebziger Jahre wurden erstmals die Anwendungsmöglichkeiten in der Hydrologie untersucht (CHIU 1978).

Das Kalman-Filter besteht aus einem Algorithmus, mit dem die Zustände komplexer Systeme aus Meßdaten optimal geschätzt werden können. Dabei werden sowohl Fehler in den Messungen als auch Fehler in den Modellrechnungen bei der Zustandsschätzung quantitativ berücksichtigt. Das Filter kann zur räumlichen und zeitlichen Interpolation sowie zur Kurzzeitvorhersage

eingesetzt werden. Der Schwerpunkt der Anwendung liegt bisher auf der on-line Hochwasserprognose (siehe z.B GUTKNECHT 1977, KITANIDIS, BRAS 1980).

In der Systemtheorie wird ein System als ein abgegrenzter Teil der Natur betrachtet, in dem physikalische Prozesse ablaufen. Durch Einflußgrößen (Input) aus der Systemumgebung wird der Zustand des Systems verändert. Über eine Übertragungsfunktion, die die physikalischen Prozesse nachbildet, liefert das System einen Output, der sich auf die Umgebung auswirkt.

Übertragen z.B auf den Bereich der Grundwasserströmung ist das System ein definierter, abgegrenzter Teil des Aquifers, der durch unabhängige Eingangsgrößen, wie Grundwasserneubildung, Grundwasserentnahmen, Randströme etc. in seinem Zustand beeinflusst wird. Den geohydrologischen Gegebenheiten entsprechend, resultiert daraus eine Veränderung in den Piezometerhöhen, den Fließgeschwindigkeiten und dem Wasservolumen im System und dessen Umgebung.

Während mit deterministischen Modellen die Eingangs- und Ausgangsgrößen direkt miteinander verknüpft werden, wird beim Kalman-Filter dieser Zusammenhang über die zeitliche Abfolge des Systemzustandes formal beschrieben (SCHILLING 1987). Stochastische Elemente im System, die aus Modellunsicherheiten und Meßfehlern resultieren, werden miteinbezogen. Ausgehend vom Anfangszustand bei Prozessbeginn, führt die Anwendung des Kalman-Filter-Algorithmus für jeden Zeitschritt zur bestmöglichen Schätzung des Systemzustandes, z.B der Grundwasserstände im Untersuchungsgebiet. Darüberhinaus liefert diese Methode die Standardabweichung des Schätzfehlers für jeden Ort und jeden Zeitschritt.

Zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen ist damit dieses Verfahren, zumindest vom theoretischen Ansatz her, bestens geeignet. Vor der Anwendung müssen jedoch die Übertragungsmatrizen in der Prozeßgleichung, die Varianzen der Meßfehler und der Modellfehler sowie der Anfangszustand und dessen Schätzfehlervarianz definiert werden.

In der praktischen Anwendung können diese Größen oftmals nur sehr mühsam und nur mit erheblichen Unsicherheiten bestimmt bzw. kalibriert werden. Bei der Bearbeitung von Grundwassersystemen kommt erschwerend hinzu, daß durch den großen Umfang der Matrizen hohe Rechenkosten anfallen (SCHILLING 1987). Aus diesen Gründen wurde das Kalman-Filter in der Grundwasserhydrologie bislang nur für kleinräumige Teilgebiete zu Testzwecken eingesetzt (SACHER 1983, GEER 1987).

2.3.3 Kriging

Kriging ist ein von MATHERON (1963) entworfenes, nach dem südafrikanischen Geomathematiker KRIGE benanntes, räumliches Interpolationsverfahren. Es wurde in der Lagerstättenkunde zur Schätzung der räumlichen Verbreitung von zeitunabhängigen Variablen (z.B dem Erzgehalt von Gesteinen) entwickelt. Das Kriging-Verfahren ist ein lineares Schätzverfahren, mit dem der Variablenwert am Schätzpunkt aus dem gewichteten Mittel der umliegenden Meßwerte berechnet wird.

Die Gewichte der Meßwerte werden dabei jeweils so bestimmt, daß die Schätzung optimal im Sinne einer möglichst geringen Schätzfehlervarianz ist. Dies ist dann der Fall, wenn, wie in Kap. 3 ausführlich beschrieben, die räumliche Struktur der Variable berücksichtigt wird.

Zusätzlich zum Schätzwert liefert die Methode für jeden beliebigen Schätzpunkt einen Wert für die Zuverlässigkeit der durchgeführten Schätzung: die Standardabweichung des Schätzfehlers. Sie ist abhängig von der Entfernung der umliegenden Meßpunkte und vom Ausmaß der räumlichen Erhaltungsneigung der Variablen (s. Kap. 3.2.2).

Auf Grund dieser Eigenschaften ist das Kriging-Verfahren zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen ganz besonders geeignet. Unter der Voraussetzung, daß eine ausreichende Anzahl von Meßstellen vorliegt, sind die notwendigen statistischen Parameter wesentlich einfacher und zuverlässiger festzulegen als beim Kalman-Filter. Kürzere Rechenzeiten und ein insgesamt breiterer Einsatzbereich sprechen ebenfalls für die Anwendung des Kriging-Verfahrens.

Da die Kriging-Methode im wesentlichen auf die räumliche Interpolation beschränkt ist, können jedoch die zeitlichen Aspekte der Meßnetzanalyse (Meßturnus, Meßdauer) nicht bearbeitet werden. Diese Einschränkung ist jedoch weniger gravierend, da die typischen hydrologischen Meßnetze Datensätze mit relativ langen Zeitreihen an wenigen Orten liefern. Die Information in der Zeit ist dadurch meistens reichhaltiger als im Raum (ROUHANI, WACKERNAGEL 1990). Hinzu kommt, daß viele hydrologische Größen, z.B. Niederschlag, Wasserstände, Temperaturen etc. ohne großen Aufwand kontinuierlich in analoger (graphisch) oder digitaler Form erfaßt werden können. Eine wirklich flächenhafte Messung hydrologischer Größen ist demgegenüber (noch) nicht möglich. Ob und inwieweit Fernerkundungsmethoden in der praktischen Anwendung diese Lücke schließen können, bleibt abzuwarten.

Auf Grund der obigen Überlegungen wurde in dieser Arbeit das Kriging-Verfahren zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen ausgewählt. In Kap. 3 werden die theoretischen Grundlagen und die Eigenschaften der verschiedenen Kriging-Varianten beschrieben.

3 Das Kriging-Verfahren

3.1 Einführung

Hydrologische Größen sind in der Regel Funktionen des Raumes. Als Beispiele seien der Grundwasserstand, die Transmissivität, die Niederschlagshöhe und die Verdunstungshöhe genannt. Die Verteilung der Größe im Raum ist meistens nicht rein zufällig. Vielmehr ist in den meisten Fällen zu beobachten, daß zwei Meßwerte um so ähnlicher sind, je näher die Meßorte beieinander liegen. Das bedeutet, daß die Meßwerte räumlich korreliert sind.

Diese räumliche Korrelation ist allerdings nicht so stark ausgeprägt, daß der wahre Wert an Punkten ohne Messungen exakt aus benachbarten Meßpunkten bestimmt werden könnte. Ein Zufallsanteil im räumlichen Verhalten verhindert dies. MATHERON (1963), der Begründer der Geostatistik, prägte für solche Größen den Begriff der *regionalisierten Variable* (variable regionalisée). Viele hydrologische und geologische Größen können auf diese Weise betrachtet werden.

In der Abbildung 3.1 wird in einfacher Form das Grundproblem der räumlichen Punktschätzung aufgezeigt: Von einer regionalisierten Variablen existieren an einigen Orten (x_1, x_2, \dots, x_n) punkthafte Messungen (Z_1, Z_2, \dots, Z_n). Mit diesen Information ist am Ort x_0 der unbekannte Wert Z_0 zu schätzen.

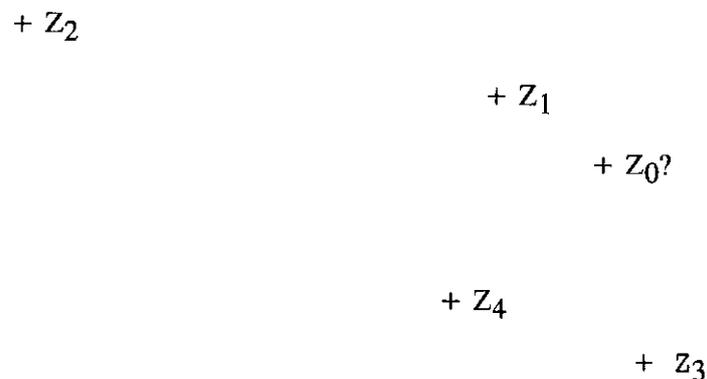


Abb. 3.1 Das Problem der Punktschätzung

Es ist naheliegend, einen Schätzalgorithmus zu verwenden, der dem Meßwert Z_1 ein höheres Gewicht zumißt als dem Wert am Meßpunkt x_2 .

Eine große Anzahl unterschiedlichster Methoden wurde in der Vergangenheit zur Bestimmung der Gewichte entwickelt, mit denen die Meßwerte in die Schätzung eingehen sollen. Die Meß-

werte können zum Beispiel wie beim Rasterpunktverfahren mit dem Kehrwert des Abstandes zum Schätzpunkt gewichtet werden. Bei anderen Verfahren werden Bereiche definiert, in denen der Meßwert gültig sein soll (z.B. Thiessen-Polygone). Vor allem zur Ermittlung des Gebietsniederschlags wurde eine Fülle von Verfahren entwickelt, die von GIESECKE et al. (1983) zusammenfassend beschrieben wurden.

Diese Methoden gehen von der Annahme aus, daß die Beziehung zwischen dem unbekanntem Wert am Ort x_0 und den Meßwerten nur von dem jeweiligen räumlichen Abstand (und der Richtung) abhängt. Der Meßwert selbst und das räumliche Verhalten der Variablen spielt bei der Gewichtung der Meßwerte keine Rolle.

Auch beim Kriging-Verfahren wird der Schätzwert durch ein gewichtetes Mittel der Meßwerte bestimmt. Im Gegensatz zu den anderen Verfahren werden die Gewichte jedoch nicht nur anhand der Entfernung der Meßpunkte vom Schätzpunkt bestimmt, sondern sind auch abhängig von der räumlichen Struktur, d.h. von dem Ausmaß der räumlichen Erhaltungsneigung der Variablen.

Dort, wo das Verfahren entwickelt wurde, in der Lagerstättenkunde, wird es heute häufig zur Abschätzung der Abbauwürdigkeit von Erz-, Kohle-, Erdöl- und Erdgas-Lagerstätten eingesetzt (z.B. DAVID 1976, JOURNAL, HUIJBREGTS 1978, AKIN, SIEMES 1988). Auch in den Geowissenschaften wird diese Methode, wenn auch in weit geringerem Maße, verwendet. Dies gilt z.B. für die Bodenkunde (WEBSTER, BURGESS 1980), die Geologie (DAVIS J.C 1986) und die Geophysik (CARR, McCALLISTER 1985).

In der Hydrologie wurden die ersten Arbeiten, die sich mit dem Kriging-Verfahren befassen, in der zweiten Hälfte der siebziger Jahre veröffentlicht (OLEA 1975, DELHOMME 1976, DELHOMME 1978).

Relativ häufig wurde das Kriging-Verfahren bislang in der Geohydrologie zur räumlichen Interpolation von Grundwasserständen (z.B. GAMBOLATI et al. 1979, VOLPI et al. 1979, ABOUFIRASI, MARINO 1983, BROUWER, DEFIZE 1983, NEUMAN, JACOBSON 1984), Transmissivitäten (DELHOMME 1979, HOEKSMAN, KITANIDIS 1985, AHMED, MARSILY 1987) und der Grundwasserbeschaffenheit (MYERS et al. 1982, HÖLTING et al. 1982, SAMPER, NEUMAN 1989) eingesetzt.

Auch zur Berechnung von Gebietsniederschlägen wurde dieses Verfahren schon häufiger verwendet (z.B. DELHOMME 1978, CHUA, BRAS 1982, CREUTIN, OBLED 1982, BASTIN et al. 1984, BENICHO 1987), während Abflußdaten oberirdischer Gewässer noch kaum mit der Kriging-Technik ausgewertet wurden (VILLENEUVE et al. 1979, SOLOW, GORELICK 1986).

Es fällt auf, daß im deutschsprachigen Raum das Kriging-Verfahren in der Hydrologie bislang nur vereinzelt zum Einsatz gekommen ist (STREIT 1981, HÖLTING et al. 1982, SACHER 1983, SPRECHER 1988). Dabei wurde es häufig nur zur Interpolation verwendet, so daß seine besonderen Möglichkeiten nicht ausgeschöpft wurden. Allgemein gilt, daß bislang nur wenige Arbeiten über die Anwendung der Kriging-Technik zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen vorliegen (SWITZER 1979, HUGHES, LETTENMAIER 1981, SOPHOCLEOUS et al. 1982, SPRUILL, CANDELA 1990). Dies trifft insbesondere für die multivariaten Kriging-Verfahren zu (Kap. 3.5 und 3.6).

3.2 Einfaches Kriging

3.2.1 Das Semivariogramm und der Nuggeteffekt

Voraussetzung für die Anwendung des Kriging-Verfahrens ist die Kenntnis der räumlichen Struktur der regionalisierten Variablen. Das bedeutet, daß die räumliche Abhängigkeit der Variablenwerte quantifiziert werden muß. Diese Abhängigkeit drückt sich häufig dadurch aus, daß im Mittel Werte von direkt benachbarten Meßpunkten ähnlicher sind als die von weiter entfernten.

Zur Beschreibung dieses räumlichen Verhaltens ist es zweckmäßig, stochastische Methoden einzusetzen und anzunehmen, daß es sich bei der Größe Z um eine Zufallsfunktion handelt. Das bedeutet, daß sie sowohl räumlich als auch von Realisation zu Realisation variiert. Bei der Variablen $Z(x)$ handelt es sich demnach um eine Realisation des Zufallsprozesses, wobei x die geometrische Lage des Punktes im Raum (in 1, 2 oder 3 Dimensionen) angibt. Somit liegt an einem beliebigen, festen Ort x_0 eine Zufallsvariable vor. Da in der Regel nur eine Realisation des Zufallsprozesses bekannt ist - und das auch nur an den Meßpunkten x_i -, müssen für die Anwendung des Kriging-Verfahrens gewisse Annahmen über die Eigenschaften der Zufallsfunktion getroffen werden.

Eine häufig gebrauchte Hypothese, die Stationarität, besagt, daß alle statistischen Eigenschaften der Zufallsfunktion (Mittelwert, Varianz, Kovarianz etc.) invariant sind gegen Translation (räumliche Verschiebung). Sie sind an allen Orten gleich. In der linearen Geostatistik genügt die Annahme der *schwachen Stationarität* (Stationarität 2. Ordnung). Dabei ist der Erwartungswert (Mittelwert, 1. Moment) unabhängig vom Ort x , also konstant:

$$E[Z(x)] = m(x) = m \quad (1)$$

Auch die Kovarianz K (2. Moment) zwischen zwei Meßpunkten x und x' ist nicht von den Orten selbst, sondern nur vom Abstandsvektor $h = (x - x')$ abhängig:

$$E[(Z(x) - m) \cdot (Z(x') - m)] = K(x - x') = K(h) \quad (2)$$

Im besonderen gilt dann für $h = 0$:

$$E[(Z(x) - m)^2] = \text{Var}[Z(x)] = K(0) \quad (3)$$

so daß die Varianz der Zufallsfunktion ebenfalls unabhängig von x ist.

In vielen Fällen können die Kriterien der schwachen Stationarität mit einer endlichen Varianz $K(0)$ nicht mit den vorliegenden Daten erfüllt werden (MARSILIY 1986, S.291). Die empirische Varianz nimmt nämlich mit zunehmender Größe des Untersuchungsgebietes zu.

Die Herleitung des Kriging-Gleichungssystems (s. Kap. 3.2.2) verlangt jedoch nicht die schwache Stationarität der Zufallsfunktion. Es genügt, daß die Inkremente $(Z(x+h) - Z(x))$ stationär sind. Die Bedingungen lauten daher:

$$E[Z(x+h) - Z(x)] = 0 \quad (4)$$

$$\text{Var}[(Z(x+h) - Z(x))] = 2g(h) \quad (5)$$

Diese Hypothese, weniger streng als die Hypothese der schwachen Stationarität, wird "intrinsic Hypothese" genannt. Die Funktion $g(h)$ heißt *Semivariogramm*, wird aber oft auch nur Variogramm genannt.

Aus Gleichung (4) und (5) folgt:

$$g(h) = \frac{1}{2} \cdot E[(Z(x+h) - Z(x))^2] \quad (6)$$

Das bedeutet, daß $2g(h)$ die mittlere quadratische Differenz von Z zwischen Punktepaaren ist, die durch den Abstandsvektor h von einander getrennt sind.

Empirisch läßt sich dieses Semivariogramm bestimmen, indem zunächst die räumliche Entfernung und die Himmelsrichtung zwischen allen Meßpunkten berechnet wird. Bei n Meßpunkten ergibt dies $\frac{1}{2} \cdot n \cdot (n-1)$ Paare. Sind die Meßpunkte unregelmäßig im Raum verteilt, was in der Regel der Fall sein dürfte, werden die Paare in Abstands- und Richtungsklassen eingeteilt. So könnten zum Beispiel alle Meßpunktpaare, die einen Abstand von weniger als 1 km aufweisen und die in N-S-Richtung orientiert sind, in einer Klasse zusammengefaßt werden. Innerhalb einer Klasse mit $n(h)$ Meßpunktpaaren wird dann $g(h)$ entsprechend Gl. (6) berechnet:

$$g(h) = \frac{1}{2 \cdot n(h)} \cdot \sum_{i=1}^{n(h)} (Z(x_i+h) - Z(x_i))^2 \quad (7)$$

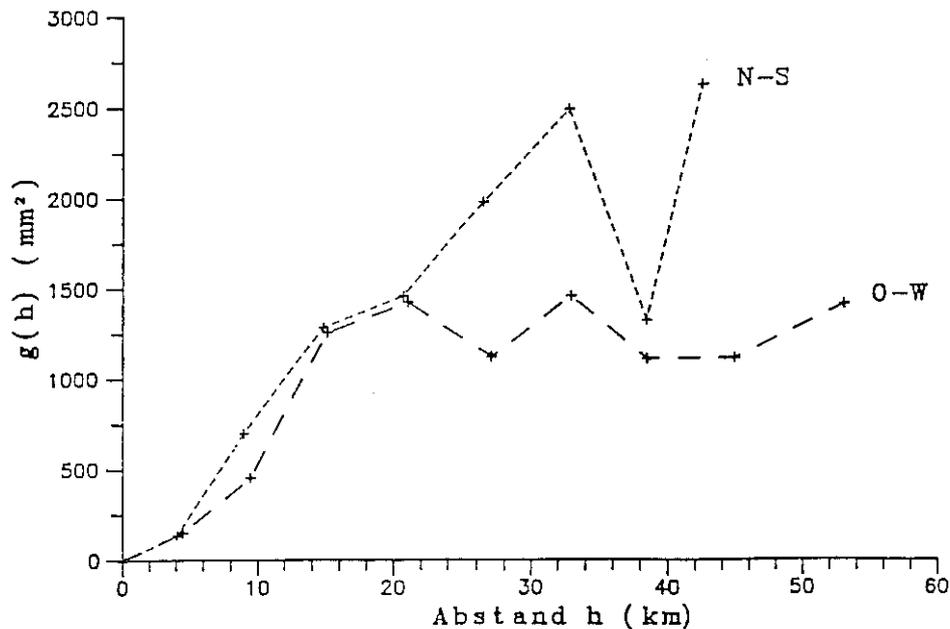


Abb. 3.2 Empirische richtungsgebundene Semivariogramme von Niederschlagsdaten im Raum Mönchengladbach (mittlere Jahressumme)

Berechnet man für mehrere Abstandsklassen $g(h)$, so erhält man für jede Richtungsklasse ein Semivariogramm.

In der Abbildung 3.2 sind beispielhaft für verschiedene Richtungen zwei Semivariogramme der mittleren jährlichen Niederschlagssumme von 52 Stationen im Großraum von Mönchengladbach dargestellt.

Für $h=0$ ist $g(h)=0$, da dann jeder Meßpunkt mit sich selbst verglichen wird. Bei kleinen Abständen sind die Meßwerte sehr ähnlich, so daß $g(h)$ im Mittel keine großen Werte annimmt. Mit zunehmendem Abstand wird die räumliche Korrelation zwischen den Meßstationen zunehmend schwächer und damit $g(h)$ größer. Der Anstieg dieser Linie ist ein statistisches Maß dafür, wie stark der Informationsgehalt einer Punktmessung abnimmt, wenn man sich vom Meßort entfernt.

Ab einer bestimmten Distanz sind die Meßpunkte nicht mehr räumlich korreliert, so daß $g(h)$ den Wert der gesamten Varianz der Stichprobe erreicht. Diese Entfernung, auch als *range* bezeichnet, definiert gewissermaßen den Radius innerhalb dessen die Meßwerte miteinander korreliert sind. Im vorliegenden Beispiel sind das ca. 20 km.

Die Semivariogramme der beiden Richtungsklassen (N-S, O-W) zeigen bis zum Erreichen des Plateaus einen sehr ähnlichen Verlauf. Die Unterschiede bei den größeren Abständen haben keine strukturellen Gründe, sondern sind in der geringen Anzahl von Meßwertpaaren begründet. Darauf weisen ebenfalls die starken Fluktuationen bei großen Abständen hin. In diesem Beispiel ist es daher sinnvoll, beide Semivariogramme zusammenzufassen und ein *isotropisches* Semivariogramm zu berechnen. In der Abbildung 3.3 ist dieses Semivariogramm dargestellt.

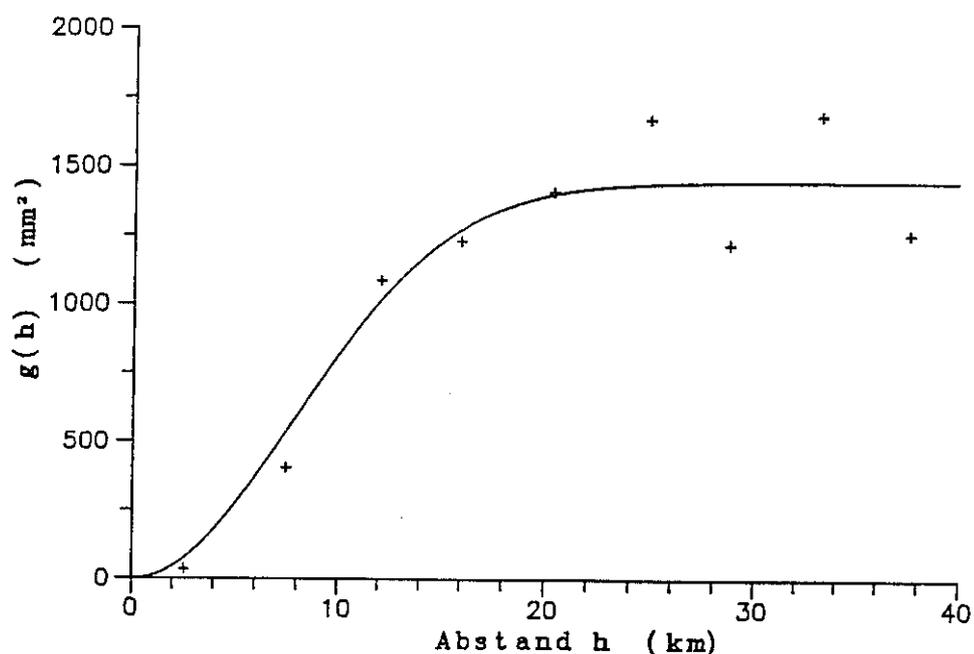


Abb. 3.3 Isotropes empirisches (+) und theoretisches Semivariogramm von Niederschlagsdaten im Raum Mönchengladbach (mittlere Jahressumme)

An das empirische Semivariogramm wurde eine stetige Funktion (*theoretisches Semivariogramm*) angepaßt. Dies ist notwendig, da beim Kriging-Verfahren $g(h)$ nicht nur für einige Abstandsklassen, sondern für beliebige Abstände benötigt wird. Im allgemeinen werden dafür sphärische, lineare, Potenz- und Gauss'sche Funktionen verwendet (s. Abb. 3.4). Sie sind positiv definit und deshalb für das Kriging-Verfahren geeignet (ARMSTRONG, JABIN 1981).

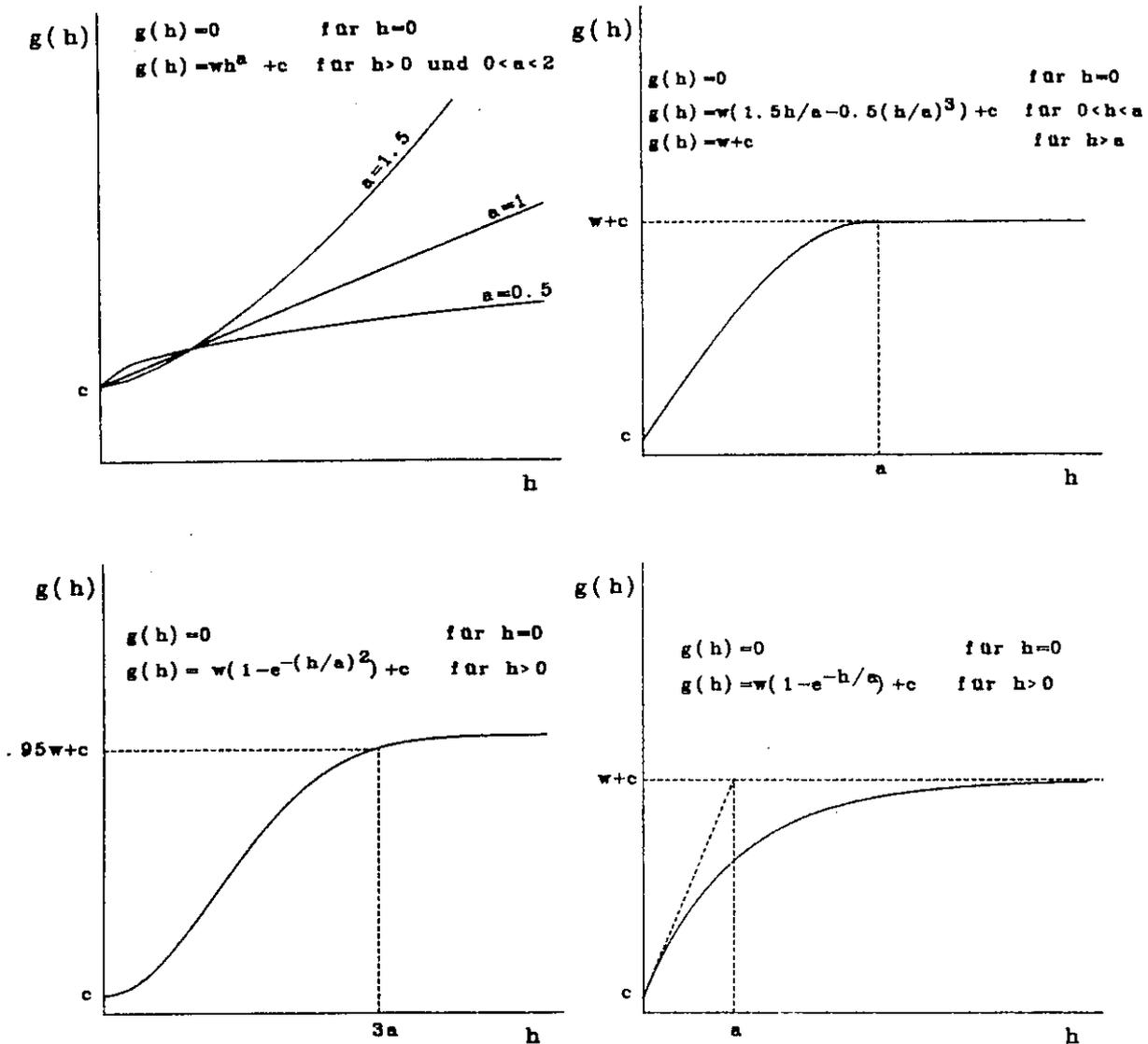


Abb. 3.4 Häufig verwendete theoretische Semivariogramme

- links oben: Lineares und Potenz-Modell
- rechts oben: Sphärisches Modell
- links unten: Gauss'sches Modell
- rechts unten: Exponentielles Modell

Häufig tritt bei Semivariogrammen am Ursprung ($h = 0$) ein Sprung auf (vgl. Abb. 3.4). Diese Diskontinuität am Nullpunkt wird *Nuggeteffekt* genannt. Der Ausdruck stammt aus dem

Golderz-Bergbau, wo die unregelmäßige, zufällige Verteilung von Goldklumpen zu einer hohen Varianz im Goldgehalt auch schon bei eng benachbarten Gesteinsproben führt. Neben diesen kleinräumigen, zufälligen Strukturen können aber auch Meß-, Probenahme- und Analysenfehler die Ursachen für das Auftreten eines Nuggeteffektes sein.

Ein empirisches Semivariogramm zu erstellen und daran im Anschluß ein theoretisches Modell anzupassen, ist keine triviale Aufgabe. Zahlreiche Fehler, wie die falsche Wahl der Abstandsklassen oder das Nichtberücksichtigen von Ausreißern, können das Ergebnis stark verfälschen (ARMSTRONG 1984a). Eine Anpassung der theoretischen Funktion mit der Methode der kleinsten Abweichungsquadrate empfiehlt sich nicht, da dadurch Variogrammpunkte mit einer geringen Anzahl von Wertepaaren ein zu hohes Gewicht erhalten. Eine visuelle Überprüfung der Anpassung ist in der Regel notwendig.

3.2.2 Das Kriging-Gleichungssystem

Kriging ist ein lineares Schätzverfahren, bei dem der Schätzwert Z_0^* am Ort x_0 durch ein gewogenes Mittel der Meßwerte Z_i berechnet wird:

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot Z_i \quad (8)$$

Dabei ist Z_0^* der Schätzwert des wahren aber unbekanntes Wertes Z_0 . α_0^i sind die Gewichte der Kriging-Schätzung für den Ort x_0 . Die Bestimmung der Gewichte hat so zu erfolgen, daß

- (1) die Schätzung verzerrungsfrei ist, d.h. keine systematische Über- bzw. Unterschätzung auftritt,
- (2) die Schätzung optimal verläuft. Das bedeutet, daß der mittlere quadratische Schätzfehler minimal wird.

Mathematisch ausgedrückt heißt dies:

$$1. E[Z_0^* - Z_0] \stackrel{!}{=} 0 \quad (9)$$

$$2. \text{Var}[Z_0^* - Z_0] \stackrel{!}{=} \text{Minimum} \quad (10)$$

Aus der ersten Bedingung folgt die für gewichtete Mittelwerte typische Eigenschaft:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_0^i = 1 \quad (11)$$

Außerdem kann gezeigt werden, daß eine lineare Beziehung zwischen der Varianz der Schätzfehler, den Gewichten α_0^i und dem theoretischen Semivariogramm besteht (OLEA 1975, MARSILY 1986, S. 294f). Diese führt bei der Minimierung von Gl. 10 nach dem Lagrange-Prinzip zu folgendem linearem Gleichungssystem:

$$\sum_{j=1}^n \alpha_0^j \cdot g(x_i - x_j) + \mu = g(x_i - x_0) \quad i = 1, \dots, n \quad (12a)$$

$$\sum_{i=1}^n \alpha_0^i = 1 \quad (12b)$$

μ ist eine neue Unbekannte, der Lagrange-Multiplikator. Der Ausdruck $g(x_i - x_j)$ bezeichnet den Wert des Semivariogramms für den Abstand zwischen den Meßorten x_i und x_j . Dieses Gleichungssystem mit $n+1$ Gleichungen und $n+1$ Unbekannten $(\alpha_0^1, \dots, \alpha_0^n, \mu)$ sieht in der übersichtlichen Matrizen-Schreibweise wie folgt aus:

$$\begin{bmatrix} 0 & g_{12} & g_{13} & \dots & g_{1n} & 1 \\ g_{21} & 0 & g_{23} & \dots & g_{2n} & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ g_{n1} & g_{n2} & g_{n3} & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_0^1 \\ \alpha_0^2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_0^n \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{10} \\ g_{20} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ g_{n0} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (13)$$

Bei dieser Schreibweise wurde $g(x_i - x_j)$ durch g_{ij} ersetzt. Die Diagonale der Matrix ist 0, da $g_{ii} = g(0) = 0$.

Die Lösung des Gleichungssystems, z.B. mit dem Gauss'schen Eliminationsverfahren oder durch das Invertieren der Matrix, liefert die gesuchten Gewichte α_0^i , so daß sich Z_0^* gemäß Gl. (8) bestimmen läßt.

Außerdem kann mit den für den jeweiligen Schätzpunkt bestimmten Gewichten die Varianz des Schätzfehlers berechnet werden (zur Herleitung siehe MARSILY 1986, S. 296):

$$\text{Var}(Z_0^* - Z_0) = \sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot g_{i0} + \mu \quad (14)$$

Akzeptiert man die Annahme, daß die Schätzfehler normalverteilt sind, läßt sich das Konfidenzintervall der Schätzung angeben. Beispielsweise liegt bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit von 5% das Konfidenzintervall bei $\pm 2\sigma_0$. Dabei ist σ_0 die Standardabweichung des Schätzfehlers (Standardschätzfehler) am Schätzpunkt x_0 :

$$\sigma_0 = \sqrt{\text{Var}(Z_0^* - Z_0)} \quad (15)$$

Mit einer Wahrscheinlichkeit von 95% liegt demnach der wahre, unbekannte Wert Z_0 innerhalb des Intervalls $Z_0^* \pm 2\sigma_0$.

Auf einige wichtige, besondere Eigenschaften des Kriging- Gleichungssystems soll im folgenden hingewiesen werden:

- (1) Kriging ist ein exaktes Interpolationsverfahren. Das bedeutet, daß der Meßwert durch das Verfahren immer exakt reproduziert wird. Der Meßwert am Schätzpunkt erhält das Gewicht $\alpha_0 = 1$, während alle anderen Meßwerte das Gewicht $\alpha_0 = 0$ erhalten. Dementsprechend wird nach Gl. 14 und Gl. 15 $\sigma_0 = 0$, so daß eine Unsicherheit am Meßort nicht mehr vorhanden ist. (Es sei denn, man berücksichtigt Meßfehler bei der Punktmessung, s. Pkt. 5).
- (2) Im Kriging-Gleichungssystem kommen die Meßwerte Z_i nicht vor. Tatsächlich werden die Gewichte in Gl. 13 nur anhand der Abstände des Schätzpunktes zu den Meßpunkten, der Abstände der Meßpunkte untereinander und der mittleren räumlichen Struktur der Variablen (Semivariogramm) bestimmt. Damit ist auch die räumliche Verteilung des Standardschätzfehlers unabhängig von den Meßwerten. Man kann deshalb Meßstellen fiktiv hinzunehmen bzw. entfernen und anschließend die Auswirkung dieser Maßnahmen auf die räumliche Verteilung des Standardschätzfehlers ermitteln. Die Änderung des Informationsgehaltes des Meßnetzes läßt sich damit räumlich differenziert quantifizieren. Auf indirekte Weise besteht natürlich auch eine Abhängigkeit der Standardschätzfehler von den Meßwerten, da das Semivariogramm nur anhand der Meßwerte berechnet werden kann. Die oben genannten Möglichkeiten existieren also nur dann, wenn das Semivariogramm bereits bekannt ist.
- (3) Kriging ist sehr gut zur Konstruktion von Isolinien geeignet. Dazu werden die Schätzpunkte, unabhängig von der Lage der Meßpunkte, auf einem regelmäßigen Gitternetz angeordnet. Für diese Punkte werden die Schätzwerte bestimmt und anschließend manuell oder per Plotter Isolinien gezeichnet. (Die meisten Graphik-Programme benötigen zum Zeichnen von Isolinien die Stützpunkte auf einem regelmäßigen Gitter.) Nicht nur die Variable selbst, sondern auch die Standardabweichung des Schätzfehlers kann auf diese Weise dargestellt werden.
- (4) Mit dem Verfahren ist es möglich, auf direkte Weise die Mittelwerte von beliebigen Teilflächen oder Teilvolumina zu schätzen. Dies wird in der Lagerstättenkunde zur Vorratsberechnung häufig durchgeführt (AKIN, SIEMES 1988). Auch in der Hydrologie kann diese Methode überall dort eingesetzt werden, wo nicht der Wert an jedem Punkt, sondern der Mittelwert über (Teil-)Flächen von Interesse ist (Gebietsniederschlag, k_f -Wert des Aquifers etc.)
- (5) Unter bestimmten Voraussetzungen können mit dem Verfahren auf einfache Weise unsystematische (zufällige) Meßfehler bei der Punktmessung berücksichtigt werden (MARSILY 1986, S. 299f). Je nach Variablentyp und Meßmethode kann dieser Fehler vernachlässigbar klein oder von großer Bedeutung sein. Durch das Einbeziehen des Meßfehlers wird die Schätzung des Variablenwertes nicht beeinflusst. Die Varianz des Schätzfehlers erhöht sich jedoch. Sie ist am Meßort nicht mehr null, sondern entspricht der Höhe der Meßfehlervarianz. Es besteht die Möglichkeit, individuell für jeden Meßort (Meßstation) die Varianz des Meßfehlers vorzugeben. Dadurch können eventuell vorhandene Unterschiede in der Datenqualität, bedingt durch den Einsatz verschiedener Meßgeräte und Meßmethoden, bei der Bestimmung der räumlichen Verteilung des Schätzfehlers berücksichtigt werden.

Diese Darstellung macht deutlich, daß das Kriging-Verfahren viel mehr ist als ein reines Interpolationsverfahren. Durch die oben aufgeführten Eigenschaften (insbesondere Pkt. 2 und 5) ist es sehr gut zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen geeignet.

Allerdings müssen einige Einschränkungen beachtet werden:

- (1) Für die zuverlässige Berechnung des Semivariogramms muß eine Mindestanzahl von Meßpunkten vorhanden sein. Bei weniger als 30 Meßpunkten kann das Verfahren in der Regel nicht mehr sinnvoll eingesetzt werden. Dies hat zur Folge, daß nur bei außergewöhnlich dichten Meß- oder Erkundungsnetzen das Kriging-Verfahren auch für kleinräumige Untersuchungen eingesetzt werden kann. Die typische Anwendungen liegen im regionalen Größenbereich.
- (2) Bei einer großen Zahl von Meßpunkten ($n \gg 100$) steigt der Rechenbedarf erheblich. Denn für jeden Schätzpunkt muß das Gleichungssystem mit $n+1$ Gleichungen erneut gelöst werden. Zwar wird das Rechenzeitproblem dadurch abgeschwächt, daß die linke Seite des Gleichungssystems konstant bleibt und daher die Matrix nur einmal gefüllt und invertiert werden muß (siehe Gl. 13). Dennoch bleibt der numerische Aufwand für ein enges Raster von Schätzpunkten recht hoch. Bei großen Datenmengen kommt das Problem hinzu, daß Rundungsfehler und Abschirmungseffekte die Genauigkeit der Berechnungen reduzieren können (SACHER 1983). Man geht deshalb dazu über, nicht alle Meßpunkte, sondern nur die am nächsten zum jeweiligen Schätzpunkt gelegenen zu verwenden. STREIT (1981) hält die Einbeziehung von 4-10 benachbarten Punkten für ausreichend. DELHOMME (1978) empfiehlt 10-20 Meßpunkte zu verwenden. Durch diese Maßnahme kann die Anzahl der Gleichungen erheblich reduziert werden. Allerdings müssen dann für jeden Schätzpunkt die benachbarten Meßpunkte neu bestimmt werden. Falls eine Veränderung eintritt, ist die Matrix neu zu füllen und anschließend zu invertieren.
- (3) Bei einigen hydrologischen Variablen tritt häufig im Untersuchungsgebiet ein räumlicher Trend (Drift) auf, so daß das theoretische Semivariogramm nicht direkt aus dem empirischen Semivariogramm abgeleitet werden kann (s. Kap. 3.3). Mit den fortgeschrittenen Kriging-Methoden kann dieses Problem im Prinzip gelöst werden. Die Anwendung dieser Verfahren kann allerdings sehr aufwendig sein und die damit erzielten Ergebnisse sind nicht immer eindeutig (s. Kap. 3.3 u. 3.4).

3.2.3 Die Kreuzprüfung (Cross-Validation)

Nach der Berechnung des empirischen Semivariogramms und der Anpassung einer theoretischen Funktion ist es im Prinzip möglich, über das Kriging-Gleichungssystem die Schätzwerte Z_0 und deren Zuverlässigkeit σ_0 zu bestimmen. Zuvor ist es jedoch ratsam, wie auch bei anderen deterministischen und statistischen Modellen, die Modellannahmen zu überprüfen.

Dieser Test kann am besten mit der sogenannten *Kreuzprüfung (Cross-Validation)* erfolgen (DAVIS, B.M. 1987). Hierbei wird jeweils ein Meßwert Z_i aus dem Datensatz entfernt und für den selben Standort mit den verbleibenden $n-1$ Meßwerten der Schätzwert Z_i^* bestimmt. Dieses Verfahren wird nacheinander mit allen Meßpunkten durchgeführt. Mit einer sich anschließenden

statistischen Auswertung der Differenzen zwischen Meßwert und Schätzwert ($Z_i - Z_i^*$) kann überprüft werden,

- (1) ob die Schätzung verzerrungsfrei, ohne mittleren Fehler (MF) verläuft:

$$MF = 1/n \cdot \sum_{i=1}^n (Z_i - Z_i^*) \cong 0 \quad (16)$$

- (2) wie groß der mittlere quadratische Fehler (MQF) tatsächlich ist:

$$MQF = \sqrt{1/n \cdot \sum_{i=1}^n (Z_i - Z_i^*)^2} \stackrel{!}{=} \text{Minimum} \quad (17)$$

- (3) ob die theoretische Varianz der Schätzfehler σ_i^2 mit der tatsächlichen Varianz im Mittel übereinstimmt (SMQF = standardisierter mittlerer quadratischer Fehler):

$$SMQF = \sqrt{1/n \cdot \sum_{i=1}^n \frac{(Z_i - Z_i^*)^2}{\sigma_i^2}} \cong 1 \quad (18)$$

Mit diesen drei Kriterien kann die Eignung des gewählten theoretischen Semivariogramms überprüft bzw. können mehrere Semivariogramme miteinander verglichen werden. Dasjenige, das den Bedingungen am nächsten kommt, paßt am besten zu den Daten. Dadurch kann die Unsicherheit, die bei der Wahl und der Anpassung des theoretischen Semivariogramms häufig auftritt, überwunden werden (GAMBOLATI, VOLPI 1979).

3.3 Universal Kriging

Die Anwendung des beschriebenen einfachen Kriging-Verfahren setzt voraus, daß der Erwartungswert von Z im Untersuchungsgebiet konstant ist (schwache Stationarität, Gl. 1), oder daß zumindest die Inkremente stationär sind (intrinsche Hypothese, Gl. 4).

In vielen Fällen ist jedoch eine richtungsabhängige, systematische Zu- oder Abnahme der Meßwerte erkennbar. Diese deterministische, allmähliche Änderung der regionalisierten Variablen wird in der Geostatistik als *Drift* oder auch als räumlicher *Trend* bezeichnet. Ist er vorhanden, dann kann - vom theoretischen Standpunkt aus betrachtet - das einfache Kriging-Verfahren nicht mehr eingesetzt werden, da es sonst in Teilgebieten zu systematischen Über bzw. Unterschätzungen der wahren Werte kommen würde.

Eine Erweiterung des einfachen Kriging-Ansatzes ist erforderlich, um auch im instationären Fall eine verzerrungsfreie Schätzung durchführen zu können. Dazu werden die Variablenwerte interpretiert als die Summe von zwei Komponenten (s. Abb. 3.5): Den instationären, deterministischen Driftanteil $m(x)$ und den stochastischen Anteil der Residuen $R(x)$:

$$Z(x) = m(x) + R(x) \quad (19)$$

wobei der Driftanteil als Erwartungswert der regionalisierten Variablen definiert ist:

$$E[Z(x)] = m(x) \quad (20)$$

Wird der Driftanteil von einer regionalisierten Variablen entfernt, führt dies zu stationären, räumlich korrelierten Residuen, so daß das einfache Kriging-Verfahren angewendet werden kann.

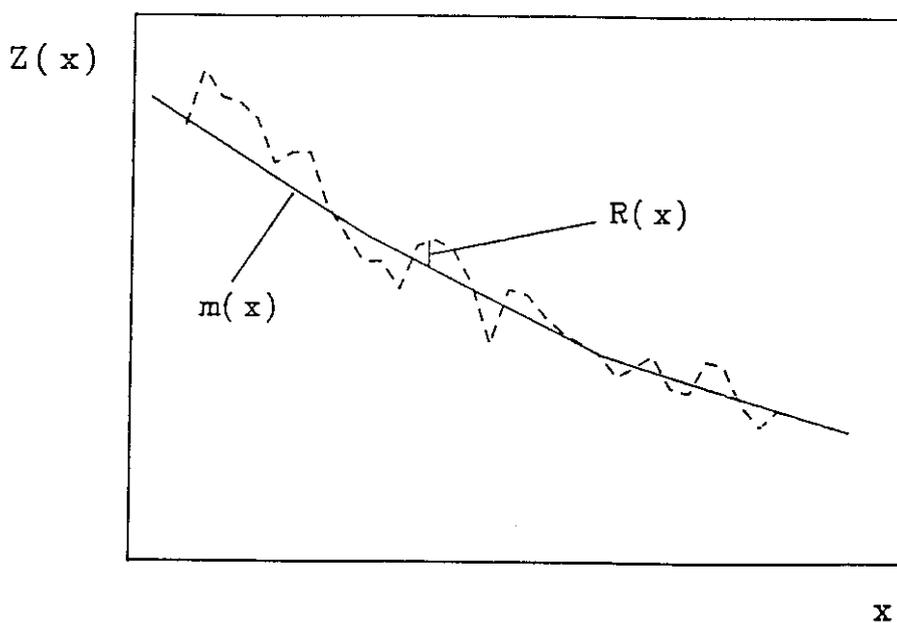


Abb. 3.5 Schematische Darstellung einer räumlich instationären regionalisierten Variablen mit Driftanteil und Residuen

Zu beachten ist, daß nicht immer zweifelsfrei entschieden werden kann, ob eine Drift vorliegt oder nicht. Die Entscheidung darüber ist nicht nur abhängig vom Charakter der Variablen, sondern auch vom Umfang des vorliegenden Datenmaterials und dem gewählten Bearbeitungsmaßstab (JOURNEL 1985). So kann beispielsweise eine offensichtliche Drift in einem kleinen Untersuchungsgebiet nach dessen Erweiterung durchaus als eine normale Fluktuation um einen Mittelwert interpretiert werden.

Berechnet man das empirische Semivariogramm $g'(h)$ einer nicht stationären regionalisierten Variablen, dann zeigt es in der Regel einen parabelförmigen Verlauf. Zur Verdeutlichung ist in der Abbildung 3.6 das isotrope, empirische Semivariogramm von Grundwasserstandsdaten aus dem Untersuchungsgebiet "Obere Schwalm" (s. Kap. 4) dargestellt.

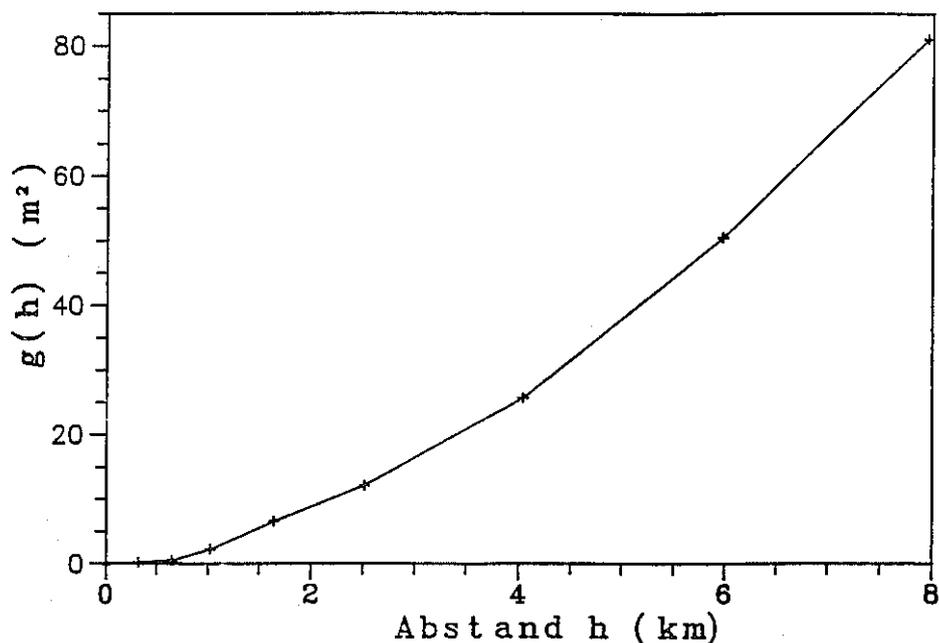


Abb. 3.6 Empirisches Semivariogramm von Grundwasserstandsdaten aus dem Gebiet "Obere Schwalm" (s. Kap. 4)

Grundwasserstände gehören aus physikalischen Gründen (Fließvorgänge) zu den Variablen, bei denen grundsätzlich von der Anwesenheit einer Drift auszugehen ist. Die Driftkomponente führt ab einem gewissen Abstand zu einem überproportionalen Anstieg des Semivariogramms:

$$\begin{aligned}
 g'(h) &= 1/(2n) \cdot \sum_{i=1}^n (Z(x_i+h) - Z(x_i))^2 \\
 &= 1/(2n) \cdot \sum_{i=1}^n [(R(x_i+h) + m(x_i+h)) - (R(x_i) + m(x_i))]^2 \\
 &= 1/(2n) \cdot \sum_{i=1}^n (R(x_i+h) - R(x_i))^2 + 1/(2n) \cdot \sum_{i=1}^n (m(x_i+h) - m(x_i))^2 \\
 &= g(h) + 1/(2n) \cdot \sum_{i=1}^n (m(x_i+h) - m(x_i))^2
 \end{aligned} \tag{21}$$

Aus Gl. 21 folgt, daß das gesuchte Semivariogramm der stationären Residuen $g(h)$ durch die Addition der Driftkomponente mit wachsendem h verzerrt wird. Dadurch ist eine direkte Anpassung des theoretischen Semivariogramms an die Meßdaten nicht mehr möglich (STARKS, FANG 1982).

Eine Möglichkeit dieses Problem zu umgehen besteht darin, das Semivariogramm nur senkrecht zur Hauptrichtung der Drift zu berechnen. Damit wäre dann das empirische Semivariogramm weitgehend driftfrei. Nachteilig wirkt sich dabei aus, daß die Anzahl der Wertepaare im

Vergleich zum isotropen Semivariogramm drastisch zurückgeht, so daß diese Möglichkeit nur bei großen Datensätzen gegeben ist. Außerdem muß diese Technik auf die Fälle beschränkt bleiben, bei denen die Drift sehr einfach und gleichmäßig strukturiert ist. Dies kann zum Beispiel bei einer gleichmäßig geneigten Oberfläche einer geologischen Schichtgrenze oder bei einer Grundwasseroberfläche unter einfachen Randbedingungen der Fall sein (ABOUFIRASI, MARINO 1983).

Ein anderer Lösungsweg könnte darin bestehen, vor der Anwendung des Kriging-Verfahrens den Driftanteil aus den Daten zu entfernen. Dies ist dann möglich, wenn aufgrund physikalischer Gesetzmäßigkeiten oder anderer Erkenntnisse und Informationen das generelle Verhalten der Variablen im Untersuchungsgebiet ableitbar ist. (Der Driftanteil ist ja als Erwartungswert der regionalisierten Variablen definiert, näheres siehe Kap. 3.6.)

GAMBOLATI und VOLPI (1979) haben die Driftkomponente anhand der Meßdaten nach der Methode der kleinsten Abweichungsquadrate bestimmt. MARSILY (1986, S. 310) weist allerdings mit Recht darauf hin, daß der Einsatz dieses Verfahrens, das in der Regressions- und Trendflächenrechnung häufig angewendet wird, die Unabhängigkeit der Residuen voraussetzt. Dies steht im Gegensatz zu dem Bemühen, das Ausmaß der räumlichen Korrelation der Residuen mit dem Semivariogramm aufzudecken.

Im Jahr 1969 hat MATHERON den einfachen Kriging-Ansatz erweitert, um auch instationäre regionalisierte Variablen bearbeiten zu können (ARMSTRONG 1984). Er nannte dieses Verfahren "*Universal Kriging*". Es wird dabei angenommen, daß die Driftkomponente regelmäßig ist und örtlich durch eine mathematische Funktion angenähert werden kann. Im allgemeinen werden dazu Polynome des ersten oder zweiten Grades benutzt:

$$m(x) = \sum_{l=0}^k a_l \cdot p^l(x) \quad (22)$$

mit $l=0, \dots, k$. a_l sind die unbekanntes Koeffizienten und $p^l(x)$ die einzelnen Glieder der Polynomfunktion. Zum Beispiel ist der folgende Ausdruck ein Polynom zweiten Grades für den 2-dimensionalen Fall:

$$m(x) = a_0 + a_1 \cdot X + a_2 \cdot Y + a_3 \cdot X^2 + a_4 \cdot X \cdot Y + a_5 \cdot Y^2 \quad (23)$$

Dabei sind X und Y die Lagekoordinaten (z.B. Rechts- und Hochwert) des Punktes x.

Wie beim einfachen Kriging wird der Schätzwert Z_0^* am Ort x_0 durch eine lineare Kombination der Meßwerte Z_i nach Gleichung (8) berechnet. Die Schätzung soll ebenfalls verzerrungsfrei sein (1. Bedingung), d.h.

$$E\{Z_0\} = E\{Z_0^*\} = E\left\{\sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot Z_i\right\} \quad (24)$$

Weiter gilt:

$$E\{Z_0\} = m(x_0) \quad (25)$$

so daß aus Gleichung (22) und (24) folgt:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot \left[\sum_{l=0}^k a_l \cdot p^l(x_i) \right] = \sum_{l=0}^k a_l \cdot p^l(x_0)$$

$$\sum_{l=0}^k a_l \cdot \left[\sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot p^l(x_i) \right] = \sum_{l=0}^k a_l \cdot p^l(x_0) \quad (26)$$

Diese Beziehung gilt für alle Koeffizienten a_l der Driftfunktion, so daß man folgende $k+1$ "Universalitätsbedingungen" erhält:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot p^l(x_i) = p^l(x_0) \quad l = 0, \dots, k \quad (27)$$

Für $l=0$ und damit $m(x)=\text{const.}$ ergibt sich die aus dem einfachen Kriging-Gleichungssystem bekannte Beziehung $\sum_{i=1}^n \alpha_0^i = 1$.

Durch das Einbeziehen der 2. Bedingung (minimale Schätzvarianz) erhält man analog zu der in Kap. 3.2.2 beschriebenen Weise folgendes Gleichungssystem:

$$\sum_{j=1}^n \alpha_0^i \cdot g(x_i - x_j) + \sum_{l=0}^k \mu_l \cdot p^l(x_i) = g(x_i - x_0) \quad i = 1, \dots, n \quad (28a)$$

$$\sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot p^l(x_i) = p^l(x_0) \quad l = 0, \dots, k \quad (28b)$$

μ_l sind die Lagrange-Multiplikatoren, so daß insgesamt $n+k+1$ Unbekannte ($\alpha_0^1, \dots, \alpha_0^n, \mu_0, \dots, \mu_k$) mit ebenso vielen Gleichungen zu lösen sind. Während beim einfachen Kriging-Ansatz nur der Abstand zwischen den Punkten eine Rolle spielt, sind nun die Gewichte und damit auch die Schätzwerte von der absoluten Lage der Punkte abhängig.

Die Varianz des Schätzfehlers läßt sich wie folgt bestimmen (MARSILY 1986):

$$\text{Var}(Z_0^* - Z_0) = \sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot g(x_i - x_0) + \sum_{l=0}^k \mu_l \cdot p^l(x_0) \quad (29)$$

Die Driftkomponente allein erhält man, wenn auf der rechten Seite des Gleichungssystems (28) die Semivarianzen $g(x_j - x_0)$ durch die Varianz der Residuen ersetzt wird. Dieser Fall würde eintreffen, wenn alle Meßpunkte vom Schätzpunkt so weit entfernt wären, daß sie außerhalb der Reichweite (range) des Semivariogramms liegen. Der Schätzwert wird auf diese Weise unabhängig vom einzelnen Meßwert, so daß nur noch das mittlere Verhalten der regionalisierten Variablen, d.h. die Driftkomponente, berechnet wird (DAVIS J.C. 1986).

Die Hauptschwierigkeit bei der Anwendung der Universal-Kriging-Methode liegt darin, daß sowohl das theoretische Semivariogramm der Residuen, $g(h)$, als auch die Struktur der Driftkomponente (Grad und Anzahl der Polynomglieder) unbekannt sind. Erschwerend kommt hinzu, daß die Driftkomponente und die Form des Semivariogramms voneinander abhängig sind. Dadurch ist man gezwungen, durch iteratives Vorgehen - Auswählen der Driftfunktion, Testen eines Semivariogramms, Kreuzprüfung - die optimale Kombination von Drift und Semivariogramm zu finden. Leider führt diese häufig zeitraubende und rechenintensive Vorgehensweise nicht immer zu eindeutigen Ergebnissen (s. Kap. 5.1).

3.4 Kriging mit generalisierten Kovarianzen

Wie in Kap. 3.2.1 dargelegt, beruht das Semivariogramm auf Differenzen der 1. Ordnung. Solange die Annahme des konstanten Erwartungswertes von Z gilt ($E[Z(x)] = m$), haben die Inkremente $(Z(x+h)-Z(x))$ einen Erwartungswert von null. Sie sind damit unabhängig von m . Das heißt, daß durch die Differenzenbildung der 1. Ordnung der konstante Driftanteil eliminiert wird. Durch eine Differenzenbildung höherer Ordnung (Differenzen der Differenzen) sollte es daher möglich sein, Driftkomponenten höherer Ordnung herauszufiltern. Tatsächlich konnte MATHERON (1973) zeigen, daß eine Inkrementfunktion der k -ten Ordnung dazu geeignet ist, eine Drift bis zur Ordnung $k-1$ herauszufiltern.

Der Ausdruck $\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Z_i$, der *generalisiertes Inkrement* der Zufallsfunktion Z genannt wird, ist dazu in der Lage, wenn die Gewichte α_0^i die folgende Bedingung erfüllen:

$$\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot p^l(x_i) = 0 \quad l = 0, \dots, k \quad (30)$$

für alle Polynomglieder p^l vom Grad kleiner oder gleich k .

Wie bereits in Kap.3.3 gezeigt wurde (Gl. 27), ist die Schätzung dann verzerrungsfrei, wenn gilt:

$$\sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot p^l(x_i) - p^l(x_0) = 0 \quad (31)$$

Diese Gleichung kann in der Form von Gleichung (30) dargestellt werden, wenn man $\alpha_0^0 = -1$ definiert.

Für den Fall einer Driftfunktion ersten Grades ($k=1$) lauten die Bedingungen demnach:

$$\sum_{i=0}^n \alpha_0^i = 0 \quad (32)$$

$$\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot X_i = 0 \quad (33)$$

$$\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Y_i = 0 \quad (34)$$

wobei wiederum X_i, Y_i die Lagekoordinaten des Punktes x_i sind.

Der Schätzfehler ergibt sich dann zu:

$$Z_0^* - Z_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_0^i \cdot Z_i - Z_0 = \sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Z_i \quad (35)$$

und entspricht damit dem generalisierten Inkrement. Geht man von einer regionalisierten Variablen Z_i' mit einem linearen Driftanteil aus,

$$\begin{aligned}
Z_i' &= Z_i + m_i \\
Z_i' &= Z_i + a_0 + a_1 \cdot X_i + a_2 \cdot Y_i \quad i = 0, \dots, n
\end{aligned} \tag{36}$$

dann gilt

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Z_i &= \sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Z_i + a_0 \cdot \left(\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \right) + a_1 \cdot \left(\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot X_i \right) + a_2 \cdot \left(\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Y_i \right) \\
&= \sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Z_i
\end{aligned} \tag{37}$$

falls die Bedingungen (32), (33), (34) erfüllt sind. Das bedeutet, daß das generalisierte Inkrement auch bei Anwesenheit einer beliebigen Drift erster Ordnung unverändert bleibt.

Bei Anwesenheit einer Drift zweiter Ordnung gilt entsprechendes, wenn die zusätzlichen Bedingungen

$$\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot X_i^2 = 0 \tag{38}$$

$$\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Y_i^2 = 0 \tag{39}$$

$$\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot X_i \cdot Y_i = 0 \tag{40}$$

mitberücksichtigt werden.

Die Varianz des Schätzfehlers kann auf folgende Weise dargestellt werden (DELFINER 1976):

$$\text{Var}(Z_0^* - Z_0) = \text{Var}\left(\sum_{i=0}^n \alpha_0^i \cdot Z_i\right) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n \alpha_0^i \cdot \alpha_0^j \cdot K(x_i - x_j) \tag{41}$$

Die stationäre Funktion $K(h)$ wird *generalisierte Kovarianz* genannt und ist nur abhängig vom Abstand $h = x_i - x_j$. Im Endergebnis entsteht ein Gleichungssystem, das dem des Universal-Kriging-Verfahrens (Gl. 28) weitgehend entspricht. Lediglich $g(h)$ ist durch $-K(h)$ zu ersetzen (MARSILY 1986, S. 315).

Genau wie das Semivariogramm muß die generalisierte Kovarianzfunktion so beschaffen sein, daß die Varianzen der Inkremente immer positiv sind. In der Tabelle 3.1 sind die geeigneten Kovarianzfunktionen aufgeführt. Es ist ersichtlich, daß der Parameter C dem Nugget-Effekt und A_1 der Steigung des Semivariogramms nahe dem Ursprung entspricht.

Bei der praktischen Anwendung müssen die Ordnungszahl der Driftfunktion und die Koeffizienten der Kovarianzfunktion bestimmt werden. Bei KITANIDIS (1983) werden die möglichen Lösungswege aufgezeigt. In der vorliegenden Arbeit soll das von DELFINER (1976) vorgeschlagene Verfahren eingesetzt werden. Es wurde in der Hydrologie bereits bei der Bearbeitung von Niederschlagsdaten (CHUA, BRAS 1982) und Grundwasserstandsdaten (BROUWER, DEFIZE 1983) angewendet.

Tab. 3.1 Funktionen für die generalisierten Kovarianzen (2-Dim), (nach DELHOMME 1978)

zu eliminierende Drift	Ordnung	Generalisierte Kovarianzfunktion
konstant	0	$K(h) = C \cdot \delta + A_1 \cdot h$
linear	1	$K(h) = C \cdot \delta + A_1 \cdot h + A_3 \cdot h^3$
quadratisch	2	$K(h) = C \cdot \delta + A_1 \cdot h + A_3 \cdot h^3 + A_5 \cdot h^5$

Bedingungen: $C \geq 0$; $A_1 \leq 0$; $A_5 \leq 0$; $A_3 \geq -10/3 \cdot \sqrt{A_1 \cdot A_5}$;

$\delta = 1$ falls $h=0$, $\delta = 0$ falls $h \neq 0$

Im ersten Verfahrensschritt wird die Ordnungszahl der Driftfunktion bestimmt. Dazu werden für $k = 0, 1$ und 2 die bekannten Meßwerte aus den umliegenden Meßwerten geschätzt, wobei die Kovarianzfunktion $K(h) = -1 \cdot h$ eingesetzt wird. Für jeden Meßwert wird der Schätzfehler der Größe nach sortiert und eine Rangzahl zugeordnet. Die Ordnungszahl der Driftfunktion mit der kleinsten mittleren Rangzahl wird als die am besten geeignete ausgewählt. Diese Vorgehensweise läßt sich dadurch rechtfertigen, daß zum einen die Kovarianzfunktion $K(h) = -1 \cdot h$ für alle Driftordnungen K geeignet ist und zum anderen die Gewichte α_0^i vom Parameter A_1 unabhängig sind.

Im zweiten Schritt werden die Koeffizienten der generalisierten Kovarianzfunktion durch einen iterativen Prozess bestimmt. Diese Aufgabe wird dadurch erleichtert, daß der Funktionswert linear abhängig von den Koeffizienten ist. Dadurch können die unbekanntenen Koeffizienten durch eine schrittweise lineare Regression zwischen der empirischen Varianz der generalisierten Inkremente und der theoretischen Varianz (Gl. 41) bestimmt werden (näheres dazu s. KAFRITSAS, BRAS 1981).

Abschließend wird die gewählte generalisierte Kovarianzfunktion so, wie das theoretische Semivariogramm beim normalen Kriging-Verfahren, mit der in Kap 3.2.3 beschriebenen Kreuzprüfung verifiziert.

3.5 Multivariate Verfahren

3.5.1 Einleitung

Bei den bislang vorgestellten Verfahren wurde das räumliche Verhalten einer regionalisierten Variablen Z ausschließlich auf der Grundlage der Meßwerte Z_i geschätzt. Auch bei der Bestimmung der Zuverlässigkeit der Schätzung (Standardabweichung des Schätzfehlers) wurden nur Informationen der Meßwerte Z_i verwendet. In der Hydrologie kommt es allerdings häufig vor, daß verschiedene Variablen miteinander mehr oder weniger stark korreliert sind.

So sind beispielsweise Niederschlagshöhen, Abflußhöhen, Schneehöhen etc. in der Regel mit der Geländehöhe positiv korreliert. Zwischen der Verdunstung und einigen meteorologischen Parametern wie Temperatur, Luftfeuchtigkeit, Sonnenscheindauer und Windgeschwindigkeit existieren ebenfalls physikalisch begründete Zusammenhänge. Die hydraulische Durchlässigkeit von Lockergesteinen wird in hohem Maße von der Korngrößenzusammensetzung bestimmt. Die Aufzählung von Beispielen ließe sich nahezu beliebig fortführen.

Es ist deshalb anzustreben, daß bei der räumlichen Interpolation der Variablen Z mit der Kriging-Methode die Informationen anderer Messungen mit berücksichtigt werden. Das ist insbesondere dann sinnvoll, wenn die Variablen eng miteinander korreliert sind und die Hilfsvariable in höherer räumlicher Dichte gemessen wurde. Dann kann die Zuverlässigkeit der Schätzung der Hauptvariablen erhöht und damit der Schätzfehler verringert werden.

3.5.2 Cokriging

Mit dem Cokriging-Verfahren (JOURNEL, HUIJBREGTS 1978, MYERS 1982) ist es möglich, den zusätzlichen Informationsgehalt von anderen Meßgrößen zu nutzen. $Z_a(x)$ und $Z_b(x)$ seien zwei regionalisierte, miteinander korrelierte Variablen. Die Schätzung von Z_a mit dem Cokriging-Verfahren erfolgt dann als gewichtetes Mittel von Z_a und Z_b :

$$Z_a^*(x_0) = \sum_{j=1}^n \alpha_{a^j} \cdot Z_a(x_j) + \sum_{l=1}^m \alpha_{b^l} \cdot Z_b(x_l) \quad (42)$$

Dabei ist $Z_a^*(x_0)$ der Schätzwert von Z_a am Schätzpunkt x_0 , $Z_a(x_j)$ sind die Messwerte von Z_a ($j=1, n$), und $Z_b(x_l)$ sind die Meßwerte von Z_b ($l=1, m$). Die α 's sind die Cokriging Gewichte. Zu beachten ist, daß Z_a und Z_b nicht an den selben Punkten bekannt sein müssen sowie n und m unterschiedlich sein können.

Die Bedingung für eine unverzerrte Schätzung von Z_a^* lautet für den intrinsischen Fall:

$$E[Z_a^*] = m_a = m_a \cdot \sum_{j=1}^n \alpha_{a^j} + m_b \cdot \sum_{l=1}^m \alpha_{b^l} \quad (43)$$

Daraus folgt:

$$\sum_{j=1}^n \alpha_{a^j} = 1 \quad (44a)$$

$$\sum_{l=1}^m \alpha_b^l = 0 \quad (44b)$$

Die optimale Schätzung ($E[Z_a(x_0) - Z_a^*(x_0)] = \text{Min.}$) wird durch die Verwendung der Semivariogramme von Z_a und Z_b , d.h. $g_a(h)$ und $g_b(h)$, sowie des Kreuz-Semivariogramms $g_{ab}(h)$ erreicht (MARSILY 1986, MYERS 1984). Mit dem Kreuz-Semivariogramm wird die räumliche Struktur der Korrelation zwischen den beiden Variablen bestimmt. Es ist definiert als:

$$g_{ab}(h) = 1/2 E[(Z_a(x+h) - Z_a(x)) \cdot (Z_b(x+h) - Z_b(x))] \quad (45)$$

Dabei gilt:

$$g_{ab}(h) = g_{ba}(h) \quad (46)$$

Mit diesen Funktionen kann das Cokriging-Gleichungssystem auf folgende Weise geschrieben werden (z. Herleitung siehe MYERS 1982, JOURNAL, HUIJBREGTS 1978):

$$\sum_{i=1}^n \alpha_a^i \cdot g_a(x_j - x_i) + \sum_{l=1}^m \alpha_b^l \cdot g_{ab}(x_j - x_l) + \mu_a = g_a(x_j - x_0) \quad j = 1, \dots, n \quad (47a)$$

$$\sum_{j=1}^n \alpha_a^j \cdot g_{ab}(x_j - x_l) + \sum_{k=1}^m \alpha_b^k \cdot g_b(x_l - x_k) + \mu_b = g_{ab}(x_l - x_0) \quad l = 1, \dots, m \quad (47b)$$

$$\sum_{j=1}^n \alpha_a^j = 1 \quad (47c)$$

$$\sum_{l=1}^m \alpha_b^l = 0 \quad (47d)$$

Vergleicht man dieses Gleichungssystem mit dem des einfachen Kriging-Ansatzes (Gl. 12), so ist festzustellen, daß sich das Gleichungssystem um $m+1$ Gleichungen vergrößert.

Die Varianz des Schätzfehlers ist:

$$\text{Var}(Z_0^* - Z_0) = \sum_{j=1}^n \alpha_a^j \cdot g_a(x_j - x_0) + \sum_{l=1}^m \alpha_b^l \cdot g_{ab}(x_l - x_0) + \mu_a \quad (48)$$

Um zu gewährleisten, daß die Cokriging-Matrix positiv definit ist, müssen die beiden Semivariogramme und das Kreuz-Semivariogramm die folgende Bedingung erfüllen (AHMED, MARSILY 1987):

$$g_{ab}(h) \leq (g_a(h) \cdot g_b(h))^{1/2} \quad (49)$$

In der praktischen Anwendung kann es schwierig sein, diese Bedingung zu erfüllen (AHMED, MARSILY 1989).

Obwohl in der Theorie die Meßpunkte der beiden Variablen nach Anzahl und Lage beliebig verteilt sein können, ist darauf zu achten, daß zumindest an einem Teil der Meßpunkte beide Variablen bekannt sind. Nur dann kann das empirische Kreuz-Semivariogramm nach Gl. 45 berechnet werden.

3.5.3 Weitere Verfahren

Neben dem Cokriging wurden noch andere multivariate Kriging-Verfahren entwickelt, die der Vollständigkeit halber hier erwähnt werden sollen. Sie sind nicht so universell einsetzbar wie der Cokriging-Ansatz, haben aber den Vorteil, einfacher in der Anwendung und weniger rechenintensiv zu sein.

Beim "Kriging mit linearer Regression" wird die Regressionsgleichung zwischen Z_a und Z_b verwendet, um Z_a an den Meßpunkten von Z_b zu schätzen. Bei dem sich anschließenden einfachen Kriging-Verfahren wird Z_a an diesen Punkten als bekannt angenommen (AHMED, MARSILY 1987). Die Methode ist nur für den Fall einsetzbar, daß die Hilfsvariable Z_b an mehr Punkten bekannt ist als die Variable Z_a und eine enge Korrelation zwischen beiden besteht.

Das Verfahren "Kriging mit externer Drift", das von MATHERON's Arbeitsgruppe entwickelt wurde (AHMED, MARSILY 1987), geht von der Annahme aus, daß die Variable Z_b an vielen Stellen im Untersuchungsgebiet genau bekannt ist. Sie kann daher eine gute Vorstellung von der räumlichen Struktur der Variable Z_a abgeben, soweit beide miteinander korreliert sind. Hierbei wird ebenfalls die Existenz einer linearen Beziehung zwischen Z_a und Z_b vorausgesetzt, die jedoch nun direkt in das Kriging-Gleichungssystem eingefügt wird. Von Nachteil für die praktische Anwendung ist, daß der Wert von Z_b an allen Meßorten von Z_a und an allen Schätzpunkten vorhanden sein muß. Bei GALLI, MEUNIER (1987) und MOINARD (1987) werden Anwendungen dieses Verfahrens aus dem Bereich der Lagerstättenkunde und der Geologie beschrieben.

3.6 Kriging in Kombination mit deterministischen Verfahren

3.6.1 Allgemeine Vorgehensweise

Die bislang vorgestellten Kriging-Methoden zur räumlichen Interpolation sind rein statistische Verfahren. Kenntnisse über hydrologische Prozesse, die das räumliche Verhalten der regionalisierten Variable teilweise erklären könnten, wurden nicht berücksichtigt.

In der Theorie der regionalisierten Variablen wird zwar die Existenz eines deterministischen Anteils angenommen, doch wird dieser beim universellen Kriging und beim Kriging mit generalisierten Kovarianzen durch örtlich angepasste Polynome auf statistische Weise ermittelt. Es ist deshalb nicht überraschend, daß der auf diese Weise berechnete deterministische Driftanteil häufig nur eine geringe hydrologische Aussagekraft besitzt.

Mit den multivariaten Kriging-Ansätzen wird versucht, durch zusätzliche Informationen von korrelierten Hilfsvariablen, die Bestimmung der räumlichen Verteilung der regionalisierten Variablen zu verbessern. Dies geschieht jedoch ebenfalls nur auf statistische Weise.

In einigen Teilgebieten der Hydrologie wurden in den letzten Jahrzehnten deterministische, mathematische Modelle entwickelt, die die komplexen, physikalischen Prozesse in der Natur in vereinfachter Form abbilden. Neben den häufig eingesetzten Niederschlag-Abfluß-Modellen haben sich insbesondere mathematisch-numerische Grundwassermodelle zur Simulation des Grundwasserhaushaltes bewährt.

Mit deterministischen Modellen werden im Prinzip die wesentlichen Faktoren berücksichtigt, die die räumliche Verteilung der regionalisierten Variablen beeinflussen. Dadurch können Informationen von anderen Meßnetzen und Untersuchungen im Modellgebiet miteinander verknüpft und verarbeitet werden. Es erscheint daher sinnvoll, deterministische Modelle zur Analyse und Optimierung von Meßnetzen einzusetzen.

Dabei geht man von der Vorstellung aus, daß die regionalisierte Variable $Z(x)$ aus zwei Komponenten besteht:

$$Z(x) = m(x) + R(x) \quad (50)$$

$m(x)$: deterministische Komponente (Drift)

$R(x)$: zufällige Komponente (Residuen)

Dieser Ansatz ist völlig identisch mit dem Grundgedanken des universellen Kriging-Verfahrens (Kap. 3.3). Der Unterschied besteht allerdings darin, daß der deterministische Anteil nicht mit einer an die Meßwerte angepaßten Polynomfunktion, sondern mit den physikalischen Kenntnissen über das hydrologische System beschrieben wird. Im geostatistischen Sinne wird mit einem deterministischen Modell sozusagen das mittlere Verhalten, der Erwartungswert, der regionalisierten Variablen bestimmt.

An den Meßpunkten können nach erfolgter Modellierung die Meßwerte Z_i mit den Modellergebnissen m_j verglichen werden. Die Differenzen sind die trendfreien Residuen R_j aus denen das Semivariogramm berechnet und anschließend das normale Kriging-Verfahren durchgeführt werden kann (s. Abb. 3.7).

Es ist offensichtlich, daß die Residuen dann besonders klein werden, wenn die regionalisierte Variable gut zu modellieren ist, das hydrologische System einfach strukturiert ist und zuverlässige Eingabedaten vorliegen. Daraus resultiert dann ein Semivariogramm der Residuen mit einer geringen Steigung und damit letztlich mit einer geringen Standardabweichung des Schätzfehlers.

Die Qualität des Meßnetzes wird somit nicht mehr nur durch die räumliche Verteilung und die Dichte der Meßstellen bestimmt. Der Umfang und die Qualität von weiteren relevanten Informationen im Untersuchungsgebiet sowie der Aufwand bei der Modellierung werden berücksichtigt.

Bei einer nur theoretisch möglichen perfekten Simulation der Realität mit einem deterministischen Modell wären die Residuen an allen Meßpunkten null. Die Anwendung des Kriging-Ver-

fahrens hätte dann zur Folge, daß an allen Punkten im Untersuchungsgebiet kein Schätzfehler mehr auftreten würde. Daraus müßte dann konsequenterweise der Schluß gezogen werden, die Messung der Variablen einzustellen, da sie durch die mathematische Simulation an jedem Ort exakt berechnet werden könnte.

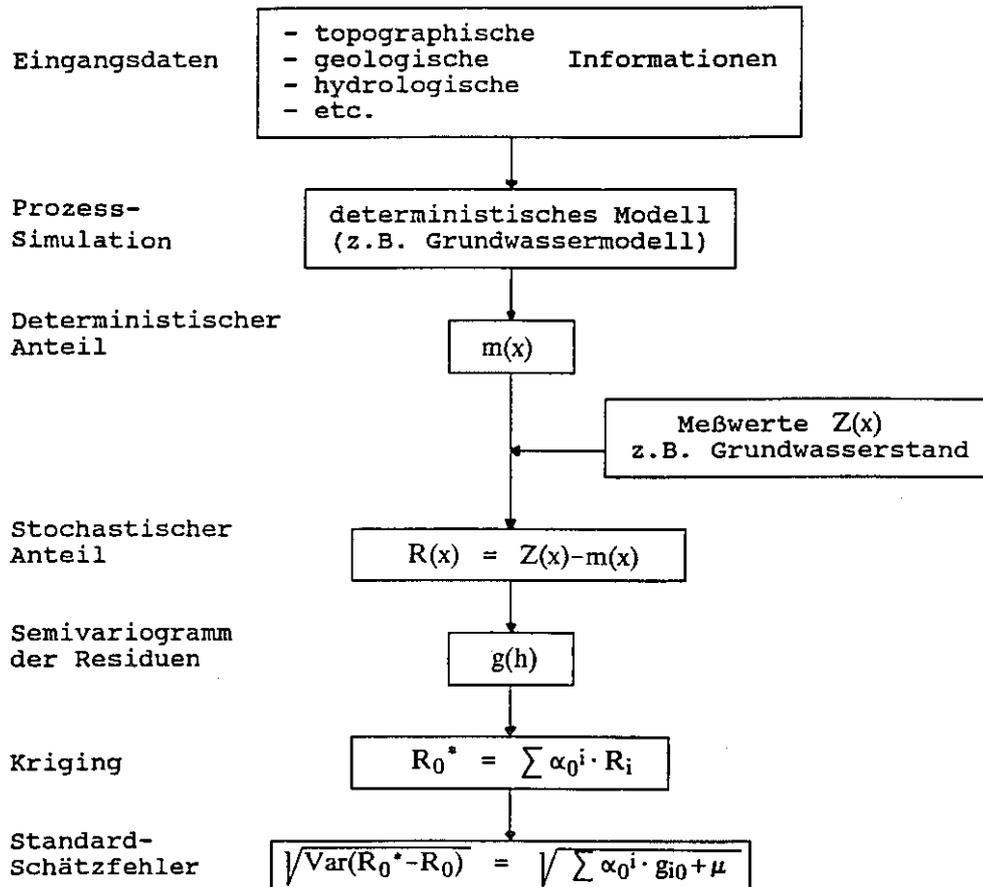


Abb. 3.7 Vorgehensweise beim Kriging in Kombination mit einem deterministischen Modell

Dieses rein theoretische Beispiel macht deutlich, daß eine Verbesserung der Kenntnisse über das räumliche Verhalten einer hydrologischen Größe auf zweierlei Weise erreicht werden kann: Durch intensiveres Messen der Variablen selbst (mehr Meßstellen) oder durch das Einbeziehen zusätzlicher hydrologischer Erkenntnisse und Informationen.

3.6.2 Grundwassermodellierung

Die in Kap. 3.6.1 dargelegte Vorgehensweise soll in dieser Arbeit am Beispiel eines Grundwassermeßnetzes erprobt werden. In diesem Anwendungsbereich erscheint das Verfahren besonders erfolgversprechend, da Grundwasserstandsdaten auf Grund der Fließvorgänge einen hohen deterministischen Anteil aufweisen, der sich mit mathematisch-numerischen Grundwassermodellen gut bestimmen läßt.

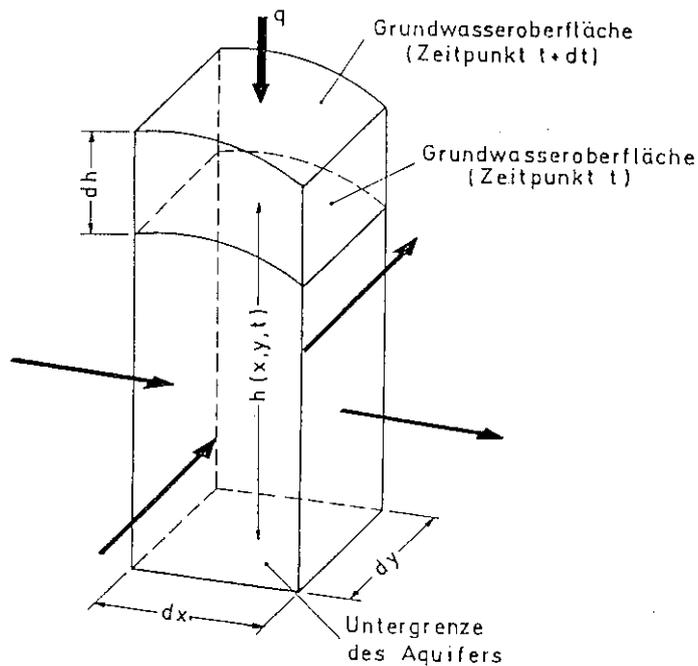


Abb. 3.8 Volumenelement eines Aquifers

Für den Fall eines isotropen Grundwasserleiters mit freier Grundwasseroberfläche ergibt sich aus der Kontinuitätsbedingung (Abb. 3.8) und dem Fließgesetz nach DARCY folgende Differentialgleichung zur Beschreibung der Grundwasserströmung (BEAR 1979):

$$d/dx \cdot (h \cdot dh/dx) + d/dy \cdot (h \cdot dh/dy) + q/k_f = S/k_f \cdot dh/dt \quad (51)$$

Dabei bedeutet: x, y : Lagekoordinaten [m]

h : Standrohrspiegelhöhe über Bezugsniveau [m]

S : Speicherkoeffizient [-]

k_f : Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]

t : Zeit [s]

q : Regeneration / Entnahme pro Flächeneinheit [$m^3/(s \cdot m^2)$]

Bei dieser Strömungsgleichung wird eine rein horizontale Strömungsrichtung angenommen, d.h. $dh/dz=0$ (Annahme von DUPUIT). Für großräumige Grundwassersysteme, bei denen die laterale Ausdehnung des Grundwasserleiters sehr viel größer ist als seine Mächtigkeit, ist diese Vereinfachung in der Regel zulässig. Nur in Bereichen mit ausgeprägten vertikalen Fließkomponenten, z.B. an unvollkommenen Brunnen, führt die Anwendung der Gl. (51) zu fehlerhaften Standrohrspiegelhöhen.

Auf analytische Weise kann diese Differentialgleichung nur unter sehr einfachen, idealisierten Randbedingungen gelöst werden. Ein Beispiel dafür ist die zur Auswertung von Pumpversuchen häufig eingesetzte THEIS-Formel (s. LANGGUTH, VOIGT 1980).

Bei komplexen Fließsystemen werden deshalb numerische Methoden zur Berechnung der Grundwasserströmung eingesetzt. Hierbei wird die stetige Grundwasseroberfläche an einer endlichen Anzahl von Punkten (Knoten) im Raum und in der Zeit berechnet (Diskretisierung). Die Differentialgleichung muß dazu durch ein System algebraischer Gleichungen approximiert werden. Dies geschieht üblicherweise nach dem Finiten-Differenzen-Verfahren oder mit der Methode der Finiten Elemente (KINZELBACH 1986).

Beim Differenzen-Verfahren wird das Untersuchungsgebiet in der Regel mit einem rechteckigen oder quadratischen, regelmäßigen Raster überzogen. Diese Vorgehensweise erleichtert den Modellaufbau und die Programmierung, hat aber den Nachteil, daß die geometrischen Gegebenheiten, z.B. Lage der Modellränder, Fließgewässer, Entnahmen, nur grob abgebildet werden können (s. Abb. 3.9).

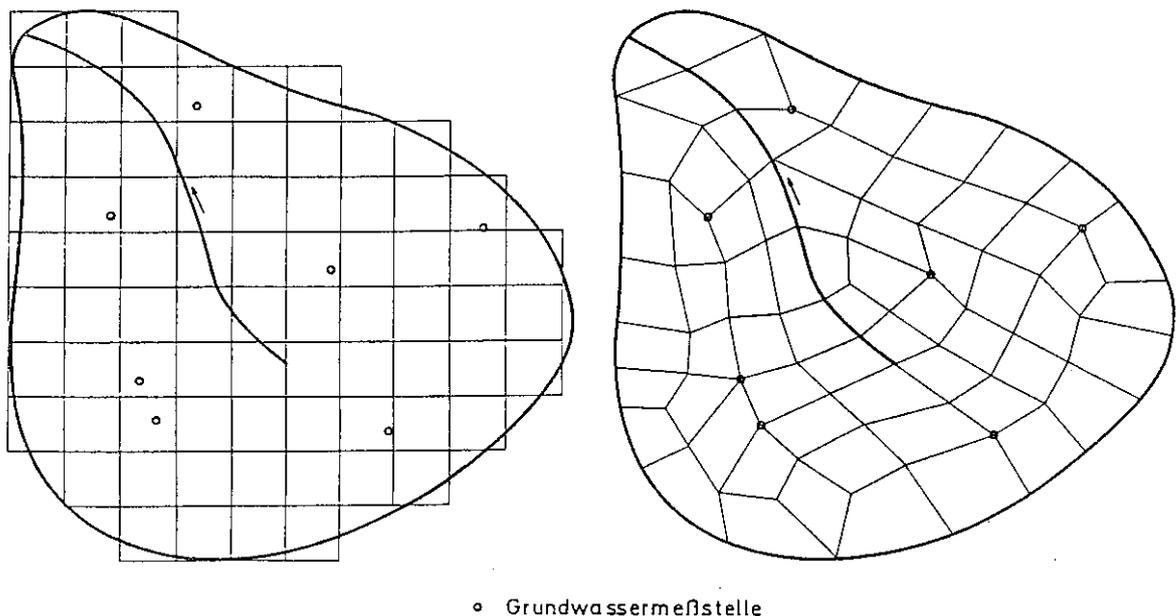


Abb. 3.9 Räumliche Diskretisierung eines Modellgebietes. Links: Finite-Differenzen; rechts: Finite-Elemente

Mit der Methode der Finiten Elemente kann das Untersuchungsgebiet in unregelmäßig geformte, üblicherweise geradlinige Elemente (Dreiecke, Vierecke) aufgeteilt werden. Modellknoten können so positioniert werden, daß sie mit geologischen und hydrologischen Grenzlinien (z.B.

Verwerfungen, Ausstrichrändern geologischer Schichten, Fließgewässern, Wasserscheiden) übereinstimmen. Grundwasserentnahmestellen und Grundwassermeßstellen können ebenfalls mit Modellknoten belegt werden.

Das Modellnetz läßt sich damit an das vorhandene Meßnetz anpassen. Deshalb erscheint dieses Verfahren für die Fragestellung dieser Arbeit als besonders geeignet. Der deterministische Anteil des Grundwasserstandes kann auf der Basis der Eingangsdaten direkt an den Grundwassermeßstellen bestimmt werden.

In dieser Studie wird ein Finite-Elemente-Modell verwendet (s. SACHER 1983), das von TRÖSCH (1975) entwickelt wurde. Die räumliche Diskretisierung wird mit gerad- oder krummlinigen Viereckselementen durchgeführt.

Bei der hier durchgeführten stationären Berechnung des oberen, freien Grundwasserspiegels werden als Eingabedaten benötigt:

- Untergrenze des Aquifers an allen Knoten
- Durchlässigkeitsbeiwert des Aquifers (elementweise)
- Grundwasserneubildung (elementweise)
- Versickerung in bzw. Zustrom aus tieferen Stockwerken (elementweise)
- Randbedingungen an den Modellrändern in Q oder h
- Grundwasserentnahmen (Lage und Fördermenge)
- Lage und hydraulische Funktion der Fließgewässer

Mit diesen Eingangsdaten liefert das Modell als Berechnungsergebnis die Standrohrspiegelhöhe und die Wasserbilanz an jedem Knoten im Modellgebiet.

3.7 EDV-Realisation

Für die praktische Durchführung der beschriebenen Kriging-Verfahren wurden im Rahmen dieser Arbeit EDV-Programme mit graphischer Bedienungsfläche entwickelt und eingesetzt. Sie wurden in der Programmiersprache FORTRAN 77 zur Anwendung auf IBM-kompatiblen PC's geschrieben.

Mit dem Programmpaket KRIGING können alle notwendigen Verfahrensschritte für das einfache und das Universal Kriging durchgeführt werden. Mit der Option 1 werden isotrope und richtungsgebundene empirische Semivariogramme berechnet. In der Option 2 wird mit der Kreuzprüfung das gewählte theoretische Semivariogramm und die Driftkomponente auf ihre Eignung getestet. Die Prüfkriterien (MF, MQF, SMQF) werden berechnet. Anschließend (Option 3) können für ein beliebiges Raster die Schätzwerte mit den dazugehörigen Standard-schätzfehlern bestimmt werden. Bei den Optionen 2 und 3 kann die Anzahl der Nachbarpunkte variabel gestaltet werden.

Allen drei Optionen ist gemeinsam, daß zusätzlich zu einem Ausgabeprotokoll Datenschnittstellen in Form von ASCII-Dateien angelegt werden. Sie können dann zur graphischen Darstellung der Ergebnisse (z.B. Semivariogramme) mit Standard-Graphiksoftware verwendet werden. Die Ergebnisse der Option 3 werden in einer Form abgelegt, in der sie direkt von der Graphik-Software SURFER (Golden Software Inc.) zur Darstellung von Isolinien und dreidimensionalen Oberflächen verwendet werden können.

Für die Anwendung des Cokriging-Verfahrens wurde das KRIGING-Programm weiterentwickelt. Demzufolge ist das COKRIG-Programmpaket in analoger Weise aufgebaut: Es erlaubt die Berechnung des Kreuz-Semivariogramms (Option 1), führt die Kreuzprüfung durch (Option 2) und ermöglicht die Interpolation auf ein rechtwinkliges Raster (Option 3). Die Anzahl der Nachbarpunkte kann dabei für beide Variablen getrennt variiert werden. Damit läßt sich die notwendige Rechenzeit für dieses rechenintensive Verfahren in gewissem Umfang steuern.

Bei der Programmierung des Kriging-Verfahrens mit generalisierten Kovarianzen wurde weitgehend auf das Programm-Listing des AKRIP-Programms (KAFRITSAS, BRAS 1981) zurückgegriffen. Die Programmänderungen beschränken sich im wesentlichen auf die Dateneingabe bzw. die Datenausgabe.

4 Das Untersuchungsgebiet "Obere Schwalm"

4.1 Gebietsbeschreibung

Für die exemplarische, praktische Anwendung des Kriging-Verfahrens zur Analyse von Grundwasser-Meßnetzen wurde das Untersuchungsgebiet "Obere Schwalm" ausgewählt. Das Gebiet befindet sich im Niederrheinischen Tiefland westlich der Stadt Mönchen-Gladbach nahe bei der deutsch-niederländischen Grenze (s. Abb. 4.1). Es umfaßt das unterirdische Einzugsgebiet der Schwalm bis zum Pegel Pannenmühle/Niederkrüchten mit einer Fläche von 116 km². Die Geländehöhe liegt zwischen 90 m ü.NN im Südwesten und 44 m ü.NN im Norden. Demzufolge wird das Gebiet durch die Schwalm und ihre Nebengewässer in nördlicher Richtung entwässert.

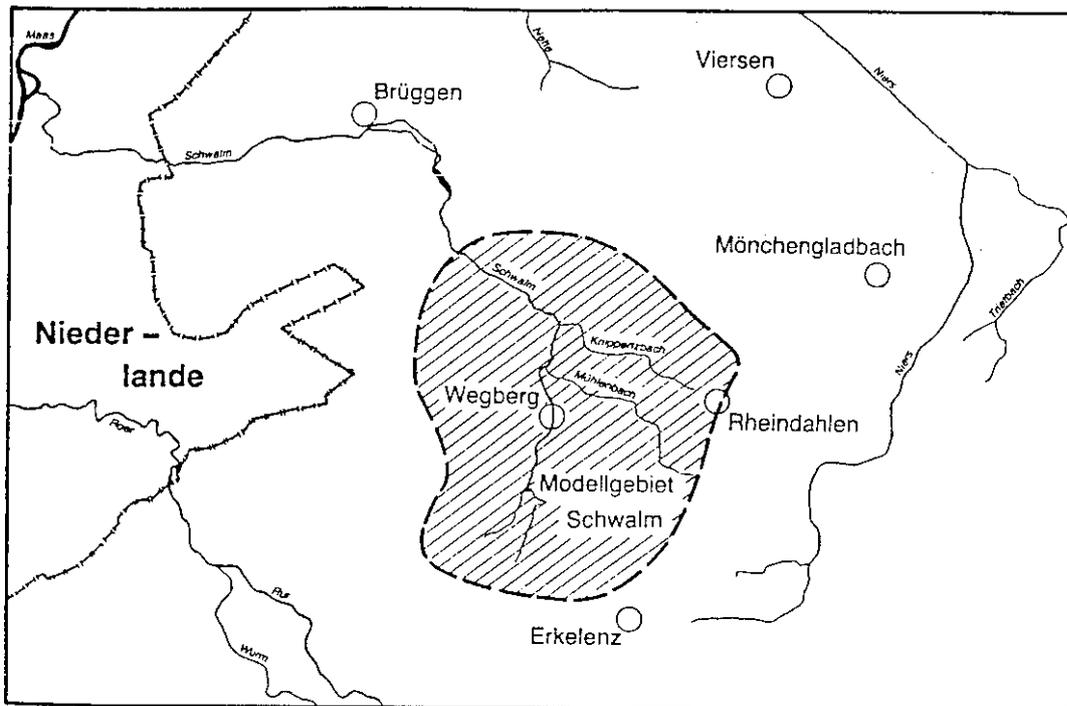


Abb. 4.1 Lage des Untersuchungsgebietes "Obere Schwalm"

Im Gebiet herrscht die landwirtschaftliche Nutzung v.a. in Form von Getreide- und Hackfruchtanbau vor. Nur auf den nach Norden häufiger werdenden Flächen mit leichten Böden (auf Sand und Sandlöß) und in den feuchten Talauen dominiert der Waldanteil. Ländliche Siedlungen, mit Ausnahme der Städte Wegberg und Rheindahlen, prägen das Bild.

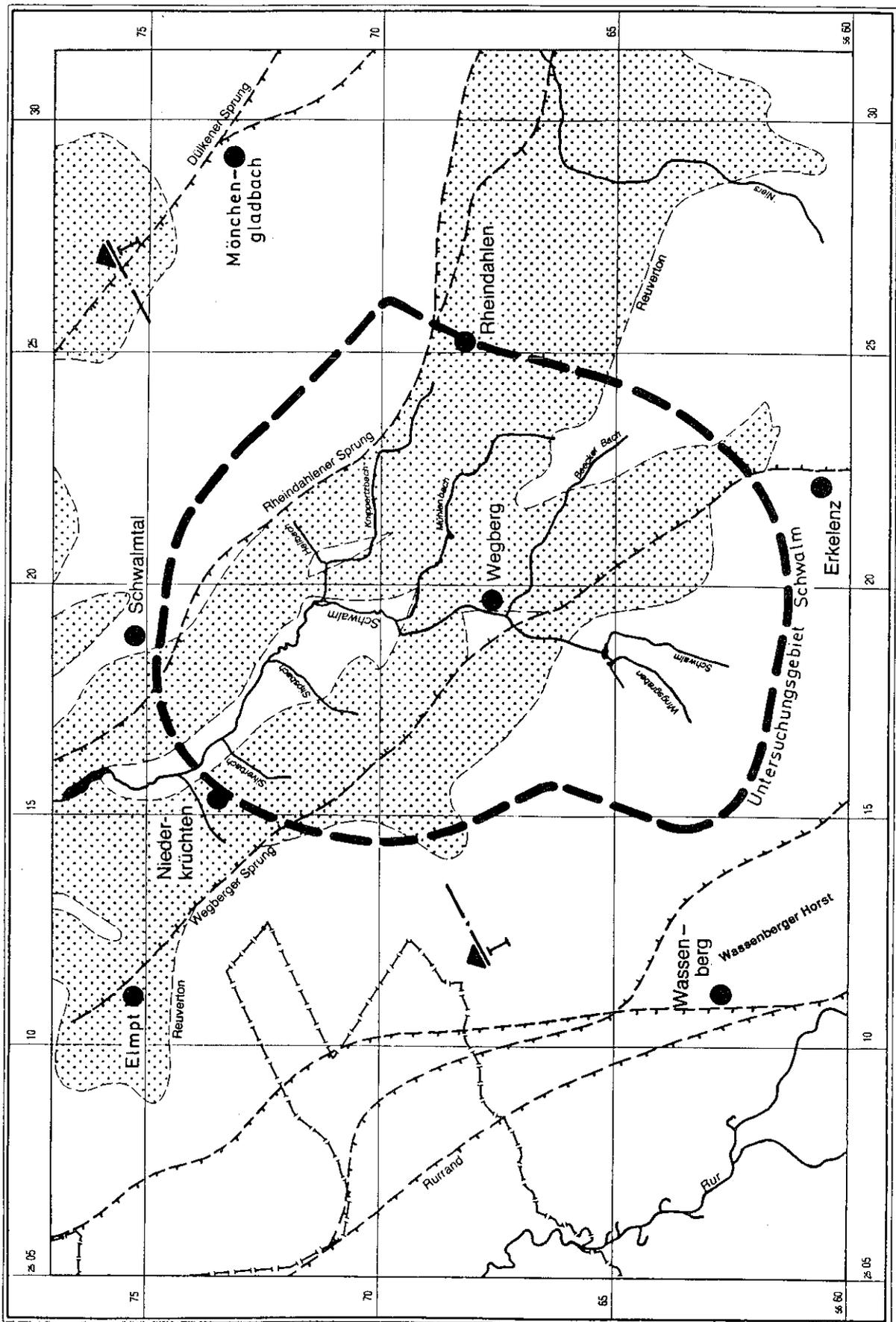


Abb. 4.2 Hydrographische und tektonische Übersicht (Erläuterung siehe Fließtext)

Naturräumlich betrachtet ist das Gebiet ein Teil der Rhein-Maas-Terrassenebene, der sogenannten Schwalm-Nette-Platte (BUNDESANSTALT FÜR LANDESKUNDE UND RAUMORDNUNG 1963). Nur der südliche Teil des Gebietes gehört zur Niederrheinischen Bucht. Entscheidend für die Abgrenzung ist die morphologisch kaum in Erscheinung tretende Lößgrenze, die sich hier zwischen Rhein und Maas quer über die niederrheinischen Terrassen hinweg zieht.

Das Untersuchungsgebiet gehört zum nordwestdeutschen Klimabereich. Es liegt an der Grenze des mehr atlantisch geprägten Niederrheinischen Tieflandes zum etwas kontinentaleren Klimabezirk der Niederrheinischen Bucht. Feuchte, milde und schneearme Winter sowie mäßig warme, niederschlagsreiche Sommer sind kennzeichnend für diesen Übergangsbereich. Die mittlere Niederschlagshöhe beträgt ca. 750 mm, die mittlere Lufttemperatur liegt bei +9.8°C (DER MINISTER FÜR UMWELT, RAUMORDNUNG UND LANDWIRTSCHAFT 1989).

Aus geologischer Sicht betrachtet, liegt der Untersuchungsraum in der Venloer Scholle, einer durch tertiäre und quartäre Bruchtektonik gebildete Teilscholle der Niederrheinischen Senkungszone (KLOSTERMANN 1983). Durch zwei Hauptverwerfungen, der Wegberger Störung und der Rheindahlener Störung (s. Abb. 4.2), wird die Venloer Scholle weiter unterteilt. Im Südwesten, jenseits der Wegberger Störung, befindet sich der Horst von Brüggen-Erkelenz. Nordöstlich davon liegt der Venloer Graben, der durch die NO-SW streichende Rheindahlener Störung in eine Tiefscholle und eine Hochscholle, zwei durch unterschiedliche Sedimentation gekennzeichnete Gebiete, geteilt wird.

Einen Überblick über die tertiäre und quartäre Schichtenfolge im Untersuchungsraum gibt das hydrogeologische Profil in Abbildung 4.3. Im Hangenden der oligozänen Meeressande folgen die miozänen Meereseinsande mit den darin eingelagerten, 10-15 m mächtigen Braunkohlenflözen Morken und Frimmersdorf. Im Pliozän wurden die fluviatilen Sedimente der Hauptkies-Serie, bestehend aus quarzreichen kiesigen Sanden sowie der ca. 5-10 m mächtige limnisch-fluviatile Reuverton abgelagert. Darüber folgen die Kiese und Sande der Hauptterrasse von Rhein und Maas. Sie wurden während der letzten Kaltzeit fast völlig durch äolische Sedimente (Löß, Sandlöß, Flugsand) wechselnder Mächtigkeit überdeckt.

Dieser geologische Aufbau mit drei Grundwasserstauern (Flöz Morken, Flöz Frimmersdorf, Reuverton) führt dazu, daß im Untersuchungsgebiet im allgemeinen vier Grundwasserstockwerke anzutreffen sind. Dadurch, daß jedoch der Reuverton in weiten Teilen in Bereich der Hochscholle (d.h. nordöstlich der Rheindahlener Störung) und des Horstes von Brüggen-Erkelenz nicht verbreitet ist, fällt dort das erste Grundwasserstockwerk mit dem nächst tieferen zusammen. Auch die Schwalm hat im Norden des Untersuchungsgebietes den Reuverton erodiert, so daß sie auch für das zweite Stockwerk die Vorflutfunktion übernimmt (LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL NRW 1988a).

Die Entwässerung des Gebietes durch die Schwalm und ihre Zuflüsse erfolgt generell in nord-nordwestlicher Richtung, parallel zum Streichen der Hauptverwerfungen. Erst nördlich des Untersuchungsgebietes wendet sich die Schwalm nach Westen. Dort hat sie in einem antezedenten Durchbruchstal die Hauptterrassebene des Brüggen-Erkelenzer Horstes durchschnitten. Dies hat zur Folge, daß oberhalb davon die Schwalm ein geringes Fließgefälle aufweist, so daß sich in den Tälern ausgedehnte Erlenbruchwälder auf Niedermoortorfen entwickeln konnten. Sie stehen heute zum überwiegenden Teil unter Naturschutz.

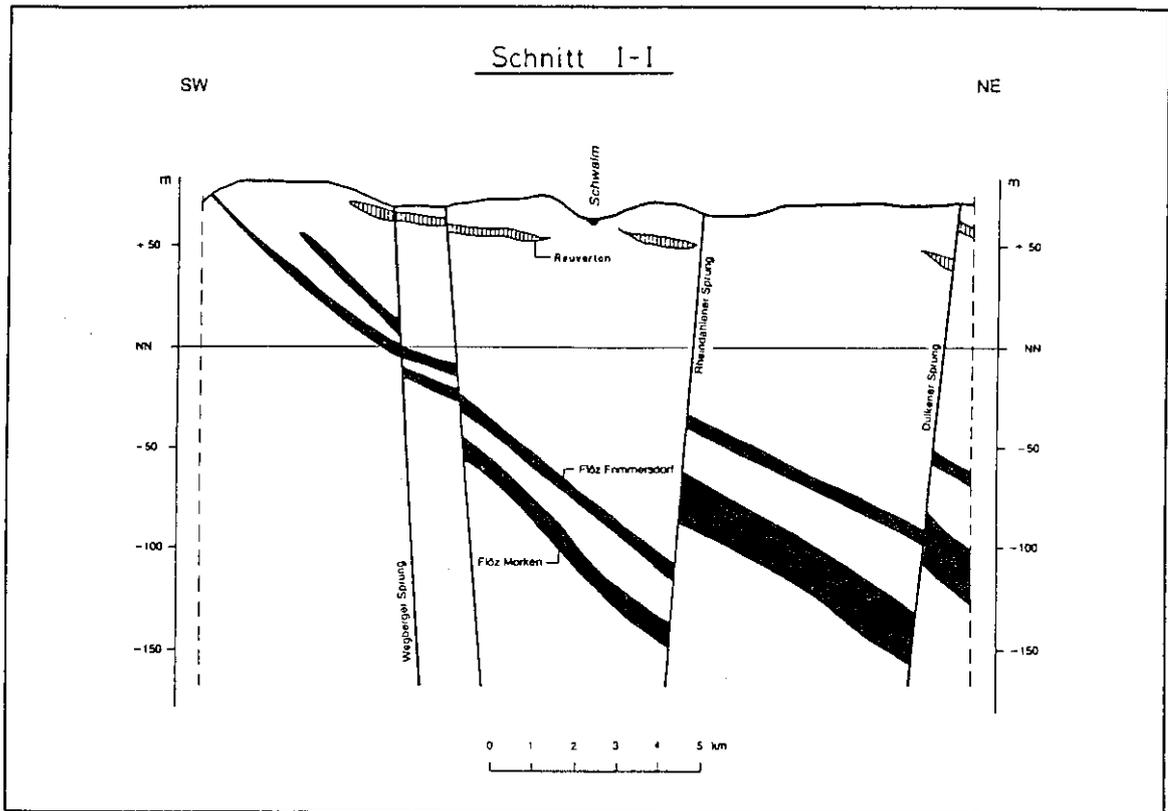


Abb. 4.3 Geologischer Schnitt (Schnittspur siehe Abb. 4.2)

4.2 Das Grundwassermeßnetz

4.2.1 Grundwasserstand

In Nordrhein-Westfalen ist die landesweite Beobachtung und Auswertung von Grundwasserständen im sogenannten Landesgrundwasserdienst (LGD) organisiert. In einer zentralen Datenbank werden die Daten der landeseigenen Grundwassermeßstellen verwaltet. Hinzu kommen Meßstellen von Wasserverbänden, Wasserwerken und Firmen.

Aus dem Untersuchungsgebiet und aus dessen näherer Umgebung standen für das obere, freie Grundwasserstockwerk die Grundwasserstandsdaten von 138 Meßstellen zur Verfügung. Verfüllt sind die Meßstellen vorwiegend im oberen, quartären Grundwasserleiter. Nur dort, wo der Reuverton nicht verbreitet ist, wurden auch die Daten von Meßstellen verwendet, die in den tertiären Leitern im Hangenden der Flöze verfüllt sind.

In der Abbildung 4.4 ist die räumliche Verteilung der Grundwassermeßstellen dargestellt. Es ist zu erkennen, daß in manchen Bereichen, vorwiegend in der näheren Umgebung von Wasserwerken, die Meßnetzdicke hoch ist, während in anderen Gebieten, insbesondere westlich der

Schwalm, größere Flächen frei von Meßstellen sind. Die mittlere Meßstellendichte liegt bei ca. 0.8 Meßstellen pro km² (Stand Oktober 1986).

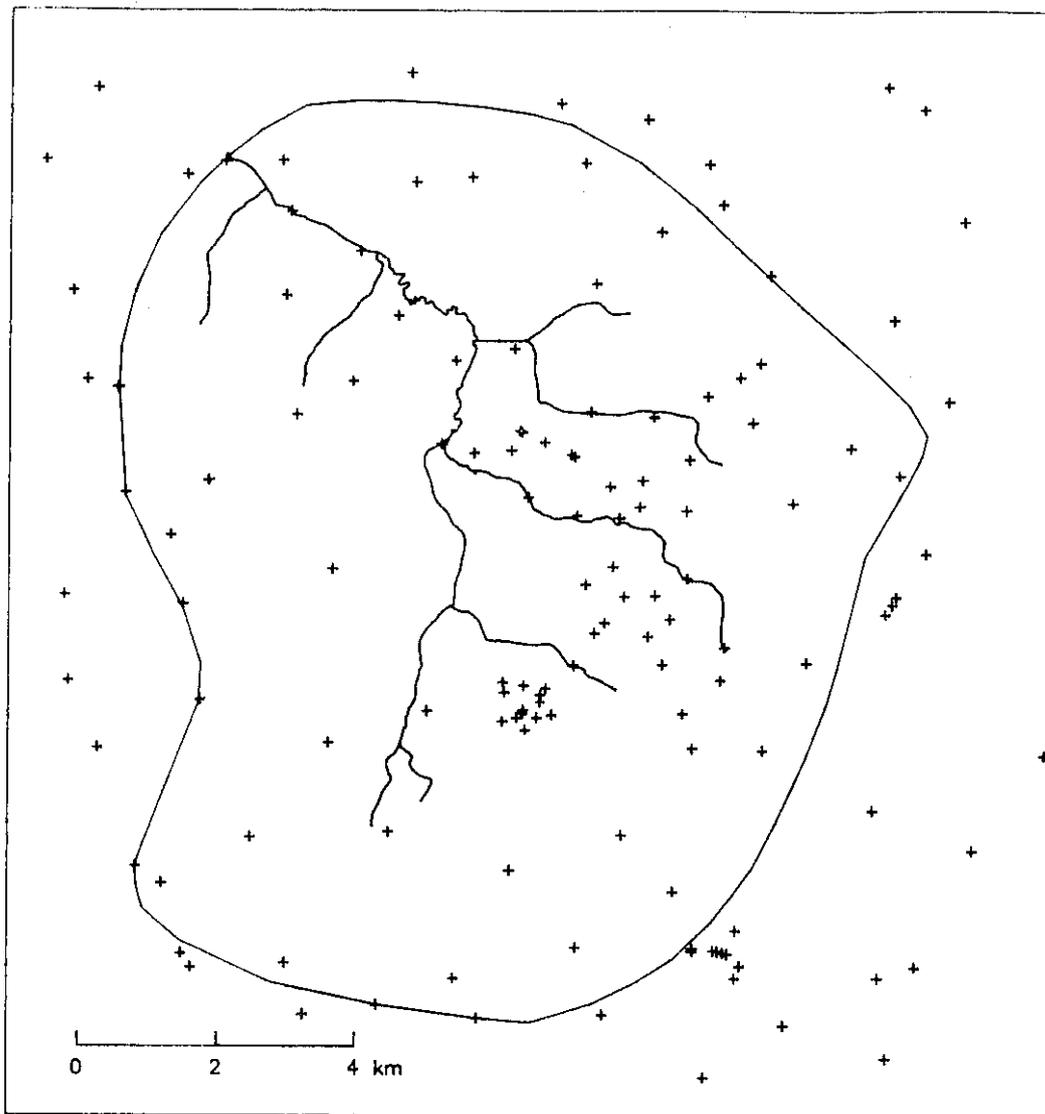


Abb. 4.4 Lage der Grundwasser-Meßstellen (+) im bestehenden, nicht optimierten Meßnetz (Stand Okt. 1986)

Die meisten Meßstellen im Untersuchungsgebiet werden monatlich beobachtet. Aber auch ein wöchentlicher, 14-tägiger oder halbjähriger Meßzyklus kommt vor. Aufgrund der geringen Anzahl von Meßlücken wurden die Daten des Oktober 1986 für die Untersuchung ausgewählt. Die Meßwerte liegen zwischen 83 m ü.NN im Südwesten und 44 m ü.NN im Norden.

In der Abbildung 4.5 ist die Grundwasserstandsganglinie einer repräsentativen Meßstelle dargestellt. Es ist zu erkennen, daß im Oktober 1986 das Grundwasser wieder einen mittleren Stand erreicht hat, nachdem in den siebziger Jahren wegen einiger Trockenjahre der Grundwasserstand deutlich abgesunken war.

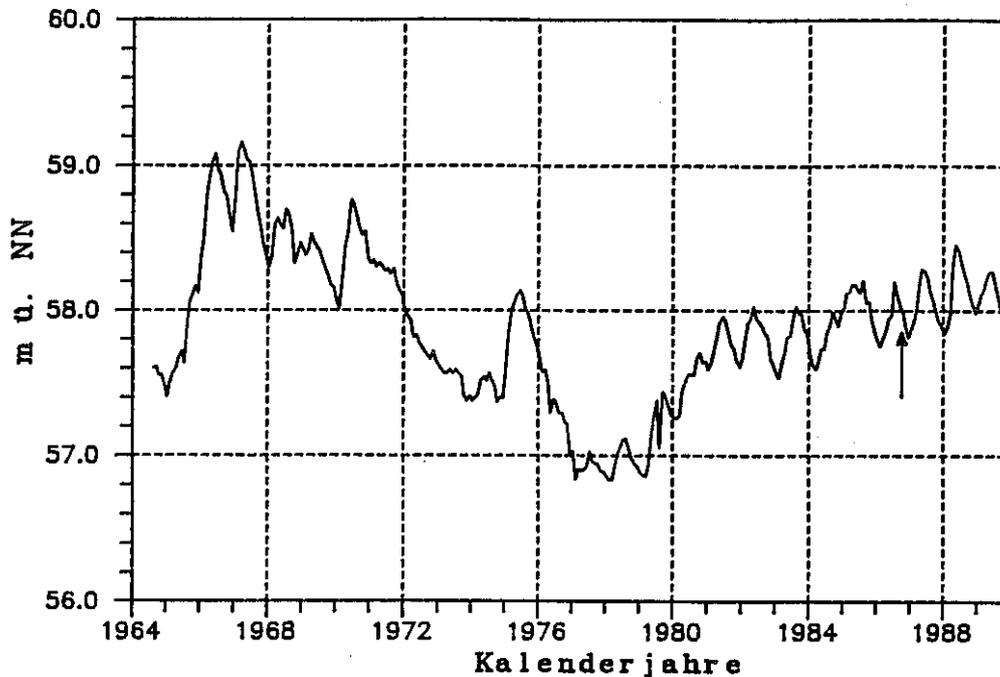


Abb. 4.5 Typische Ganglinie des Grundwasserstandes im Untersuchungsgebiet (Meßstelle Merbeck). Pfeil: Untersuchungszeitpunkt Okt. 1986

4.2.2 Grundwasserbeschaffenheit

Im Jahr 1984 wurde in Nordrhein-Westfalen damit begonnen, die Grundwasserbeschaffenheit flächendeckend zu erfassen. Dadurch sollen langfristige Veränderungen der Grundwasserbeschaffenheit, flächenhafte Belastungen (z.B. durch intensive Landwirtschaft) sowie lokale Belastungen (z.B. Deponien) erkannt werden (LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL 1985).

Im Untersuchungsgebiet und dessen Umgebung besteht dieses Meßnetz für das obere Grundwasserstockwerk aus 31 Meßstellen und Brunnen, deren Lage in der Abb. 4.6 dargestellt ist. Damit ist die Meßnetzdichte im Vergleich zum Grundwasserstands-Meßnetz wesentlich geringer. (Zum Auswahlverfahren der Meßstellen für die Erfassung der Wasserbeschaffenheit siehe LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL 1985.)

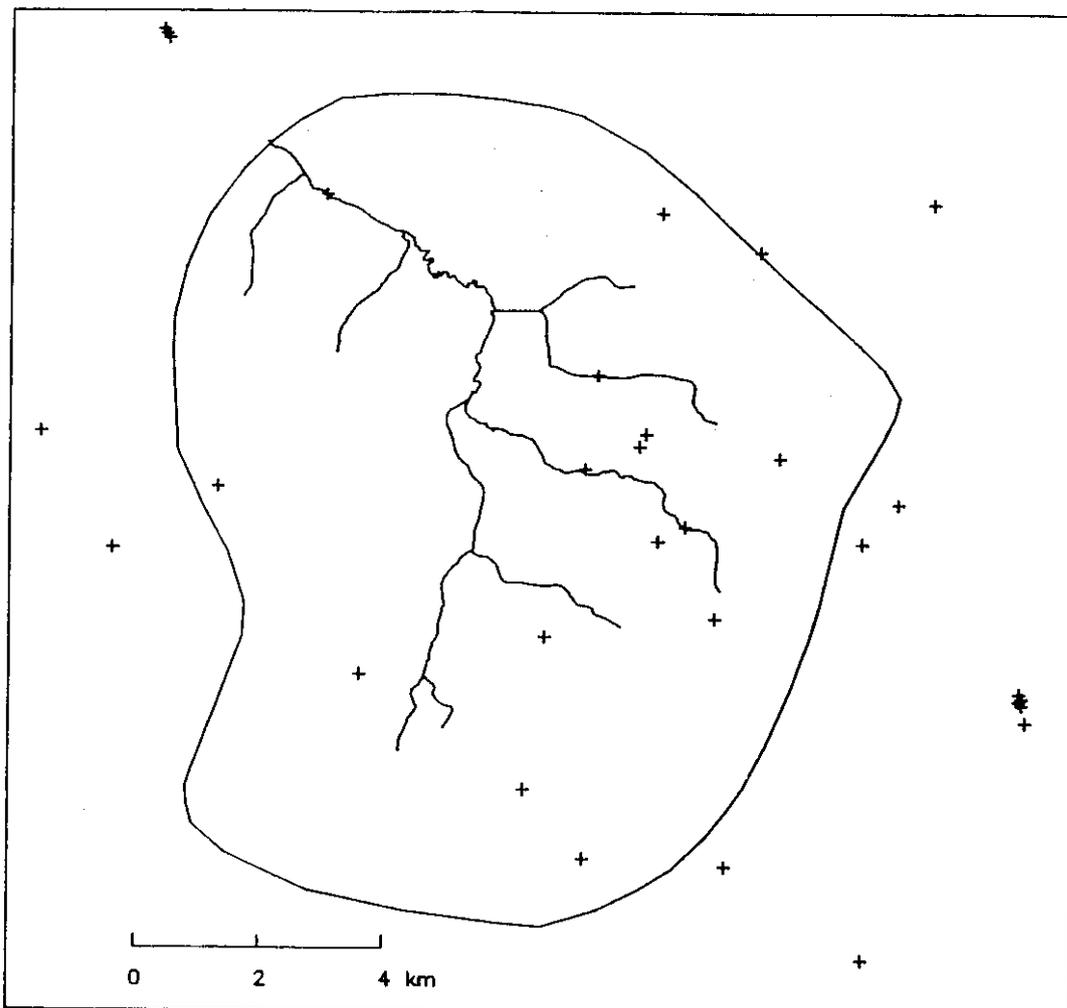


Abb. 4.6 Lage der Meßstellen (+) zur Erfassung der Grundwasserbeschaffenheit im bestehenden Meßnetz

Im Rahmen dieser Arbeit wird das Kriging-Verfahren zur Meßnetzanalyse für die Parameter el. Leitfähigkeit, pH-Wert sowie für die Kationen Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ und für die Anionen HCO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- und NO_3^- eingesetzt. Dazu werden die Mittelwerte an den einzelnen Meßstellen aus dem Zeitraum 1984-1989 verwendet. Diese Mittelwerte basieren in der Regel auf 5 bis 8 Einzelwerten. Die eingesetzten Analyse-Verfahren zur Bestimmung der o.g. Parameter sind im Bericht des LANDESAMTES FÜR WASSER UND ABFALL (1988b) aufgeführt.

Die Tabelle 4.1 gibt einen Überblick über die Meßwerte der einzelnen Parameter. Das Calcium ist mit 63 Prozent der valenzbezogenen Masse das eindeutig dominierende Kation. Auffällig sind bei den Anionen die großen Schwankungsbreiten und die hohen Maximalwerte insbeson-

dere beim Sulfat und Nitrat, die auf anthropogene Veränderungen der Grundwasserbeschaffenheit hinweisen.

Tab. 4.1 Zusammensetzung des Grundwassers im Untersuchungsgebiet (auf der Datenbasis der Meßstellen)

		Mittel (n=31)	Min	Max	Varianz
Leitfähigkeit	(mS/m)	63.1	22.2	98.0	268.0
pH-Wert		6.0	5.2	7.0	0.2
Calcium	mg/l	78.2	33.2	112.0	633.3
	meq/l	3.91			
Magnesium	mg/l	14.8	3.9	26.2	28.6
	meq/l	1.22			
Natrium	mg/l	22.3	5.6	48.0	88.6
	meq/l	1.01			
Kalium	mg/l	4.3	0.8	12.0	7.8
	meq/l	0.11			
Sulfat	mg/l	112.8	18.2	189.5	1286.3
	meq/l	2.35			
Chlorid	mg/l	64.2	15.3	96.5	288.4
	meq/l	1.81			
Hydrogencarbonat	mg/l	70.9	12.2	219.6	2848.8
	meq/l	1.16			
Nitrat	mg/l	70.3	7.8	148.9	936.2
	meq/l	1.13			

5

Analyse des Grundwasserstands-Meßnetzes

5.1 Universal Kriging

Mit dem im Kap. 4.2.1 beschriebenen Datensatz wurde zunächst das empirische Semivariogramm für verschiedene Richtungen berechnet. Sie sind in der Abbildung 5.1 dargestellt und zeigen generell den für instationäre Variable typischen parabelförmigen Anstieg. Diese Überprägung des eigentlichen Semivariogramms durch einen Driftanteil ist bei allen Richtungen, wenn auch in unterschiedlichem Maße, erkennbar. Dadurch, daß im Untersuchungsgebiet keine einheitliche Fließrichtung des Grundwassers vorhanden ist, sind in allen Richtungsachsen Wertepaare mit Driftanteil vorhanden.

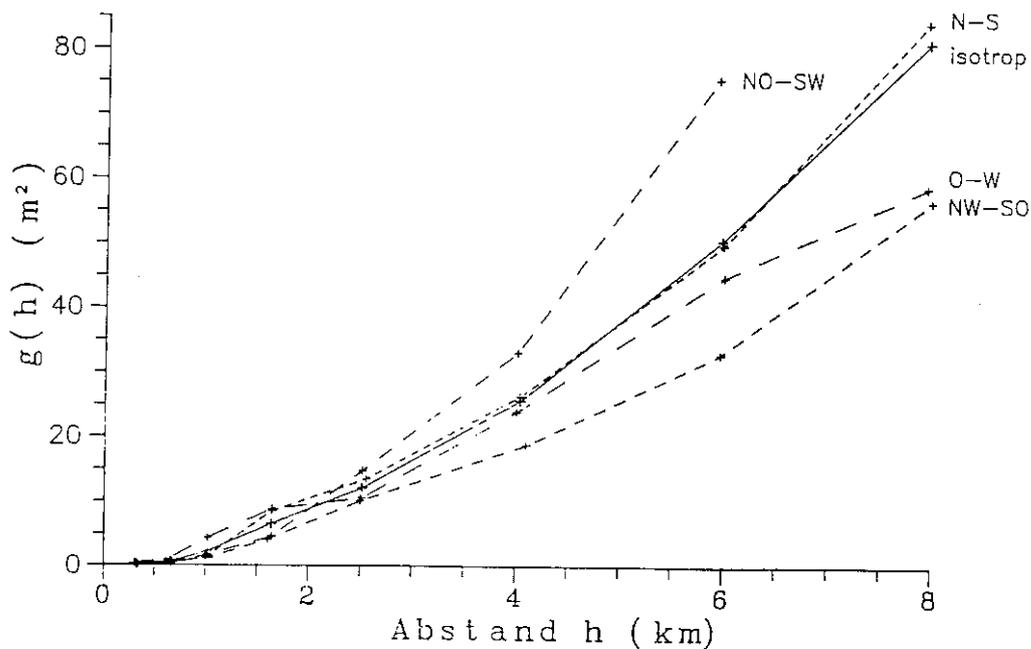


Abb. 5.1 Empirisches Semivariogramm der Grundwasserstandsdaten für verschiedene Himmelsrichtungen

Eine Unterteilung des Gebietes in Bereiche mit einheitlicher Gefällerrichtung war nicht praktikabel, da sich dadurch die Anzahl der Wertepaare und damit auch die statistische Aussagekraft des Semivariogramms sehr stark verringern würde. Dies gilt insbesondere für die richtungsgebundenen Semivariogramme.

Betrachtet man das isotrope, empirische Semivariogramm detaillierter (Abb. 5.2), so ist bei kleinen Abständen ein Driftanteil nicht oder nur zu einem geringen Grad zu erkennen. Erst bei einem Abstand von mehr als einem Kilometer tritt der Driftanteil dominierend auf. Bei geringem h überwiegt offensichtlich die stochastische Komponente. Deshalb kann die Steigung des Semivariogramms bei kleinen Abständen als Richtwert bei der Suche nach dem theoretischen Semivariogramm verwendet werden.

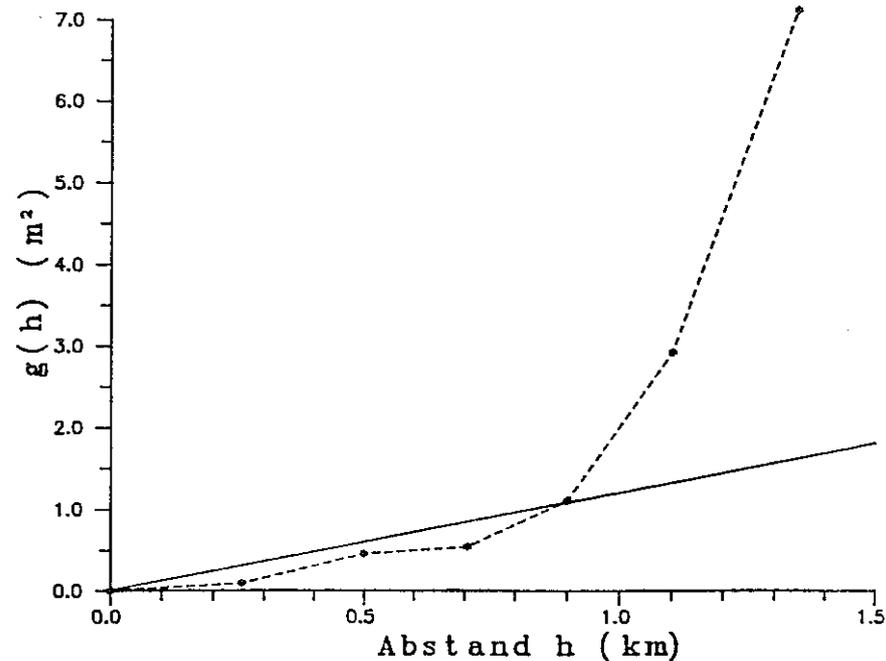


Abb. 5.2 Isotropes empirisches Semivariogramm (--) und lineares theoretisches Semivariogramm der Grundwasserstände (Okt. 1986)

Ein Nuggeteffekt ist anhand des empirischen Semivariogramms nicht nachzuweisen. Zum einen verhindert die Grundwasserströmung abrupte, kleinräumige Schwankungen des Grundwasserstandes; zum anderen tritt durch die einfache, relativ genaue Messung des Grundwasserstandes keine nennenswerte Meßfehlervarianz auf.

Auf der Grundlage des empirischen Semivariogramms wurden anschließend die in Kap. 2.1 aufgeführten Variogrammtypen mit zahlreichen Parameterkombinationen und mehreren Driftfunktionen der Kreuzprüfung unterzogen. Dieser langwierige Prozeß führte zu dem Ergebnis, daß das lineare Semivariogramm mit einer Steigung von $1.2 \text{ m}^2/\text{km}$ die besten Resultate lieferte (s. Abb. 5.2). In der Tabelle 5.1 sind die Ergebnisse der Kreuzprüfung für dieses Semivariogramm mit verschiedenen Driftfunktionen dargestellt. Darüberhinaus werden die Ergebnisse in Abhängigkeit von der Anzahl der berücksichtigten Nachbarpunkte dargestellt.

Es ist zu erkennen, daß der mittlere Fehler (MF) bei der Verwendung einer ausreichenden Anzahl von Nachbarpunkten ($n > 10$) sehr gering ist, so daß von einer verzerrungsfreien Schätzung gesprochen werden kann. Nur wenn zu wenige Nachbarpunkte in das Kriging-Gleichungssystem einbezogen werden (z.B. $n=5$), tritt im Mittel eine erhebliche Unterschätzung der Meßwerte auf.

Tab. 5.1 Ergebnisse der Kreuzprüfung mit linearem Semivariogramm (Erläuterung siehe Fließtext)

	MF [m]	MQF [m]	SMQF [-]
Einfaches Kriging			
n = 5	0.101	1.15	1.04
n = 10	0.038	0.99	0.99
n = 20	-0.001	0.99	1.00
n = 30	-0.003	0.99	1.00
Univeral Kriging (lineare Drift) $m(x)=a_0+a_1 \cdot X+a_2 \cdot Y$			
n = 5	0.093	1.18	0.91
n = 10	0.035	1.03	0.99
n = 20	-0.011	1.03	1.01
n = 30	-0.002	1.03	1.00
Universal Kriging (quadr. Drift) $m(x)=a_0+a_1 \cdot X^2+a_2 \cdot Y^2$			
n = 5	0.088	1.20	0.91
n = 10	0.028	1.03	0.98
n = 20	-0.007	1.03	1.01
n = 30	-0.001	1.02	1.00

Generell ist ein mittlerer quadratischer Fehler (MQF) von ca. einem Meter vorhanden. Auch hierbei zeigt sich, daß sich das Schätzergebnis durch die Verdoppelung der Anzahl der Nachbarpunkte von 5 auf 10 deutlich verbessert.

Der standardisierte mittlere quadratische Fehler (SMQF), der bei der Anwendung der Kriging-Technik zur Analyse von Meßnetzen besonders bedeutsam ist, liegt sehr nahe bei dem Wert eins. Dadurch ist gewährleistet, daß der theoretisch zu erwartende mit dem tatsächlichen Schätzfehler im Mittel übereinstimmt.

Zu beachten ist, daß die Schätzwerte von der Steigung des linearen Semivariogramms unabhängig sind. Dies gilt dann auch für MF und MQF. Die Standardabweichung des Schätzfehlers, berechnet nach Gl. (14) und (15), ist allerdings in hohem Maße von $g(h)$ abhängig, so daß sich der SMQF-Wert bei einer Veränderung des theoretischen Semivariogramms deutlich verändert. In der Abb. 5.3 ist die Beziehung zwischen der Steigung des linearen Semivariogramms und dem SMQF-Wert dargestellt. Bei einer zu geringen Steigung ist der theoretische Schätzfehler im Mittel zu klein, so daß SMQF stark anwächst (s. Gl. (18)). Wird die Steigung des Semivariogramms zu hoch angesetzt, dann wird die tatsächliche Unsicherheit überschätzt, so daß der SMQF-Wert unter 1 abfällt.

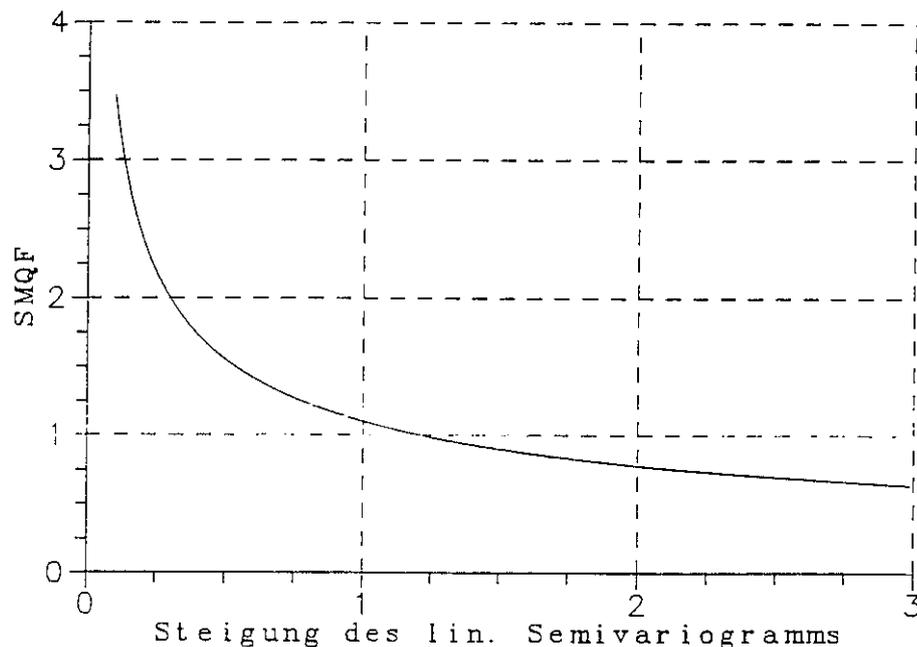


Abb. 5.3 Beziehung zwischen der Steigung des Semivariogramms und dem standardisierten mittleren quadratischen Fehler (SMQF) für die Grundwasserstands-Daten

Die in der Tabelle 5.1 aufgeführten Ergebnisse der Kreuzprüfung machen deutlich, daß im vorliegenden Fall die Verwendung einer linearen oder gar quadratischen Driftfunktion sich nicht positiv auf das Ergebnis auswirkt. Im Gegenteil: eine geringe Zunahme des MF und MQF ist festzustellen. Diese Ergebnis überrascht, da aus theoretischer Sicht bei Grundwasserständen immer von einem räumlich instationären Verhalten auszugehen ist und das empirische Semivariogramm dies auch sehr deutlich bestätigt hat (näheres siehe Kap. 7).

Aufschlußreich für die Bewertung des Ergebnisses der Kreuzprüfung ist die Darstellung der Schätzfehler an den einzelnen Meßstellen (Abb. 5.4). Mit dieser Abbildung wird deutlich, welcher Fehler bei der Interpolation auf den jeweiligen Meßpunkt anhand der Meßwerte von den benachbarten 20 Meßstellen auftritt.

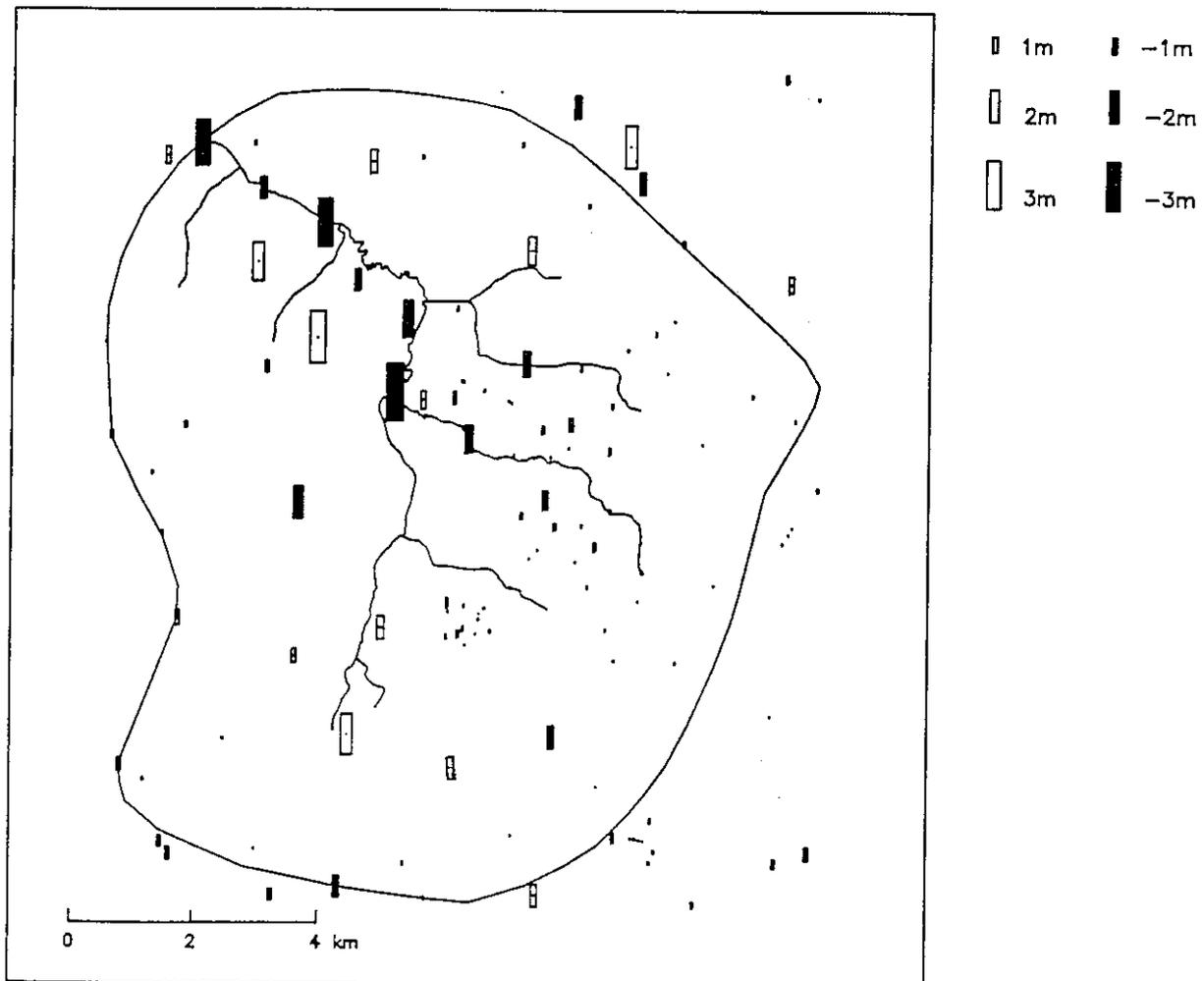


Abb. 5.4 Schätzfehler an den Meßstellen bei der Kreuzprüfung (Einfaches Kriging mit 20 Nachbarpunkten). Erläuterung siehe Fließtext

Erwartungsgemäß ist in Gebieten mit hoher Meßnetzdichte der Schätzfehler im allgemeinen kleiner als in Gebieten mit geringerer Dichte. Es gibt jedoch aus Ausnahmen von dieser Regel. So fällt auf, daß die relativ tiefen Grundwasserstände in den Flußtälern sehr deutlich, teilweise um mehrere Meter, überschätzt werden. Im Zustrombereich zum Tal tritt dagegen häufig der umgekehrte Effekt auf. Durch das Einbeziehen von Driftfunktionen in das Kriging-Gleichungssystem konnte dies nicht verbessert werden.

Den Ergebnissen der Kreuzprüfung folgend, wurde anschließend mit dem linearen Semivariogramm (Steigung: $1.2 \text{ m}^2/\text{km}$) ohne Driftfunktion und mit jeweils 20 Nachbarpunkten die Interpolation des Grundwasserstandes durchgeführt und für jeden Schätzpunkt die Standardabweichung des Schätzfehlers bestimmt.

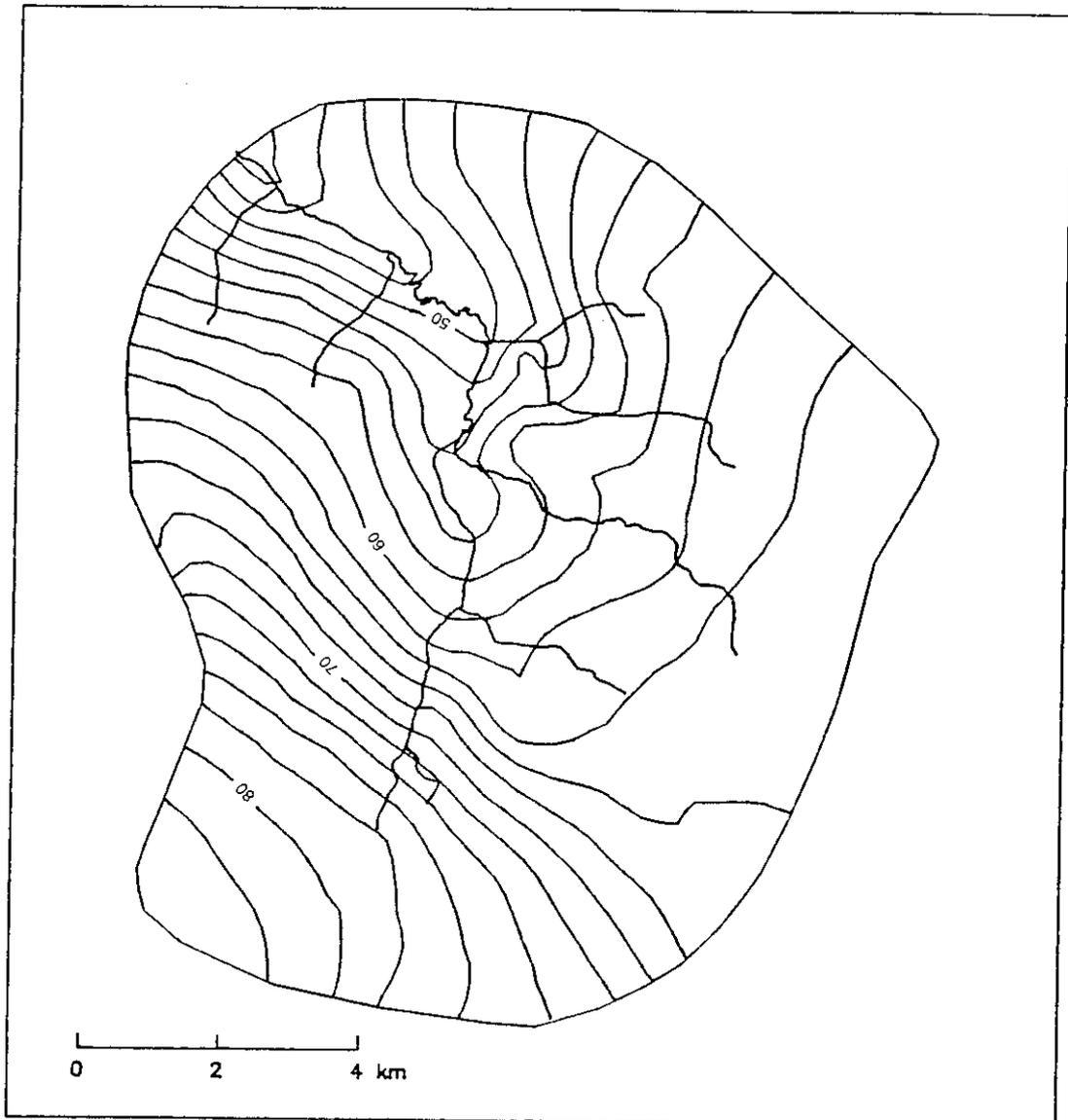


Abb. 5.5 Interpolierte Grundwasserstände in m ü. NN (Einfaches Kriging-Verfahren mit 20 Nachbarpunkten)

Dazu wurde ein quadratisches Raster mit einem Abstand der Schätzwerte von 250 Metern verwendet, so daß für insgesamt 1858 Punkte Schätzwerte zu bestimmen waren. Zusätzlich zu den 138 Meßwerten wurden entlang der Fließgewässer an 28 Punkten der mittlere Flußwasserstand vorgegeben. Dies war notwendig, um zu verhindern, daß in den Tälern bereichsweise Grundwasserstände über Flur berechnet werden.

In der Abbildung 5.5 ist das Ergebnis der Berechnung in Form von Grundwassergleichen dargestellt. Es ergibt sich ein plausibles Gleichenbild: Aus dem Horst von Brüggen-Erkelenz im Südwesten strömt das Grundwasser mit relativ hohem Gefälle auf die Schwalm und ihre Ne-

benflüsse zu. Die Vorflutwirkung der Flüsse, insbesondere am Unterlauf der Schwalm, ist deutlich ausgeprägt.

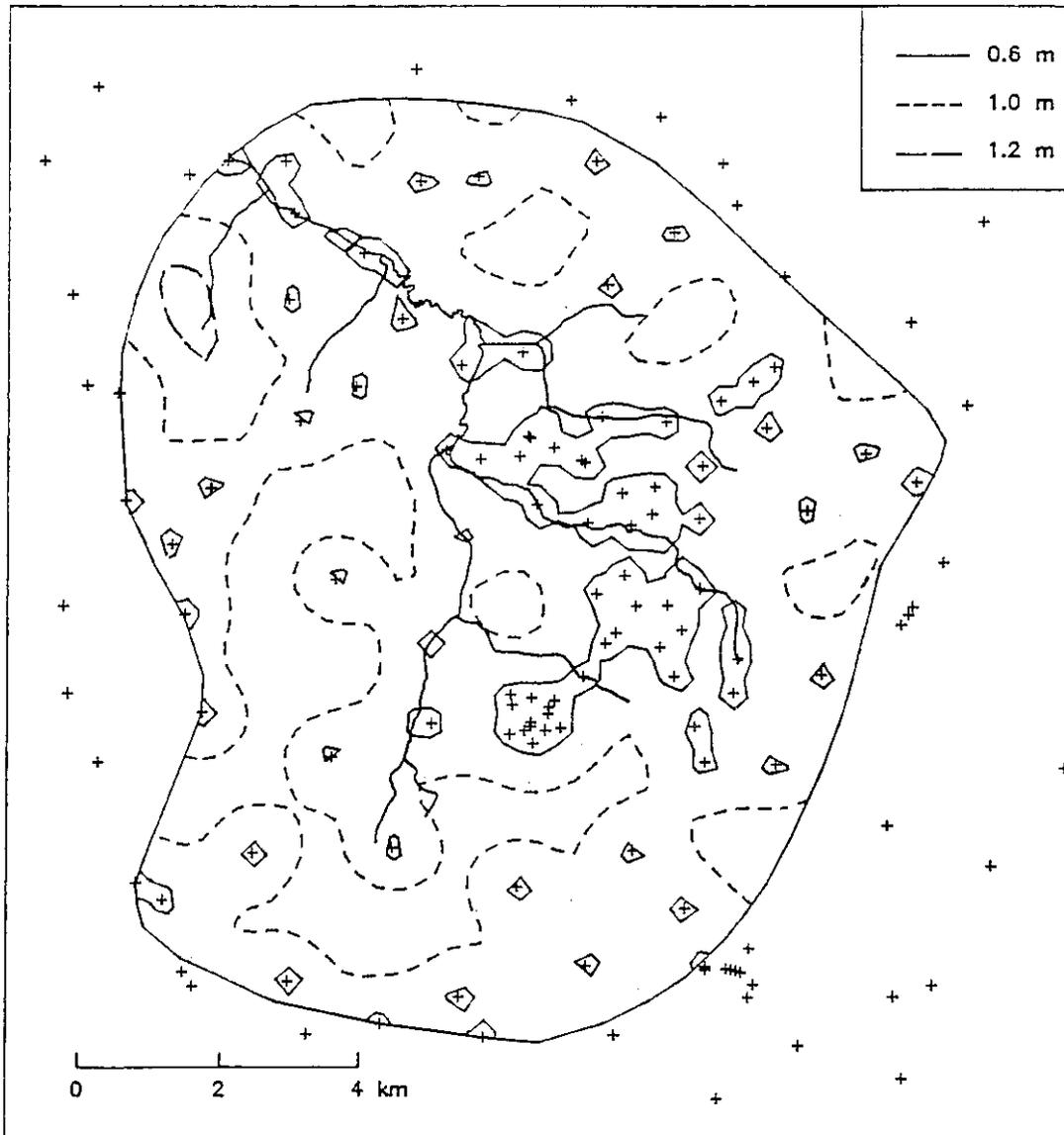


Abb. 5.6 Räumliche Verteilung des Standardschätzfehlers beim einfachen Kriging; +: Meßstelle

Die dazugehörige Standardabweichung des Schätzfehlers ist ebenfalls in Form von Isolines abgebildet (Abb. 5.6). Sie beträgt an den Meßpunkten genau null Meter (Exakte Interpolation) und steigt in Gebieten mit geringerer Meßnetzdichte auf bis zu 1.23 Meter an. Dieser Anstieg der Unsicherheit verläuft rasch, so daß bei 200 m Abstand vom Meßpunkt bereits ein Wert von 0.6 Meter auftritt. Nimmt die Entfernung vom Meßpunkt auf 600 m zu, erhöht sich die Standardabweichung des Schätzfehlers auf einen Meter. Über das gesamte Gebiet gemittelt, ergibt

sich ein Wert von 0.85 Meter. Geht man von einer Normalverteilung des Schätzfehlers am Schätzpunkt aus, beträgt die Unsicherheit im Gebietsmittel $\pm 1.7\text{m}$ (Signifikanzniveau: 0.05). Sie steigt in den Gebieten mit größeren Meßlücken auf über 2 Meter an. Zu beachten ist, daß bei diesem Verfahren außer Grundwasserstandsdaten keine weiteren Informationen verwendet werden, so daß die tatsächliche Unsicherheit eher überschätzt wird (s. Kap. 5.3 und Kap. 5.4).

5.2 Kriging mit generalisierten Kovarianzen

Wie in Kap. 3.3 beschrieben, wurde dieses Verfahren schrittweise durchgeführt. Der erste Schritt, die Bestimmung der Ordnungszahl der Driftfunktion, ergab für $k = 0, 1$ und 2 einen mittleren Rang von 1.92, 1.99 und 2.10. Das bedeutet, daß $k = 0$ (d.h. $m(x) = \text{konst.}$) in diesem Fall die am besten geeignete Ordnungszahl der Driftfunktion darstellt. Die Unterschiede in den Rangzahlen sind allerdings recht gering.

Anschließend wurden die Koeffizienten der generalisierten Kovarianzfunktion mittels schrittweiser Regression zu $C = 0$ und $A_1 = -1.32$ berechnet. Die mit diesen Parametern durchgeführte Kreuzprüfung ergab einen Mittleren Fehler (MF) von 0.0m, einen MQF-Wert von 0.99m, und einen SMQF-Wert von 0.95. Durch eine Veränderung von A_1 auf -1.2 konnte der SMQF-Wert auf 1.00 verbessert werden.

Damit ist das Ergebnis identisch mit dem des Universal Kriging-Verfahrens. Dadurch, daß in beiden Fällen kein Nuggeteffekt berücksichtigt wurde ($C = 0$) und die Steigung des Semivariogramms bzw. der generalisierten Kovarianzfunktion den selben Betrag aufweist ($g(h) = -K(h) = 1.2$), ergibt sich dasselbe Kriging-Gleichungssystem. Eine graphische Darstellung der interpolierten Grundwasserstände und der berechneten Standardabweichung der Schätzfehler erübrigt sich daher.

Festzuhalten bleibt, daß auch beim Kriging-Verfahren mit generalisierten Kovarianzen durch das Einbeziehen einer linearen ($k = 1$) oder quadratischen ($k = 2$) Driftfunktion das Resultat nicht verbessert werden kann. Damit wird durch dieses weitgehend automatisierte Verfahren die in Kap 5.1 durchgeführte Analyse des empirischen Semivariogramms bestätigt.

5.3 Cokriging unter Einbeziehung der Geländehöhe

Durch die Verwendung zusätzlicher Informationen einer zweiten Variablen (Hilfsvariable) ist es mit dem Cokriging-Verfahren möglich, die Zuverlässigkeit der Schätzung zu erhöhen, soweit beide Variablen miteinander korreliert sind. Dies ist insbesondere dann sinnvoll, wenn die Hilfsvariable an vielen Punkten im Bearbeitungsgebiet bereits bekannt ist bzw. ohne großen Aufwand an vielen Punkten gemessen werden kann.

Da sich die Grundwasseroberfläche des oberen, freien Grundwasserleiters im allgemeinen an dem Relief orientiert, kann prinzipiell von einer Korrelation zwischen Geländehöhe und Grundwasserstand ausgegangen werden. Die Geländehöhe ist in der Regel an vielen Punkten

genau bekannt (auch an den Grundwasser-Meßstellen) und darüberhinaus in Karten in Form von Isohypsen flächendeckend dargestellt. Somit kann von einer sehr guten Datengrundlage dieser Hilfsvariable gesprochen werden.

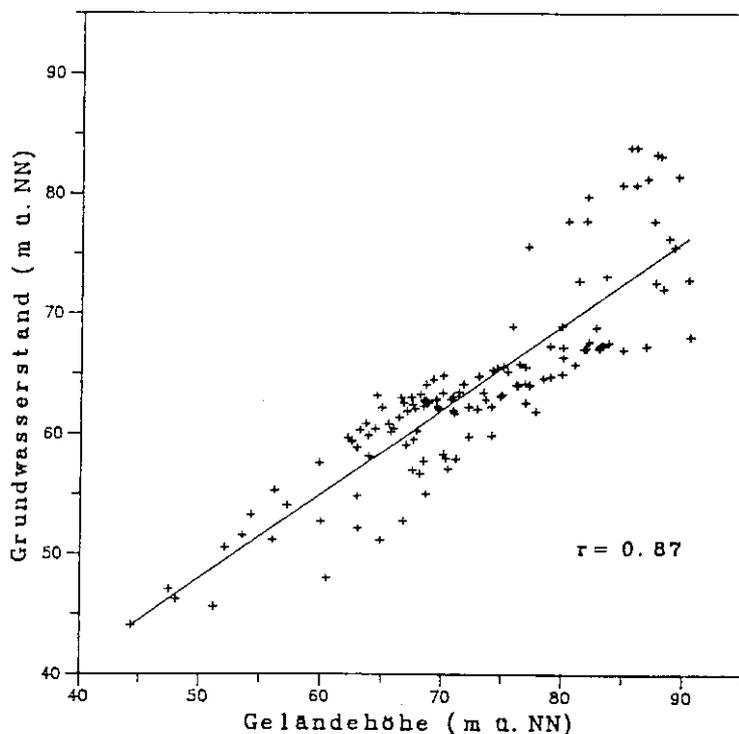


Abb. 5.7 Beziehung zwischen Geländehöhe und Grundwasserstand im Untersuchungsgebiet (n=138)

Erheblich erleichtert wird die Bearbeitung dann, wenn die Geländehöhe nicht nur in Form von Karten, sondern auch in digitaler Weise vorhanden ist. Im vorliegenden Fall konnte auf das Digitale Höhenmodell DHM 25, das für Nordrhein-Westfalen flächendeckend die Geländehöhe in einem 50m · 50m Raster beinhaltet, zurückgegriffen werden.¹⁾

In der Abbildung 5.7 wurde für das Untersuchungsgebiet der Grundwasserstand gegen die Geländehöhe an den 138 Meßstellen aufgetragen. Mit einem Korrelationskoeffizient von $r = 0.87$ liegt eine enge, signifikante Beziehung zwischen beiden Größen vor.

Das Semivariogramm der Geländehöhe an den Meßstellen zeigt einen annähernd linearen Verlauf (Abb. 5.8). Demnach wurde ein theoretisches Semivariogramm mit einer konstanten Steigung von $14 \text{ m}^2/\text{km}$ gewählt. Diese im Vergleich zu den Grundwasserständen mehr als 10-fach höhere Steigung wird durch die größere Unstetigkeit im Raum hervorgerufen.

¹⁾ "Digitales Geländemodell des Landes Nordrhein-Westfalen". Verwertung genehmigt am 3.7.1989 unter AZ. 33-3615.1 (S 913/89) durch das Landesvermessungsamt Nordrhein-Westfalen.

Steigung von $14 \text{ m}^2/\text{km}$ gewählt. Diese im Vergleich zu den Grundwasserständen mehr als 10-fach höhere Steigung wird durch die größere Unstetigkeit im Raum hervorgerufen.

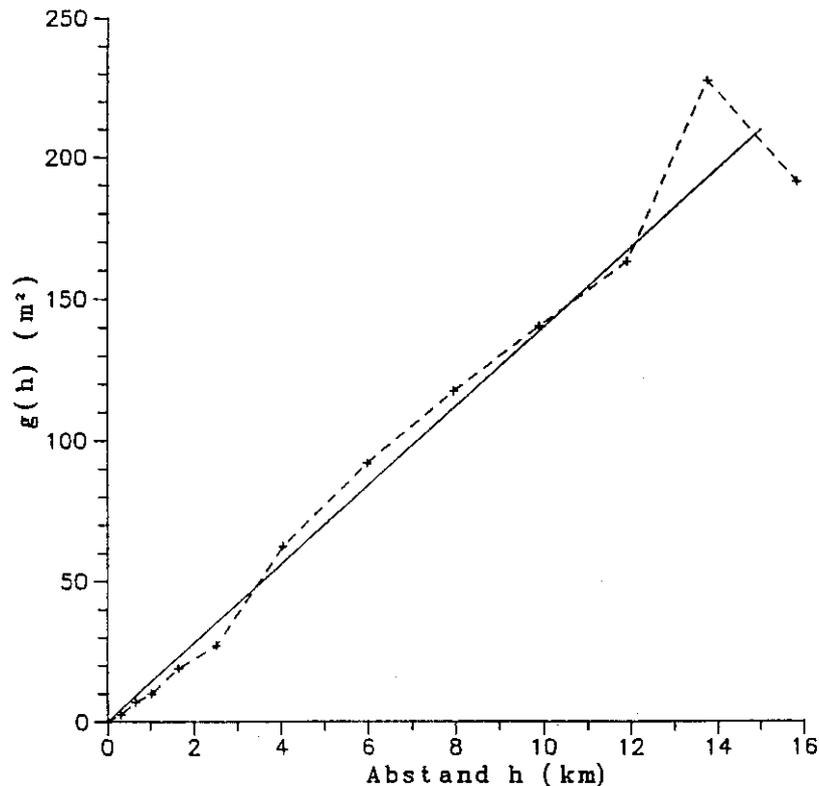


Abb. 5.8 Empirisches (--) und theoretisches Semivariogramm der Geländehöhe

Die Kreuzprüfung ergab dann einen Mittleren Fehler von -0.16m . In dem recht hohen MQF-Wert von 3.78m kommt wiederum die vergleichsweise große räumliche Variabilität der Geländehöhe zum Ausdruck. Der SMQF-Wert von 1.18 liegt, wie der Mittlere Fehler, im akzeptablen Bereich.

An dem parabelförmigen Verlauf des Kreuz-Semivariogramms (Abb. 5.9) ist die Anwesenheit einer Drift zu erkennen. In Anlehnung an die Vorgehensweise beim Semivariogramm des Grundwasserstandes wurde ein lineares theoretisches Kreuz-Semivariogrammes gewählt und dessen Steigung über die Kreuzprüfung bestimmt. Das beste Ergebnis ergab sich bei einer Steigung von $2.3\text{m}^2/\text{km}$ ($\text{SMQF}=0.99$). Die Bedingung von Gl. 49 ist damit erfüllt.

Die Kreuzprüfung wurde mit den jeweils nächstgelegenen 20 Nachbarpunkten durchgeführt. Die Grundwasserstände dieser Meßpunkte, deren Geländehöhe sowie die Geländehöhe an dem zu schätzenden Punkt wurden jeweils für die Kreuzprüfung herangezogen.

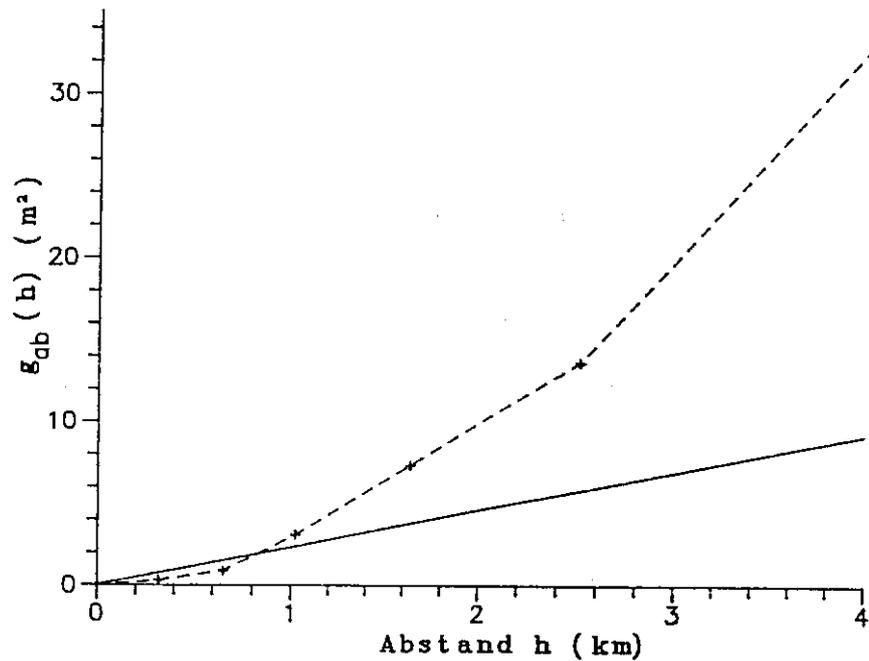


Abb. 5.9 Empirisches (--) und theoretisches Kreuz-Semivariogramm (Grundwasserstand, Geländehöhe)

Damit konnte der Mittlere Quadratische Fehler von 0.99m beim univariaten Kriging auf 0.86m reduziert werden. Der mittlere Fehler blieb mit 0.02m sehr gering, so daß weiterhin von einer verzerrungsfreien Schätzung gesprochen werden kann. Noch deutlicher wird die erzielte Verbesserung, wenn man die Schätzfehler an den einzelnen Meßpunkten betrachtet (Abb. 5.10). Der größte Schätzfehler hat sich gegenüber dem einfachen Kriging-Verfahren von 3.56m (vgl. Abb. 5.4) auf 2.96m verringert. Die großen, systematischen Überschätzungen des Grundwasserstandes an den Meßpunkten in den Flußtälern treten durch die Verwendung der Geländehöhe nicht mehr auf.

Zur Interpolation des Grundwasserstandes wurden die Daten aus dem digitalen Höhenmodell im Punkteabstand von 250m verwendet. Das bedeutet, daß zusätzlich zu den Meßwerten des Grundwasserstandes 1858 Werte der Geländehöhe zur Interpolation herangezogen wurden. Dabei wurden für jeden Schätzpunkt die 20 nächstgelegenen Grundwassermeßstellen sowie die 9 benachbarten Höhenpunkte verwendet.

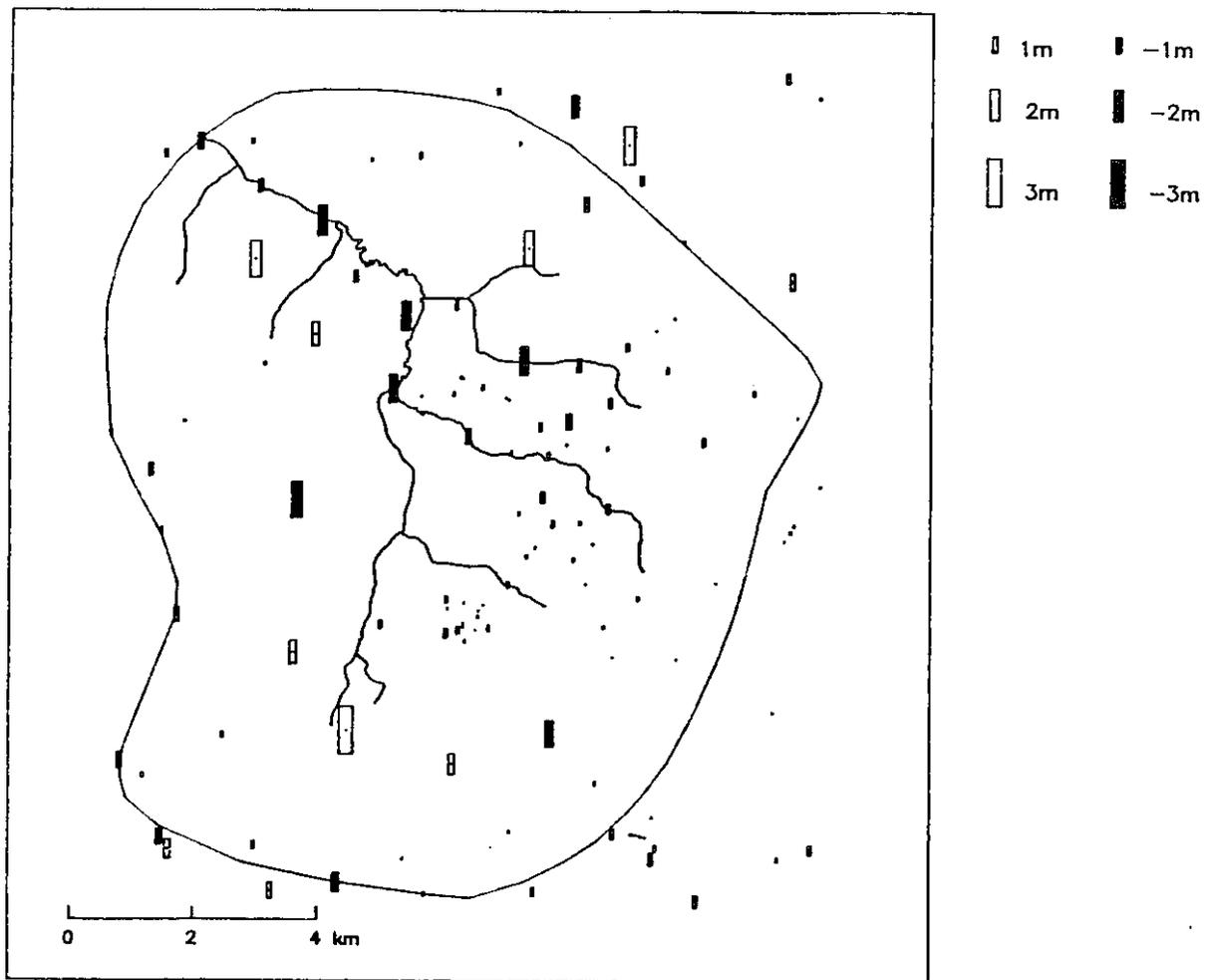


Abb. 5.10 Schätzfehler an den Meßpunkten bei der Kreuzprüfung mit dem Cokriging-Verfahren (20 Nachbarpunkte)

Das in Form von Grundwassergleichen dargestellte Schätzergebnis (Abb. 5.11) ist in weiten Teilen, insbesondere im südlichen Untersuchungsgebiet, nahezu identisch mit dem des einfachen Kriging-Verfahrens. Dadurch, daß sich die "rauhere" Geländeoberfläche etwas auf die Grundwasseroberfläche durchpaust, wird das Gleichenbild insgesamt unruhiger. Dies gilt vor allem für die Gebiete, bei denen die Grundwasseroberfläche und die Geländeoberfläche in ihrem Verlauf nicht übereinstimmen. Im Norden des Untersuchungsgebietes, östlich der Schwalm ist das der Fall, so daß es dort an einzelnen Stellen zu einem hydraulisch unplausiblen Gleichenbild kommt.

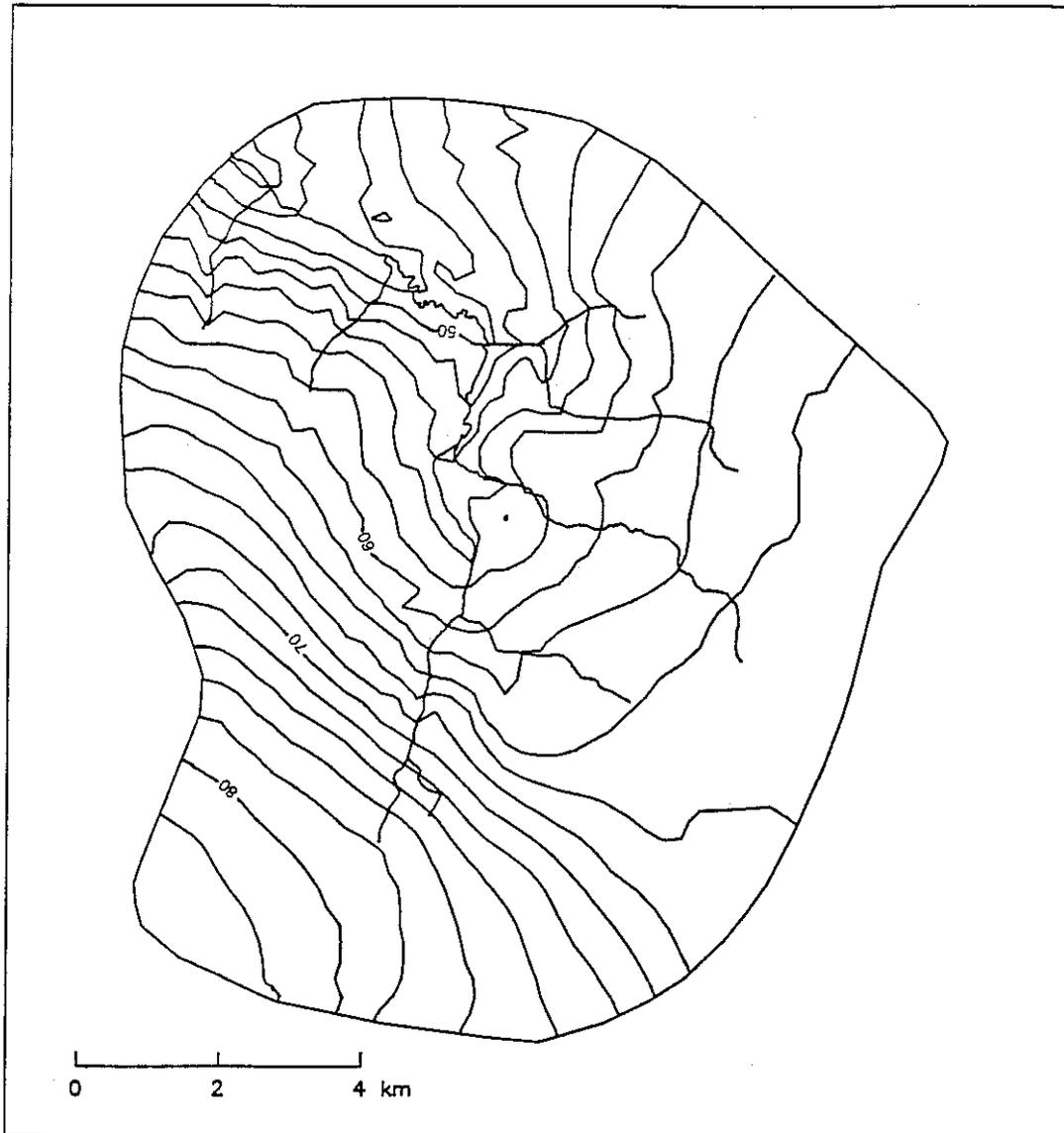


Abb. 5.11 Schätzung des Grundwasserstandes (m ü. NN) mit dem Cokriging-Verfahren.

Durch den zusätzlichen Informationsgehalt der Hilfsvariable wird die Standardabweichung des Schätzfehlers verringert (Abb. 5.12). Der Maximalwert beträgt nun 1.17m, das Gebietsmittel wird von 0.85m (einfaches Kriging) auf 0.77m reduziert.

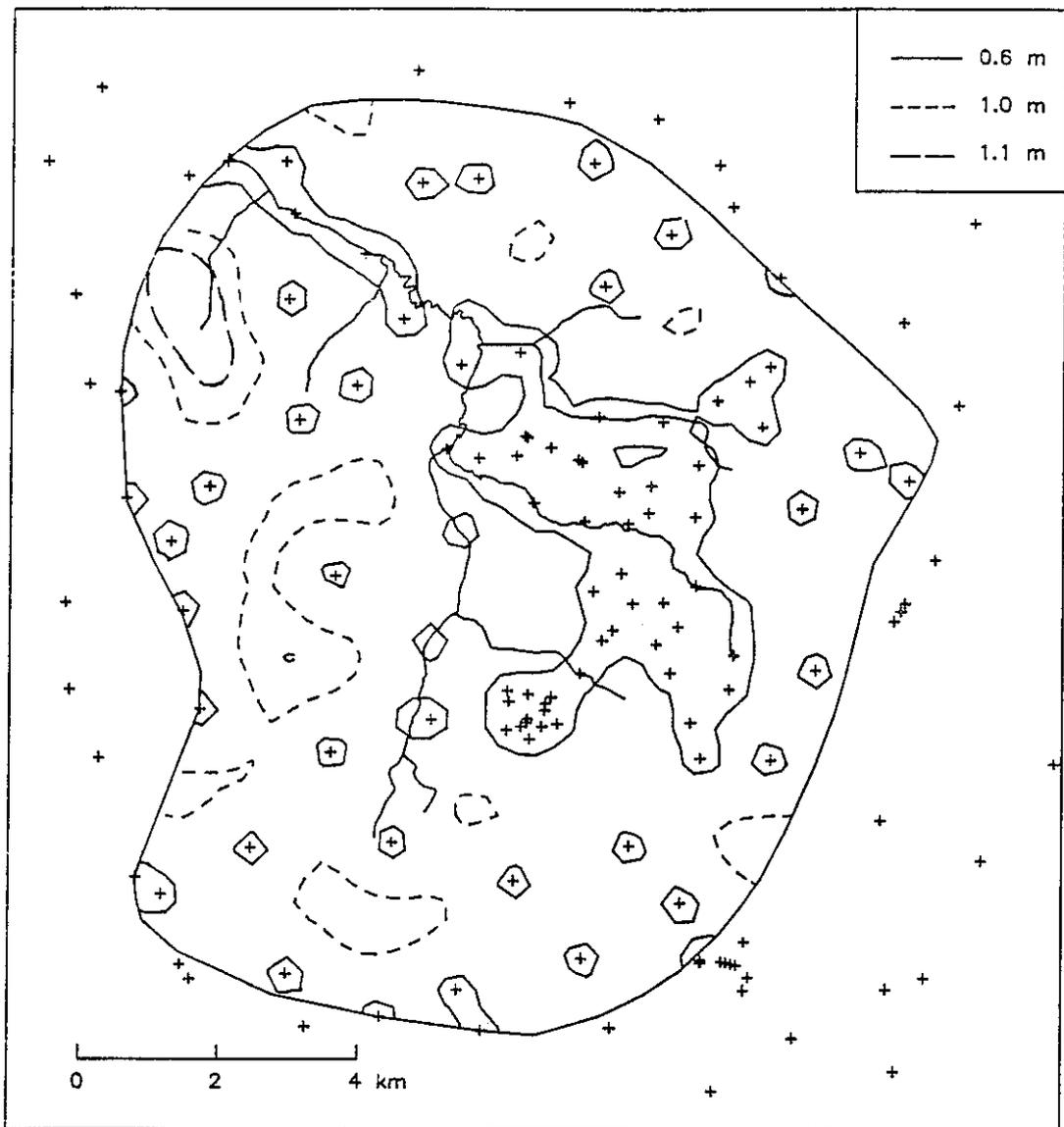


Abb. 5.12 Räumliche Verteilung des Standardschätzfehlers beim Cokriging-Verfahren; +: Meßstelle.

5.4 Kriging in Kombination mit einem Grundwassermodell

5.4.1 Modellaufbau, Daten, Simulation

Um weitere hydrologische und geologische Informationen bei der Analyse des Meßnetzes nutzen zu können, wurde das in Kap. 3.5.2 beschriebene Finite-Elemente-Modell eingesetzt. Dazu wurde ein Modellnetz, bestehend aus 419 Knoten und 390 Elementen, entworfen (s. Abb. 5.13).

Das Modellgebiet ist deckungsgleich mit dem bisherigen Untersuchungsgebiet, d.h. es umfaßt das unterirdische Einzugsgebiet der Schwalm bis zum Pegel Pannenmühle.

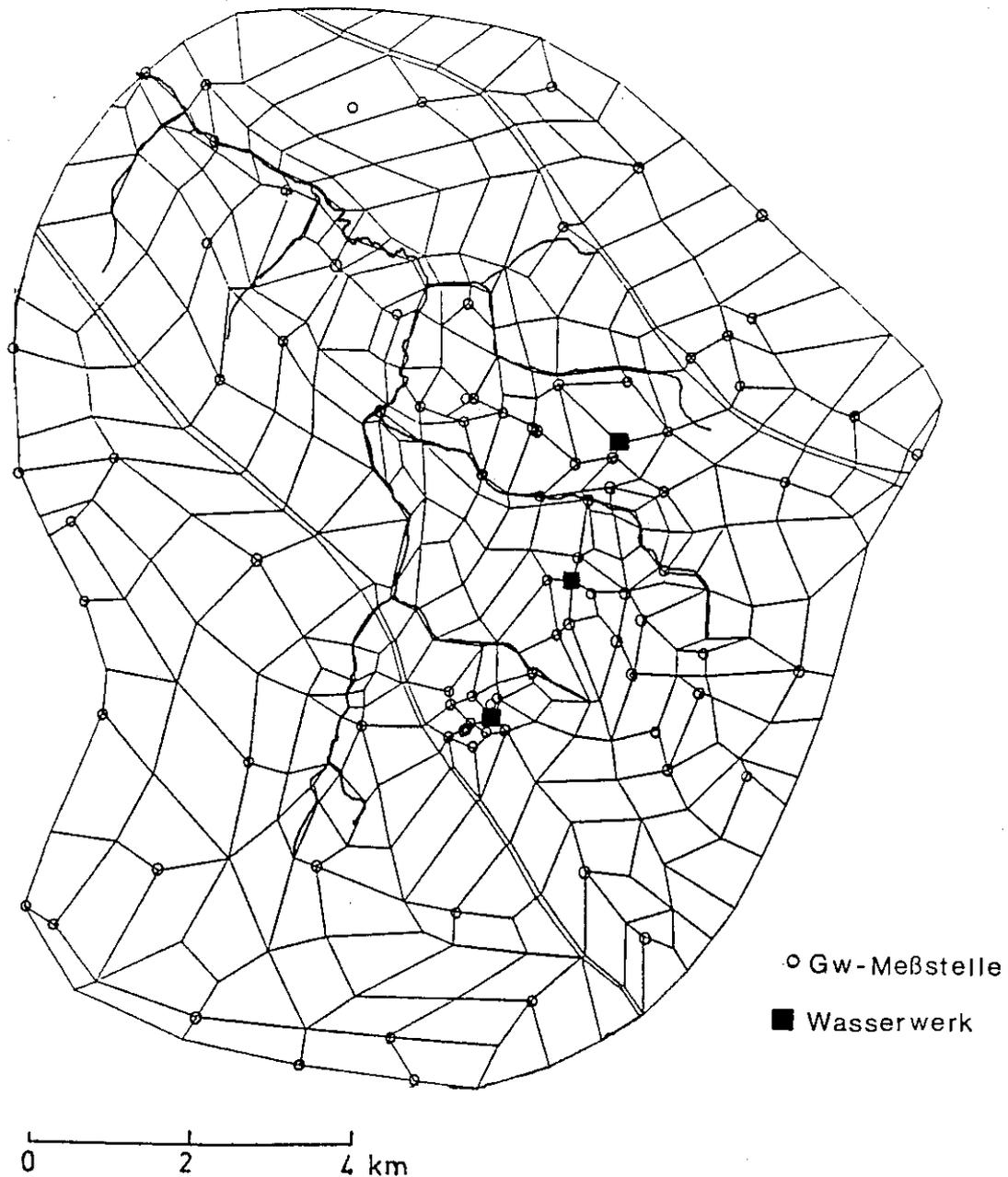


Abb. 5.13 Modellnetz des Grundwassermodells

Bei der Positionierung der Modellknoten wurden die Fließgewässer, die geologischen Hauptverwerfungen und die Grundwasserentnahmestellen berücksichtigt. Der überwiegende Teil der Grundwassermeßstellen wurde ebenfalls mit Modellknoten belegt. Nur in Gebieten mit einer

sehr hohen Meßstellendichte wurden einige Meßstellen ausgespart, da sonst das Modellnetz zu dicht geworden wäre.

Die Modellbasis des Einschicht-Modells bildet die Oberfläche des Reuvertons. Dort, wo dieser erodiert ist, wurde als Modellbasis die Schichtgrenze zwischen der Hauptterrasse und der pliozänen Hauptkiesserie (vgl. Abb. 4.2 u. 4.3) gewählt. Die Mächtigkeit des modellierten Aquifers liegt größtenteils zwischen 5 Meter und 20 Meter.

Da der Modellrand auf die Grundwasserscheide gelegt wurde, konnte als Randbedingung $Q=0$ (kein Abstrom bzw. kein Zustrom über den Rand) gesetzt werden. Nur am westlichen Modellrand wurde an einigen Randknoten zur Stabilisierung des Lösungsverfahrens Wasserstände vorgegeben. Die an zahlreichen Stellen gemessenen mittleren Flußwasserspiegel (SCHWALMVERBAND 1986) wurden auf die Flußknoten des Modells interpoliert und als feste Potentiale angesetzt.

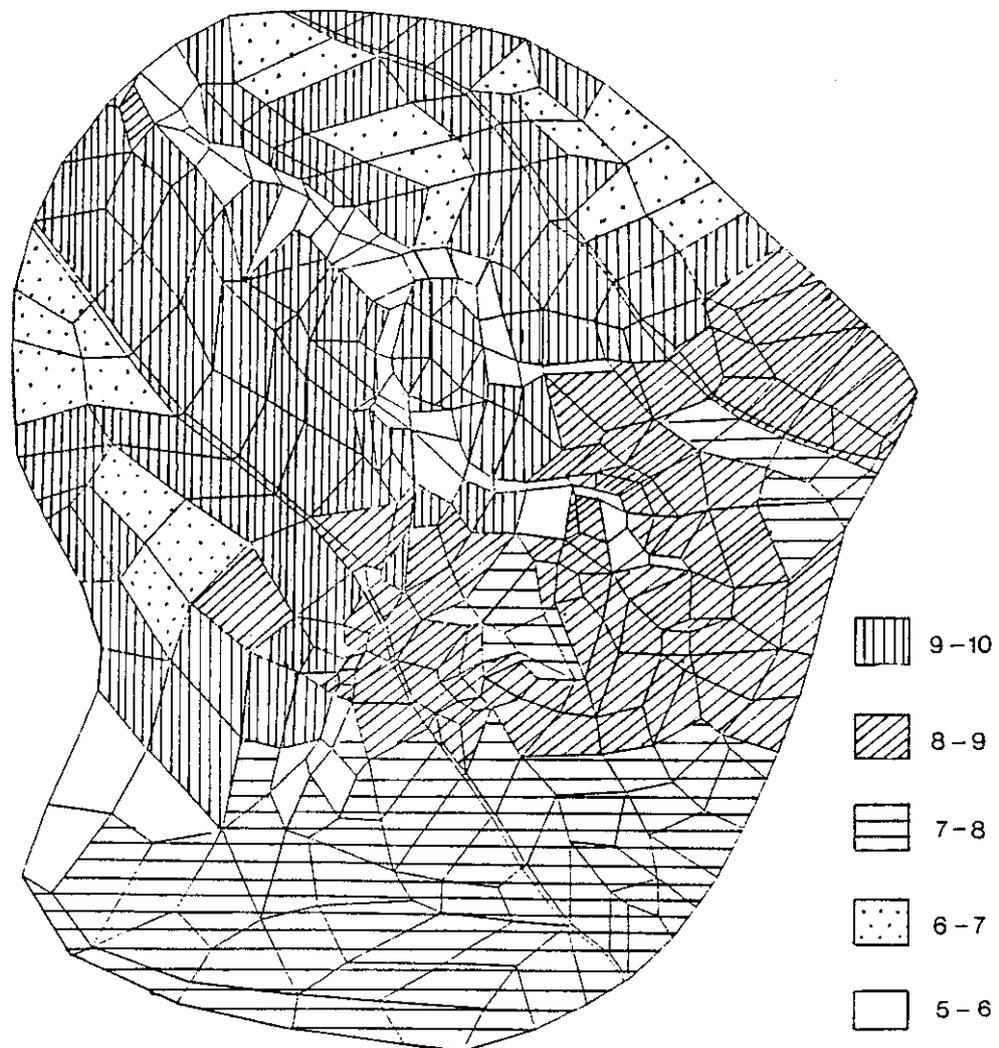


Abb. 5.14 Grundwasserneubildung in $l/s \cdot km^2$, bestimmt nach DORHÖFER/JOSOPAIT (1980)

Durch Grundwasserentnahmen wurden im Jahr 1986 dem Aquifer ca. 90 l/s entzogen. Davon entfiel der Hauptanteil auf drei Wasserwerke zur öffentliche Wasserversorgung (s. Abb. 5.13).

Die Grundwasserneubildung wurde flächendifferenziert nach dem Verfahren von DORHÖFER/JOSOPAIT (1980) bestimmt. Hierbei werden Teilgebieten je nach Bodenart (z.B. Sand, lehmiger Sand, Lehm) und Landnutzung (z.B. Nadelwald, Laubwald, Acker) mittlere jährliche Verdunstungshöhen zugeordnet. Die Differenz aus mittlerer Niederschlagshöhe und Verdunstungshöhe ergibt nach der Wasserhaushaltsgleichung die Abflußhöhe im Teilgebiet. Durch das Einbeziehen der Reliefenergie und des Anteils an bebauter Fläche wird der Anteil des Direktabflusses abgetrennt, so daß schließlich der die Grundwasseroberfläche erreichende Niederschlagsanteil übrigbleibt.

In der Abbildung 5.14 ist das Ergebnis des Verfahrens für das Modellgebiet dargestellt. Die bewaldeten, mit nassen Torfböden versehenen Talauen zeigen eine geringe Grundwasserneubildung, während bei den sandigen, waldfreien Gebieten eine Neubildungsrate von bis zu 10 l/s · km² berechnet wird. Im Mittel beträgt die Grundwasserneubildung ca. 8.2 l/s · km² (= 258mm). Eine Analyse der Abflußganglinie des Schwalmpegels Pannemühle, bei der der grundwasserbürtige Abflußanteil graphisch abgetrennt wurde, ergab, daß dieser Wert im plausiblen Bereich liegt.

Dadurch, daß die tieferen Grundwasserstockwerke durch Grundwasserentnahmen und vor allem durch die Sumpfungsmaßnahmen der benachbarten Braunkohlentagebaue stark beansprucht werden (LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL NRW 1988b), tritt generell eine flächenhafte Aussickerung aus dem quartären Grundwasserleiter in die Tiefe auf. Modellsimulationen mit dem großräumigen Grundwassermodell "Venloer Scholle" (LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL NRW 1991), das alle Grundwasserstockwerke in ihrem gekoppelten Verhalten simuliert, ergaben, daß mit einer mittleren Leakagerate von 1.2 l/s · km² im Schwalmgebiet gerechnet werden kann.

Bei der Festlegung der k_f -Werte des Aquifers konnte auf Ergebnisse von Pumpversuchen und Körnungsanalysen zurückgegriffen werden. Für das Gebiet östlich des Wegberger Sprungs wurde daraufhin ein k_f -Wert von $1 \cdot 10^{-3}$ m/s, westlich davon ein Wert von $2 \cdot 10^{-4}$ m/s angenommen.

Mit diesen Eingangsdaten wurde eine stationäre Simulationsrechnung durchgeführt. Das Gleichbild der Grundwasserstände ist in Abbildung 5.15 dargestellt. An den Meßstellenpunkten tritt eine durchschnittliche Abweichung des gemessenen von dem simulierten Grundwasserstand von 1.2 m auf. Die maximale Abweichung beträgt 2.99 m. Dabei ist zu beachten, daß auf eine Modelleichung, d.h. eine Anpassung der Modellergebnisse an die Meßwerte durch Variation der Eingangsdaten (v.a. k_f -Werte), bewußt verzichtet wurde. Das Ziel dieser Modellierung ist, von den Grundwasserstandsdaten unabhängige Informationen in physikalisch sinnvoller Weise bei der Analyse des Meßnetzes zu verwenden.

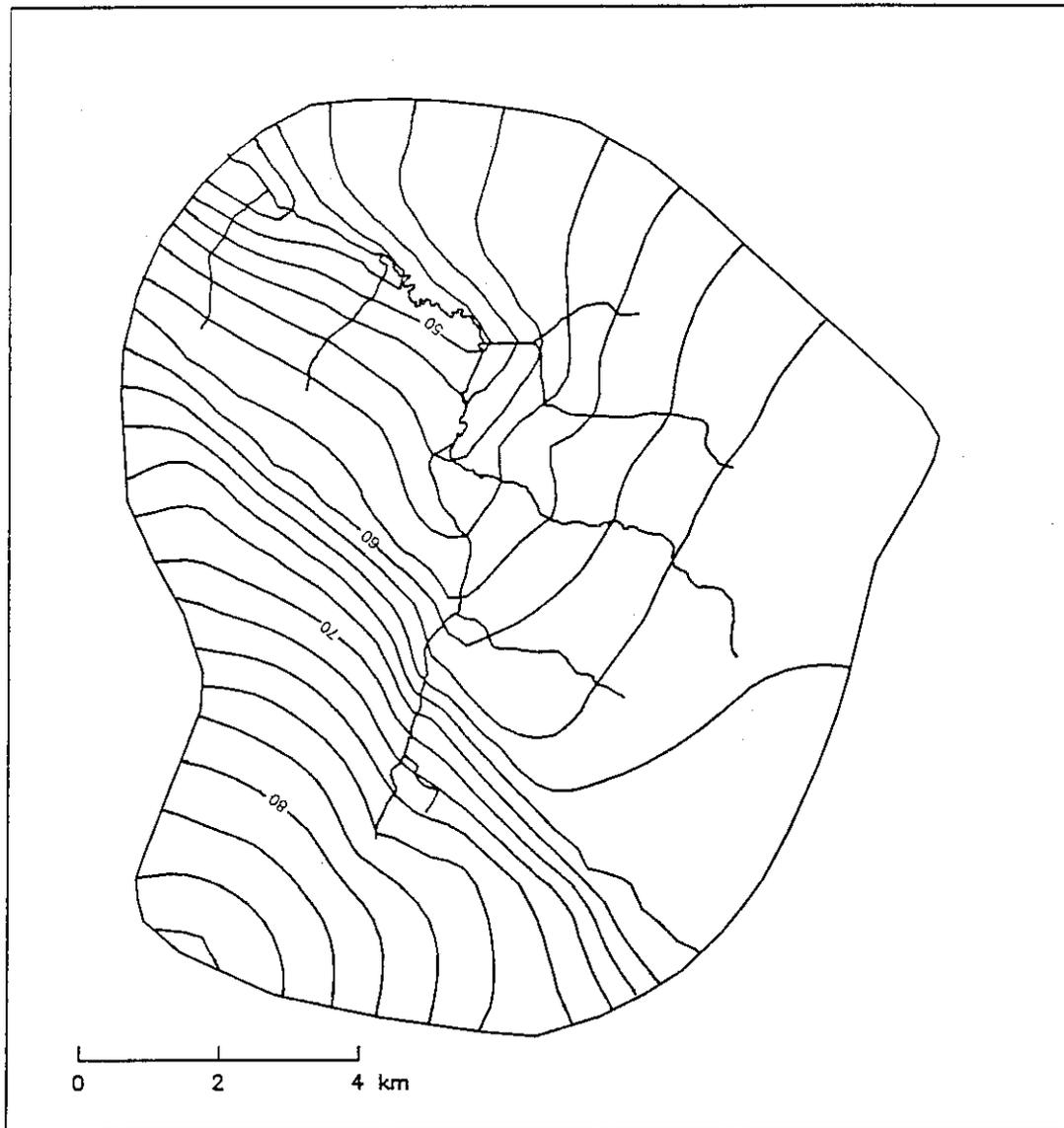


Abb. 5.15 Ergebnis der Modellrechnung: Grundwassergleichen in m ü.NN

5.4.2 Kriging mit den Residuen

Im Anschluß an die Modellsimulation wurde das Semivariogramm der Differenzen zwischen Meßwert und Modellwert an den Meßstellen (Residuen) berechnet (s. Abb. 5.16). Im Vergleich zu dem Semivariogramm der Grundwasserstände (vgl. Abb. 5.1) weist es eine wesentlich geringere Steigung auf. Ein Driftanteil, der sich in einem parabelförmigen Anstieg bemerkbar machen würde, ist nicht mehr vorhanden. Das bedeutet, daß der deterministische Anteil in den Grundwasserstandsdaten durch die Modellrechnung vollständig eliminiert werden konnte.

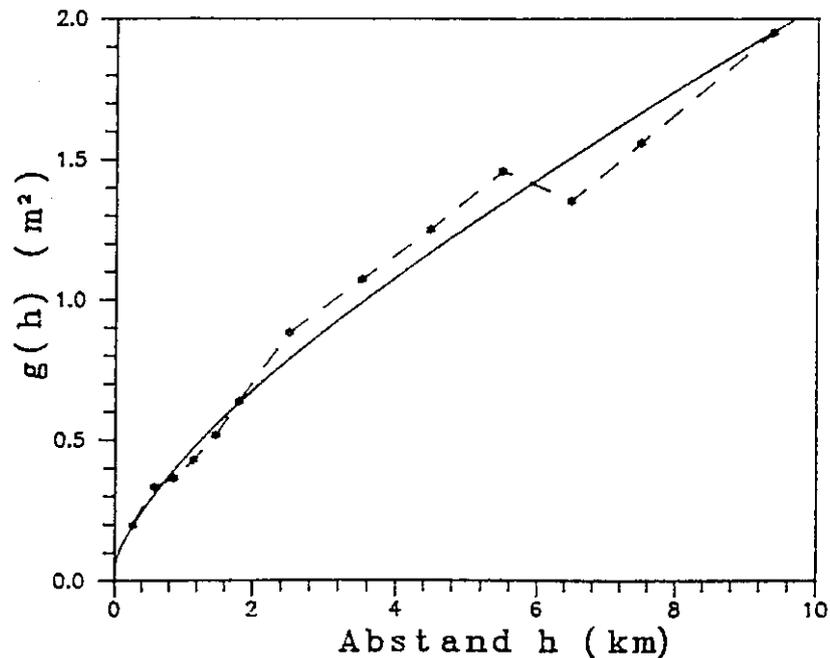


Abb. 5.16 Empirisches (--)und theoretisches Semivariogramm der Residuen

Ein geringer Nuggeteffekt von ca. 5 cm^2 ist zu vermuten. Er könnte auf geringe Fehler bei der Wasserstandsmessung oder beim Höhennivellement der Meßpunkthöhe hinweisen. Die Gründe dafür könnten aber auch in den Vereinfachungen bei der Modellrechnung, wie z.B. der Annahme einer rein horizontalen Grundwasserströmung, liegen.

An das empirische Semivariogramm ließ sich sehr gut ein theoretisches Semivariogramm mit der folgenden Potenzgleichung anpassen:

$$g(h) = 0.38 \cdot h^{0.72} + 0.05 \quad \text{für } h > 0$$

$$g(h) = 0.05 \quad \text{für } h = 0$$

Mit diesem Semivariogramm ergab die Kreuzprüfung einen Mittleren Fehler von 0.001 m , einen Mittleren Quadratischer Fehler von 0.78 m bei einem SMQF-Wert von 1.15 . Auch bei der Betrachtung der Schätzfehler an den Meßpunkten (Abb. 5.17) ist noch eine leichte Verbesserung gegenüber dem Cokriging-Ansatz festzustellen.

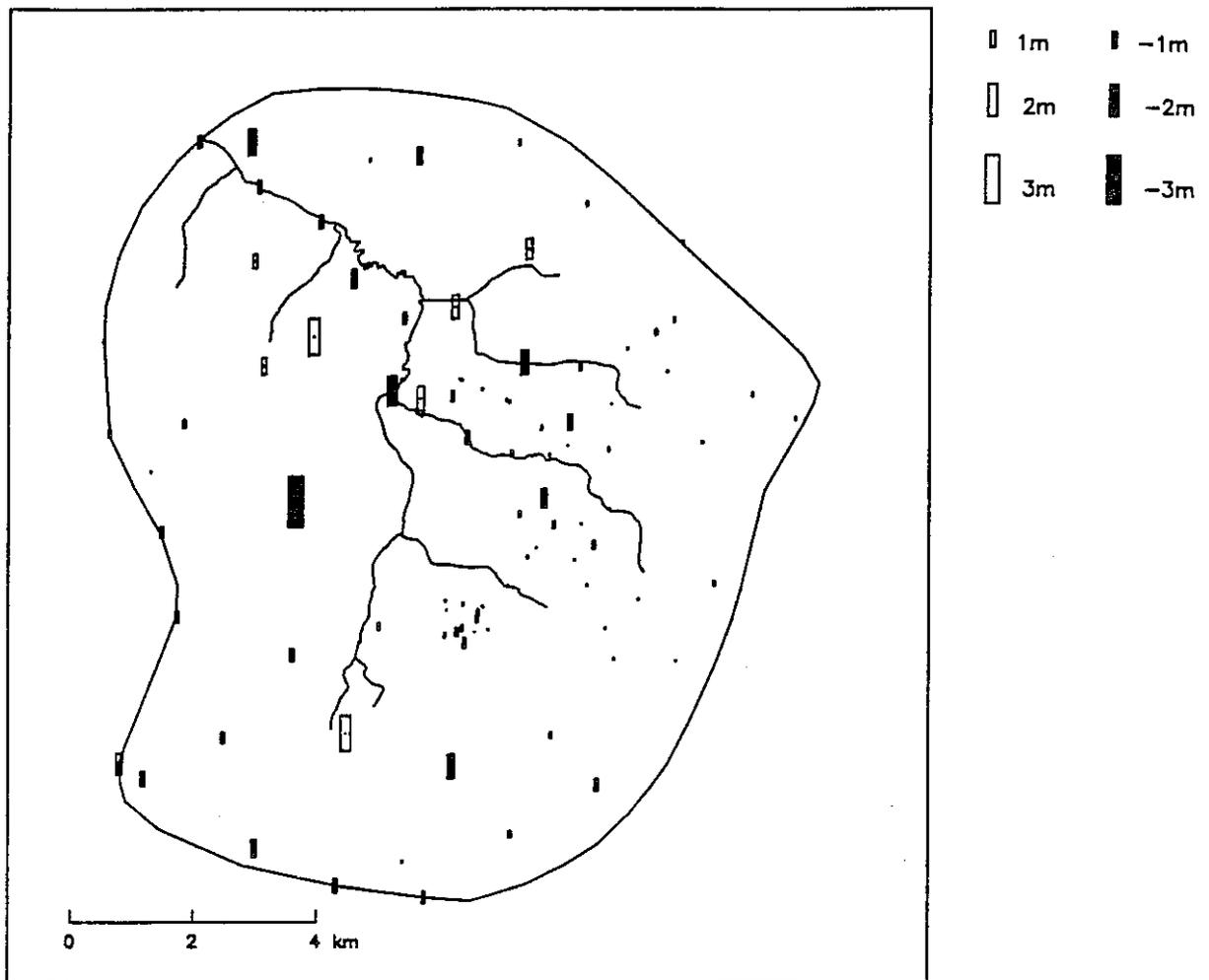


Abb. 5.17 Schätzfehler an den Meßpunkten bei der Kreuzprüfung (Kriging mit den Residuen)

Bei der Berechnung der Standardabweichung des Schätzfehlers an 1858 Schätzpunkten macht sich die geringere Steigung des Semivariogramms deutlich bemerkbar (Abb. 5.18). Der Maximalwert in Gebieten mit geringer Meßstellendichte beträgt nur noch 0.75 m (einfaches Kriging: 1.23 m). Das Gebietsmittel liegt bei 0.6 m und hat sich damit gegenüber dem einfachen Kriging-Verfahren um 0.25 m (= 30%) verringert.

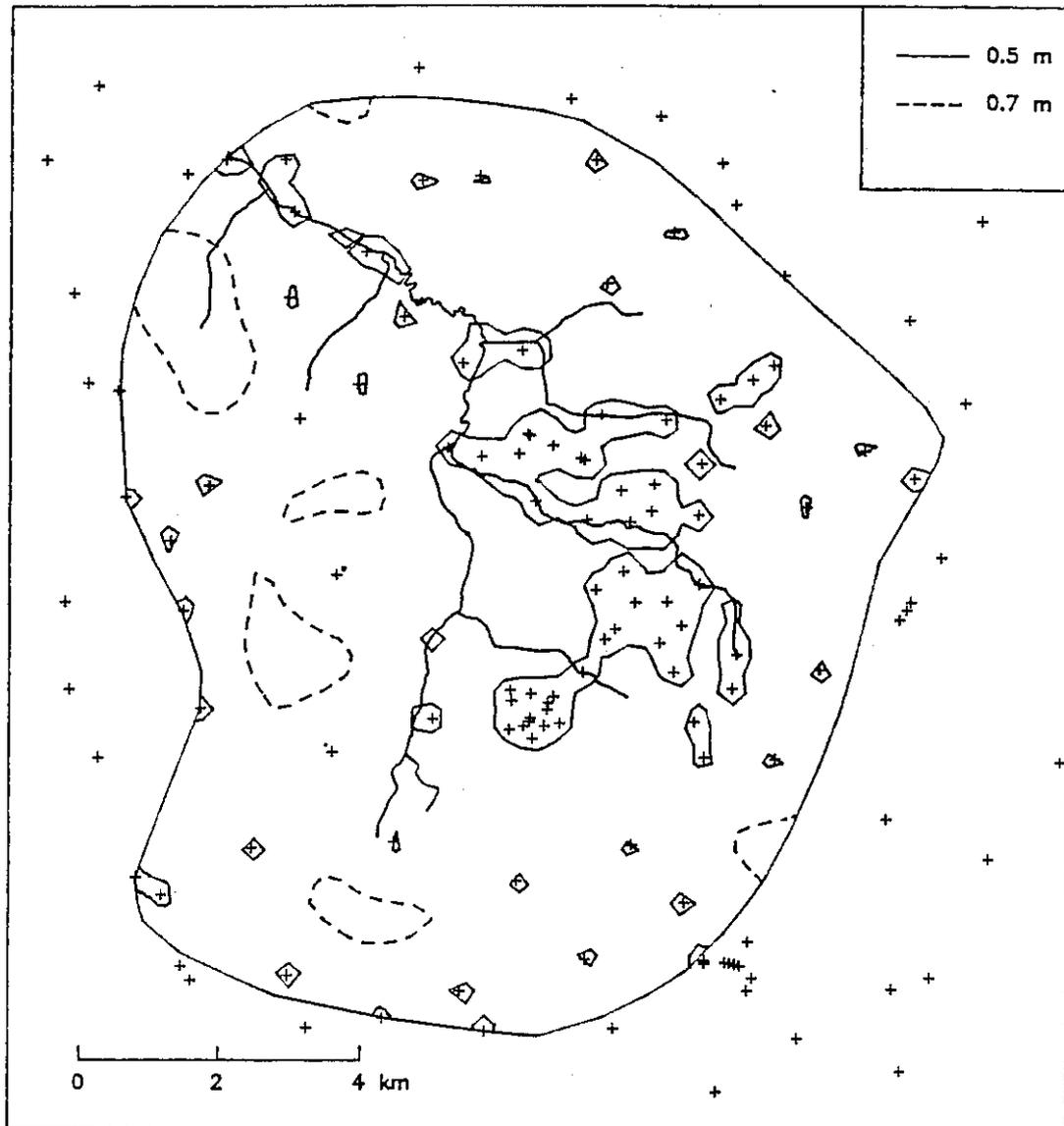


Abb. 5.18 Standardschätzfehler beim Kriging mit den Residuen; +: Meßstelle

5.5 Ansätze zur Optimierung des Meßnetzes

5.5.1 Beziehung zwischen Meßnetzdichte und Standardschätzfehler

In den vorangegangenen Kapiteln konnte mit verschiedenen Kriging-Verfahren die Unsicherheit bei der räumlichen Interpolation der Grundwasserstände quantifiziert werden. Die Standardabweichung des Schätzfehlers lag im Gebietsmittel je nach Verfahren zwischen 0.85 m und 0.6 m. Es stellt sich nun die Frage, in welchem Ausmaß sich eine Veränderung der Meßnetzkonfiguration auf das Schätzfehlerintervall auswirken würde. Da zur Berechnung der

Standardabweichung des Schätzfehlers die Meßwerte selbst nicht benötigt werden (s. Kap. 3.1.2), können mit dem Kriging-Gleichungssystem und dem Semivariogramm beliebige Meßnetzgeometrien simuliert werden.

Zur Untersuchung der grundsätzlichen Beziehung zwischen Netzdicke und Schätzfehler ist es zweckmäßig, die Meßpunkte in einem regelmäßigen Raster anzuordnen (SOPHOCLEOUS 1983). In der Abbildung 5.19 ist beispielhaft die Standardabweichung des Schätzfehlers für einen Ausschnitt eines regelmäßigen 1km · 1km Meßnetzes in 3-dimensionaler Form dargestellt. Dabei wurden die in den vorherigen Kapiteln gefundenen Semivariogramme verwendet.

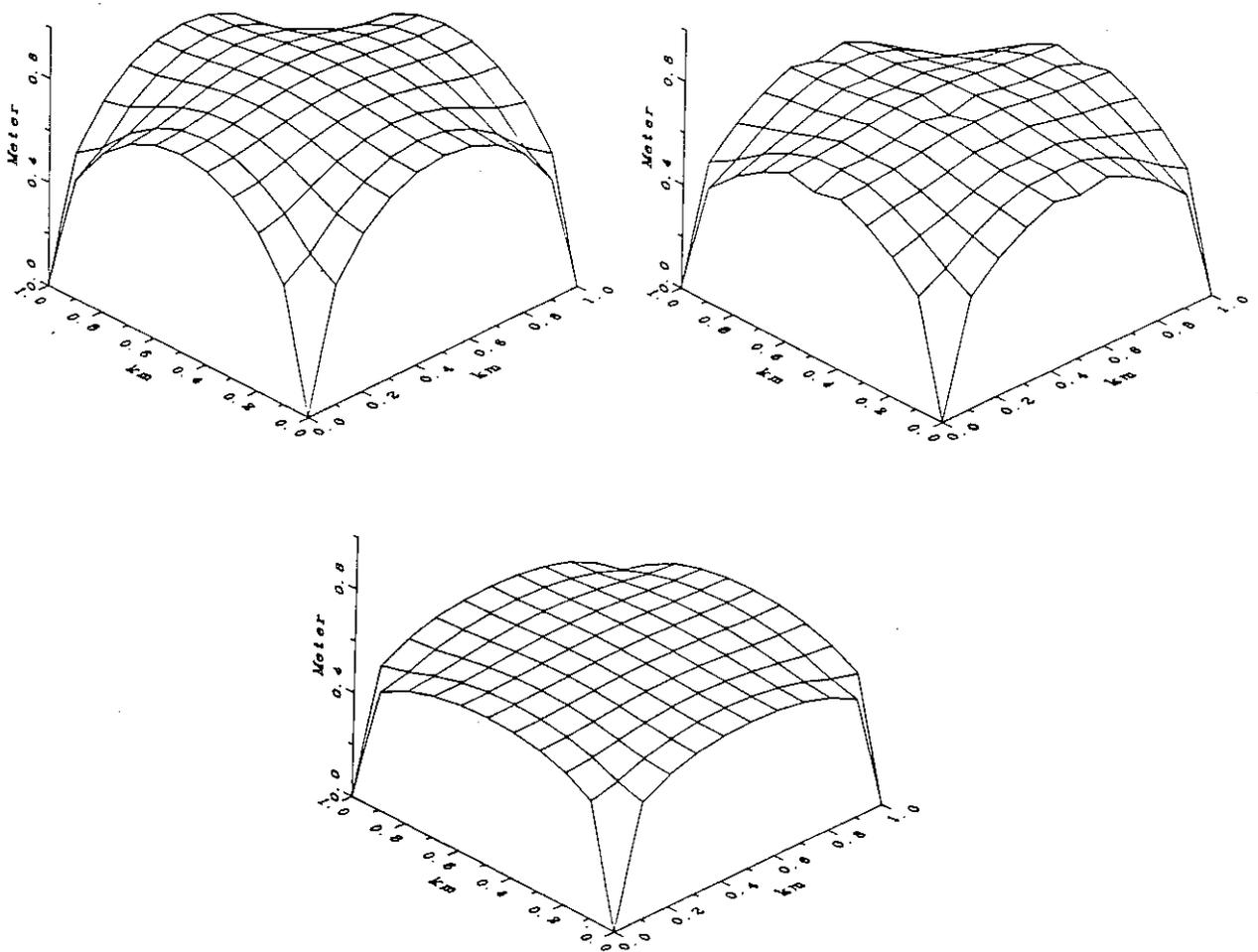


Abb. 5.19 3D-Darstellung des Standardschätzfehlers für ein 1km-Raster. Links oben: Einfaches Kriging; rechts oben: Cokriging; unten: Kriging mit Residuen

In allen drei Fällen ist ein rascher Anstieg der Standardabweichung an den Meßstellen festzustellen. Das Maximum wird im Zentrum des Quadrates erreicht, da dort der Abstand zu den Meßpunkten am größten ist. Deutlich ist die Reduzierung der Unsicherheit bei der Anwendung

der fortgeschrittenen Methoden zu erkennen. Beim Cokriging-Verfahren fallen zudem die lokalen Minima an den Meßpunkten der Hilfsvariablen im 250m-Raster auf.

Führt man diese Berechnungen für verschiedene Rasterpunktabstände durch, ergeben sich die in den Abbildungen 5.20a und 5.20b dargestellten Beziehungen zwischen Meßstellendichte und mittlerer Standardabweichung des Schätzfehlers. Generell ist festzustellen, daß mit zunehmender Meßnetzdicke die Standardabweichung abnimmt. Die Beziehung ist nicht linear: Je höher die Meßnetzdicke bereits ist, desto geringer ist der Nutzen weiterer Meßstellen.

Beim Vergleich der drei Verfahren zeigt sich, daß die Unterschiede bei groben Meßnetzen sehr groß sind. Offenbar sind in diesem Fall die zusätzlichen Informationen, die beim Cokriging-Verfahren und insbesondere beim Kriging in Kombination mit dem Grundwassermodell genutzt werden, besonders wertvoll. Bei einer hohen Meßnetzdicke von vier Meßstellen pro km^2 (= 500m Raster) werden die Unterschiede dagegen sehr gering.

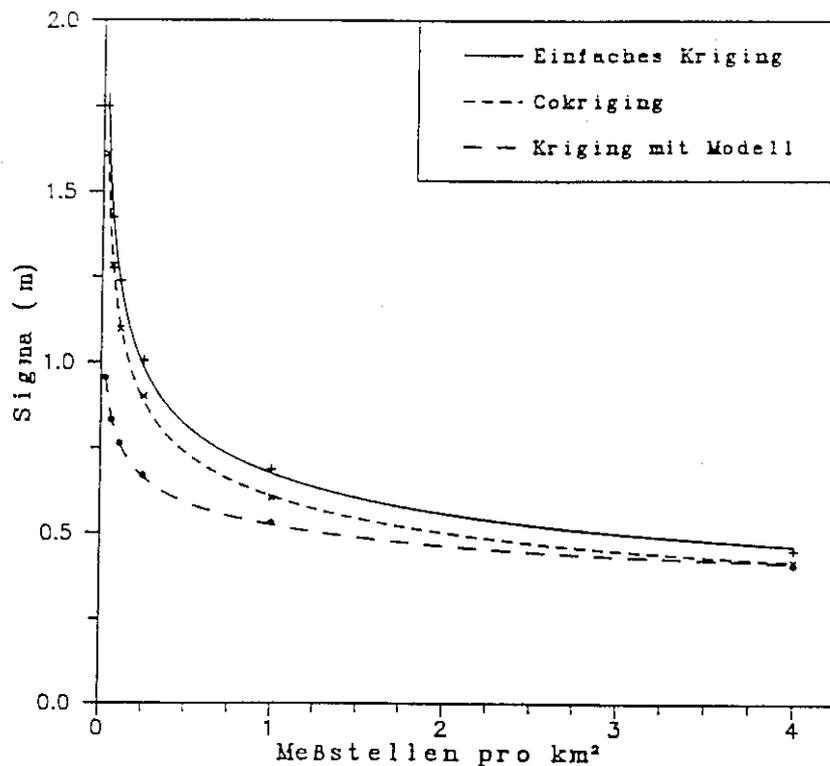


Abb. 5.20a Beziehung zwischen der Meßstellendichte (regelmäßiges Raster) und dem Standardschätzfehler (Sigma)

Der Informationsstand über die Lage der Grundwasseroberfläche ist dann durch die hohe Meßstellendichte so groß, daß sie durch zusätzliche Informationen kaum noch gesteigert werden kann.

Die Abbildungen 5.20a und 5.20b machen außerdem deutlich, daß der Standardschätzfehler beim einfachen Kriging am empfindlichsten auf Änderungen der Meßstellendichte reagiert. Dies ist verständlich, wenn man bedenkt, daß sich dieses Verfahren ausschließlich auf die In-

formationen der Grundwassermessstellen stützt. Beim Cokriging-Verfahren und beim Kriging mit dem Grundwassermodell ist dies nicht der Fall, so daß sich eine Ausdünnung bzw. Verdichtung des Meßnetzes nicht so gravierend auf den Standardschätzfehler auswirkt.

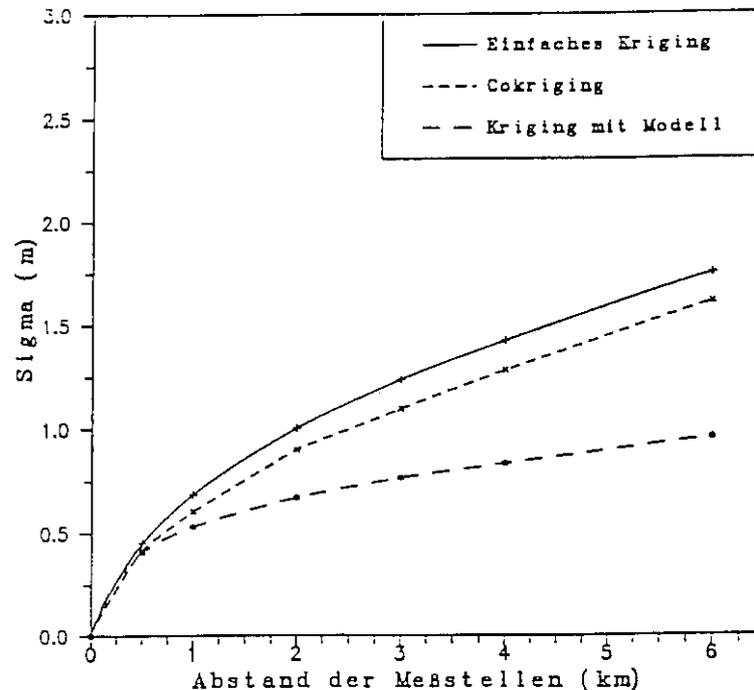


Abb. 5.20b Beziehung zwischen dem Abstand der Meßstellen (regelmäßiges Raster) und dem Standardschätzfehler (Sigma)

Die für das Untersuchungsgebiet gefundene Beziehung zwischen Meßstellendichte und Standardschätzfehler läßt unabhängig von dem gewählten Verfahren den Schluß zu, daß im Untersuchungsgebiet eine generelle Meßstellendichte von mehr als 1 pro km² für regionale Betrachtungen nicht sinnvoll ist. Der Aufwand für den Bau und die Unterhaltung des Meßnetzes steht dann in einem ungünstigen Verhältnis zum erreichbaren Informationsgewinn. Dies soll allerdings nicht ausschließen, daß für spezielle lokale Fragestellungen dichtere Meßnetze sinnvoll und notwendig sind.

5.5.2 Ein Optimierungsbeispiel

Im folgenden soll für das Untersuchungsgebiet beispielhaft gezeigt werden, in welcher Weise das Kriging-Verfahren den Optimierungsprozeß von Meßnetzen unterstützen kann. Dabei soll das Verfahren mit den besten Ergebnissen, Kriging in Kombination mit einem Grundwassermodell, als Grundlage dienen.

Die Ausgangsbasis bildet die räumliche Verteilung des Standardschätzfehlers für das bestehende Meßnetz (vgl. Abb. 5.18). Darauf aufbauend soll das Meßnetz so modifiziert werden, daß

- (1) im Untersuchungsgebiet der Standardschätzfehler nirgendwo 0.7m überschreitet,
- (2) die Anzahl neuer Meßstellen so gering wie möglich bleibt, sowie
- (3) die Gesamtzahl an Meßstellen keinesfalls zunimmt, sondern eher zurückgeht.

Bei diesen Kriterien ist die optimale Lage von zusätzlichen Meßstellen dort zu sehen, wo bislang der Standardschätzfehler am höchsten ist. Durch das Hinzufügen einer fiktiven Meßstelle wird jedoch nicht nur an diesem Punkt sondern auch in dessen Umkreis der Standardschätzfehler verringert. Deshalb ist es zweckmäßig, sukzessive an dem Schätzpunkt mit dem höchsten Standardschätzfehler eine fiktive Meßstelle einzufügen, dann die "Oberfläche" neu zu berechnen und an dem neuen Maximum einen weiteren Meßpunkt einzusetzen. Dies wird solange wiederholt, bis der vorgegebene Grenzwert unterschritten ist.

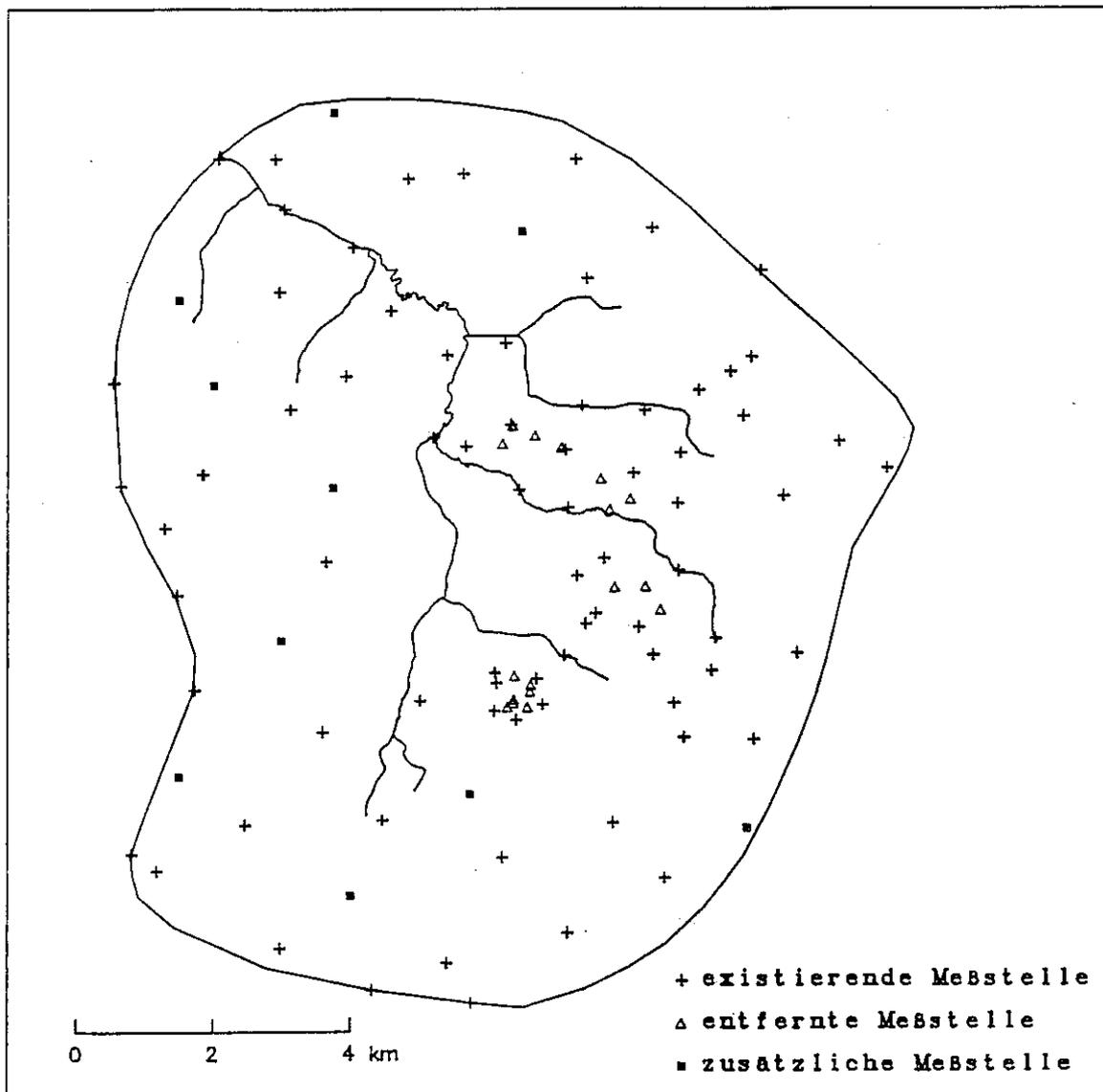


Abb. 5.21 Veränderungen im Meßnetz durch die Optimierung (vgl. Abbildung 4.4)

Im vorliegenden Beispiel waren 10 zusätzliche Meßstellen zur Unterschreitung des Grenzwertes von 0.7m erforderlich. Deren Lage ist in der Abbildung 5.21 zu erkennen.

Da die Anzahl der Meßstellen nicht zunehmen sollte, mußten im nächsten Arbeitsschritt die Meßstellen bestimmt werden, auf die am ehesten verzichtet werden könnte. Ein möglicher Verfahrensweg wäre, sukzessive jeweils eine Meßstelle aus dem Datensatz zu entfernen, um anschließend die Meßstelle auswählen zu können, bei der sich die mittlere Standardabweichung des Schätzfehlers am geringsten erhöht hat. Besser - weil weniger rechenintensiv - ist es, das Kriging-Gewicht der einzelnen Meßwerte, gemittelt über alle 1858 Schätzpunkte, zu berechnen. Die Meßstandorte, die das kleinste mittlere Gewicht aufweisen, haben auch den geringsten Einfluß auf die Berechnung der Schätzwerte. Sie sind daher von geringerem Nutzen, so daß sie am ehesten aufgegeben werden könnten.

In der Abbildung 5.22 ist dargestellt, wie sich die mittleren Kriging-Gewichte der Meßstellen verteilen. Im bestehenden Meßnetz ist demnach eine große Anzahl von Meßstellen vorhanden, die ein sehr geringes mittleres Kriging-Gewicht von 0% bis 0.3% besitzen. (Bei 138 Meßstellen liegt das durchschnittliche Gewicht bei $1/138 = 0.72\%$.) Das bedeutet, daß offensichtlich günstige Möglichkeiten zur Ausdünnung des Meßnetzes bestehen.

Schrittweise wurden insgesamt 17 Meßstellen mit den jeweils geringsten Gewichten aus dem Datensatz entfernt. Die Auswahl dieser Meßstellen mußte wiederum sukzessive durchgeführt werden, da durch das Entfernen einer Meßstelle das mittlere Gewicht der benachbarten Meßstellen erhöht wird.

In der Abbildung 5.21 sind die Veränderungen im Meßnetz aufgeführt. Die entfernten Meßstandorte befinden sich ausnahmslos in Gebieten mit hoher Meßstellendichte. Dort trifft es vor allem die Meßstellen, die sich im Zentrum der Verdichtungen befinden. Sie werden von den umliegenden Meßstellen "abgeschirmt" und erhalten deshalb ein besonders geringes Gewicht.

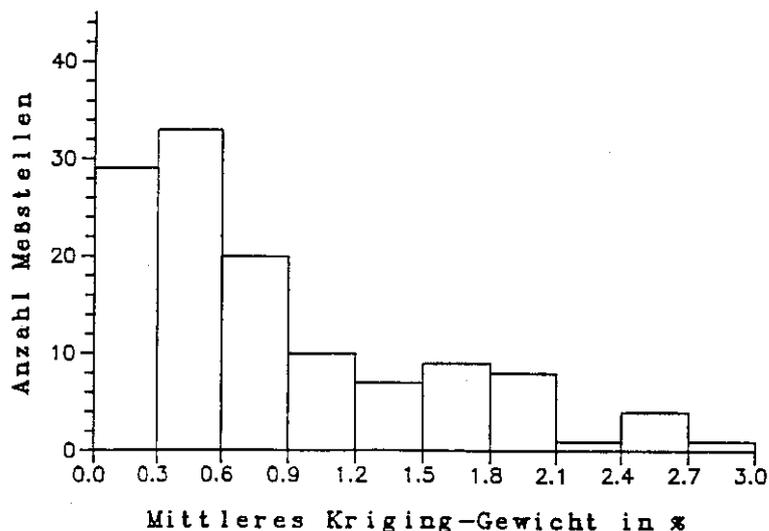


Abb. 5.22 Häufigkeitsverteilung der mittleren Kriging-Gewichte beim bestehenden Meßnetz

Die zusätzlichen Meßstellen treten in den lückenhaften Bereichen auf, so daß sich insgesamt ein Meßnetz mit recht einheitlicher Dichte einstellt. Dies kommt auch in der Verteilung der mittleren Kriging-Gewichte zum Ausdruck (s. Abb. 5.23). Die Zahl der Meßstellen mit geringem Gewicht ging drastisch zurück, zum einen weil solche Meßstellen aus dem Datensatz entfernt wurden, zum anderen weil dadurch die Gewichte der noch bestehenden benachbarten Meßstellen anwuchsen. Meßstellen mit sehr hohem Gewicht sind ebenfalls nicht mehr vorhanden, da sie durch die neuen Meßstellen "entlastet" werden.

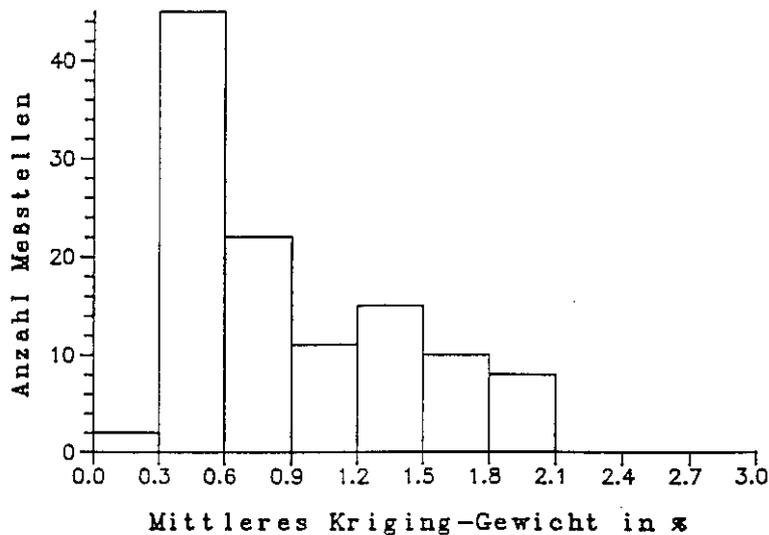


Abb. 5.23 Häufigkeitsverteilung der mittleren Kriging-Gewichte beim optimierten Meßnetz

Die Karte der Standardschätzfehler (Abb. 5.24) zeigt, daß das Ziel der Optimierung erreicht wurde. Standardschätzfehler von mehr als 0.7m treten nicht mehr auf. Der Mittelwert beträgt nun 0.58m.

Insgesamt gesehen, tritt durch diesen Optimierungsvorgang eine Vereinheitlichung der Kriging-Gewichte der Meßstellen auf. Dies ist die unmittelbare Folge der vorgegebenen Optimierungskriterien, mit denen ja eine möglichst gleichmäßige Standardabweichung des Schätzfehlers bei minimalem Meßstellenaufwand angestrebt wurde. Würde man andere Kriterien vorgeben, die z.B. berücksichtigen, daß für Teilräume eine höhere Genauigkeit wünschenswert wäre, dann würden sich zwangsläufig andere Meßnetzgeometrien ergeben.

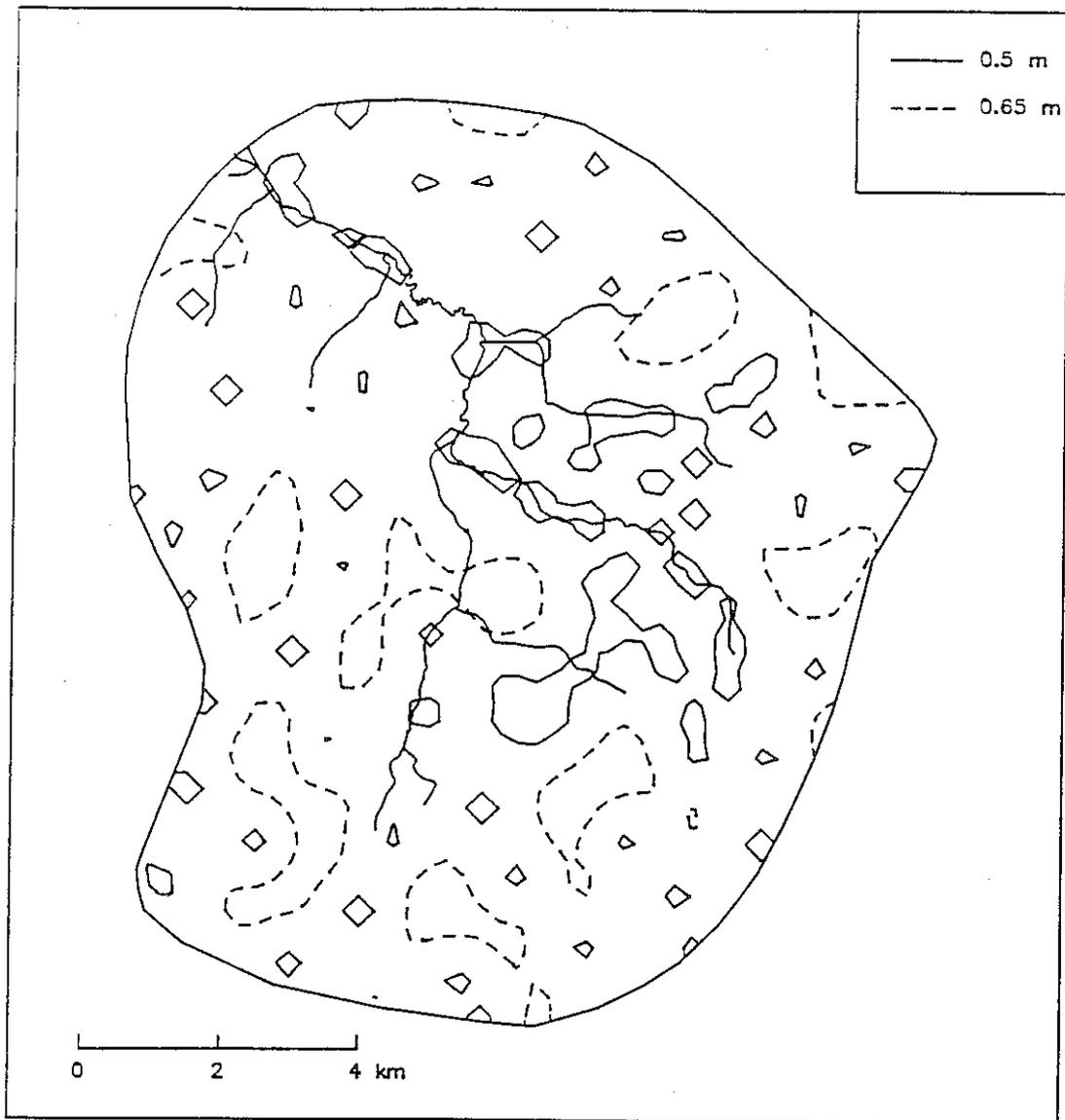


Abb. 5.24 Standardschätzfehler bei optimiertem Meßnetz (vgl. Abb. 5.18)

6 Analyse des Meßnetzes zur Beobachtung der Grundwasserbeschaffenheit

6.1 Einfaches Kriging

6.1.1 Semivariogramm und Kreuzprüfung

Mit den in Kap. 4.2.2 beschriebenen Daten wurden zunächst die empirischen Semivariogramme berechnet. Sie sind für die zehn ausgewählten Parameter in den Abbildungen 6.1 bis 6.3 zu finden. Die Berechnung der empirischen Semivariogramme basiert auf 31 Meßpunkten. Damit liegt die Datenbasis an der unteren Grenze dessen, was für eine zuverlässige Berechnung erforderlich ist. Für richtungsgebundene Semivariogramme reicht die Datenbasis allerdings nicht, so daß sich die Analyse auf isotrope Semivariogramme beschränkt.

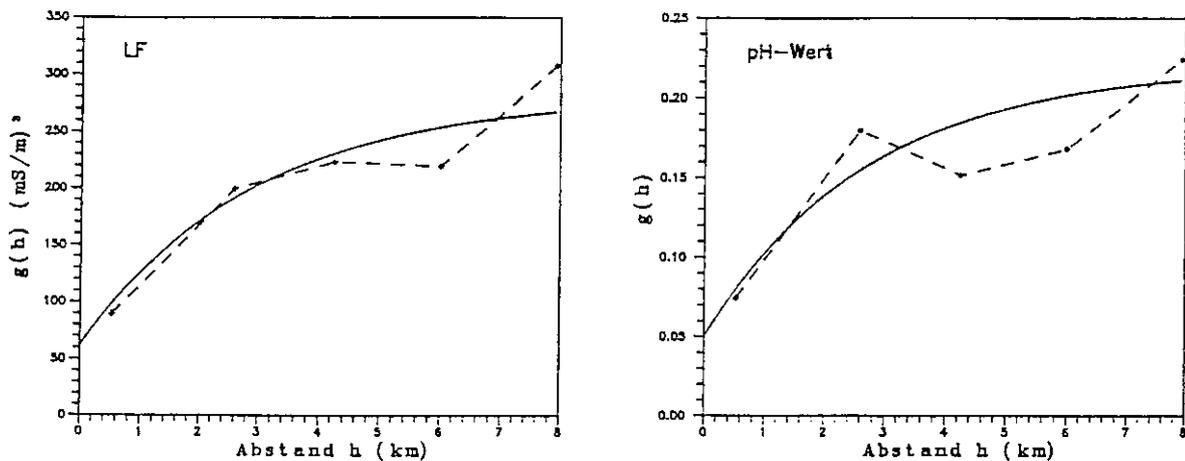


Abb. 6.1 Empirisches (--) und theoretisches Semivariogramm der elektrischen Leitfähigkeit und des pH-Wertes

Die empirischen Semivariogramme zeigen prinzipiell einen ähnlichen Verlauf: Am Nullpunkt tritt ein zumeist deutlich erkennbarer Nuggeteffekt auf, dem dann eine über mehrere Kilometer anhaltende Anstiegsphase folgt, bis dann $g(h)$ um einen konstanten Wert (Schwellenwert) schwankt. Demzufolge sind sphärische und exponentielle Funktionen die geeigneten theoretischen Modelle.

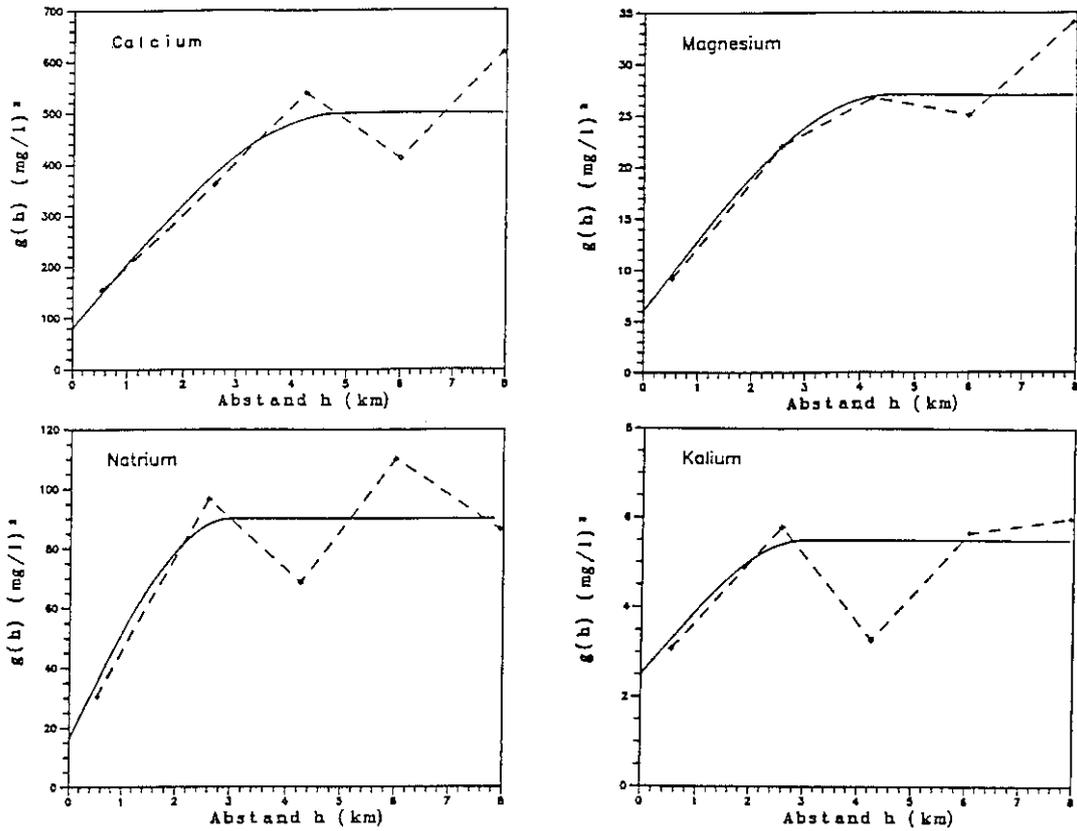


Abb. 6.2 Empirische (--) und theoretische Semivariogramme der Kationen

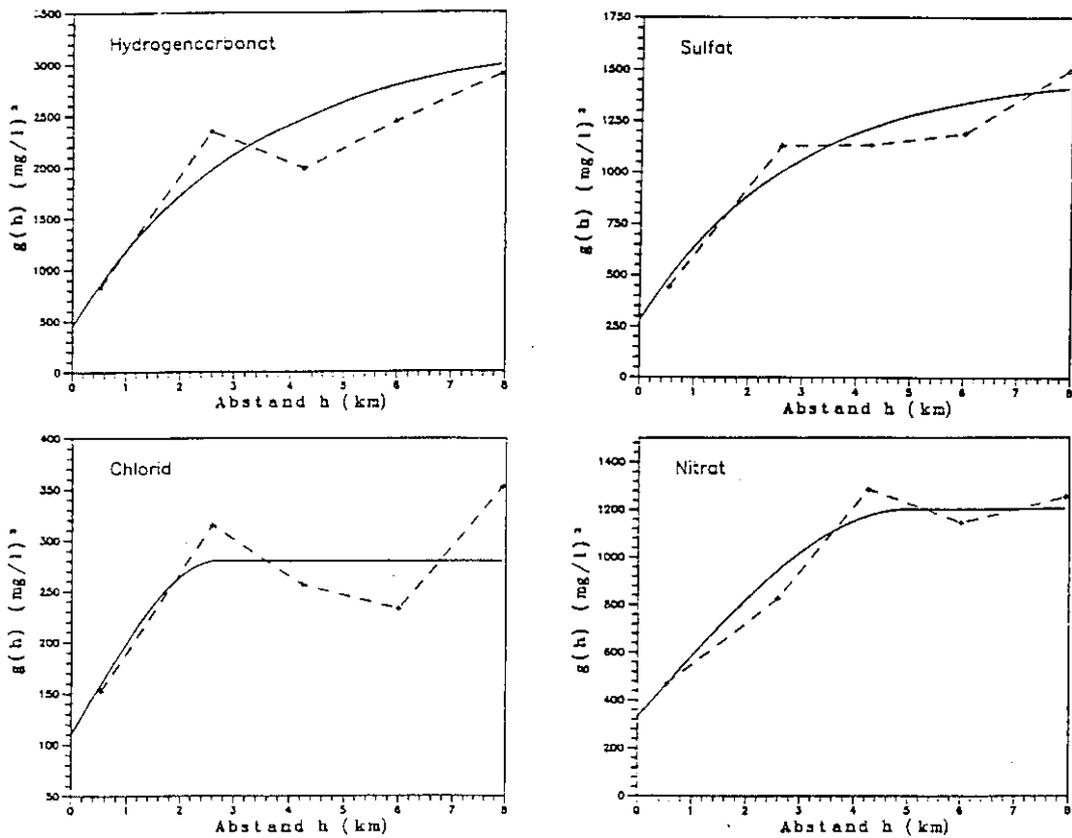


Abb. 6.3 Empirische (--) und theoretische Semivariogramme der Anionen

Eine räumliche Drift, die sich in einem parabelförmigen Anstieg der empirischen Semivariogramme äußern müßte, ist nicht zu erkennen. Im Gegensatz zu den Grundwasserständen war deshalb der Einsatz des Universal Kriging bzw. des Kriging mit generalisierten Kovarianzen nicht erforderlich.

Die Anpassung der theoretischen Semivariogramme erfolgte zunächst visuell. Mit der Kreuzprüfung wurden anschließend Feinkorrekturen durchgeführt bis die Prüfkriterien bestmöglich erfüllt waren. Ließ der Verlauf des empirischen Semivariogramms die Anpassung von mehreren Modelltypen zu, dann wurde dieses Verfahren für alle möglichen Typen durchgeführt und schließlich dasjenige mit den besten Ergebnissen der Kreuzprüfung gewählt.

Tab. 6.1 Koeffizienten der theoretischen Semivariogramme. c: Nuggeteffekt; a: Reichweite; w+c: Schwellenwert; sphä: sphärisch; expo: exponentiell; (vgl. Abb. 3.4)

Theoretisches Semivariogramm					
	Typ	w (mg/l) ²	a (km)	c (mg/l) ²	w+c (mg/l) ²
Calcium	sphä	420	4.9	80	500
Magnesium	sphä	21	4.5	6	27
Natrium	sphä	74	3.0	16	90
Kalium	sphä	3	3.0	2.5	5.5
Sulfat	expo	1200	2.8	280	1480
Chlorid	sphä	170	2.7	110	280
Nitrat	sphä	640	4.9	360	1000
Hydrogen-carbonat	expo	2800	3.3	450	3250
el. Leitf.	expo	220 (mS/m) ²	2.9	62 (mS/m) ²	282 (mS/m) ²
pH-Wert	expo	0.17 (-)	2.7	0.05 (-)	0.22 (-)

In der Tabelle 6.1 sind die Koeffizienten der theoretischen Semivariogramme aufgeführt. Das sphärische Semivariogramm, das in der Geostatistik am häufigsten anzutreffen ist (AKIN, SIEMES 1988), tritt bei sechs Parametern auf, während mit dem exponentiellen Semivariogramm in vier Fällen die beste Anpassung erreicht wurde.

Die Ergebnisse der Kreuzprüfung (siehe Tab. 6.2) zeigen, daß die Schätzung praktisch verzerrungsfrei verläuft ($MF \approx 0$) und daß die theoretische Standardabweichung des Schätzfehlers gut mit dem tatsächlichen mittleren quadratischen Schätzfehler übereinstimmt ($SMQF \approx 1$).

Tab. 6.2 Ergebnisse der Kreuzprüfung. MF : Mittlerer Fehler; MQF : Mittlerer Quadratischer Fehler; SMQF: Standardisierter Mittl. Quadr. Fehler.

	MF (mg/l)	MQF (mg/l)	SMQF (-)
Calcium	-1.7	16.9	1.00
Magnesium	-0.1	5.0	1.16
Natrium	-0.3	10.4	1.18
Kalium	0.1	2.6	1.09
Sulfat	-2.3	32.2	1.10
Chlorid	-1.8	17.9	1.13
Nitrat	-0.3	32.3	1.14
Hydrogen- carbonat	0.1	43.6	1.01
el. Leitf.	-0.6 (mS/m)	14.5 (mS/m)	1.10
pH-Wert	0.02 (-)	0.4 (-)	1.07

Zu beachten ist, daß bei allen Parametern im Gegensatz zum Grundwasserstand ein deutlicher Nuggeteffekt auftritt (vgl. Tab. 6.1). Im folgenden wird aufgezeigt, daß dafür lokale, zufällige Schwankungen der Parameter, aber auch Probenahme- und Analysenfehler die Ursache sein können.

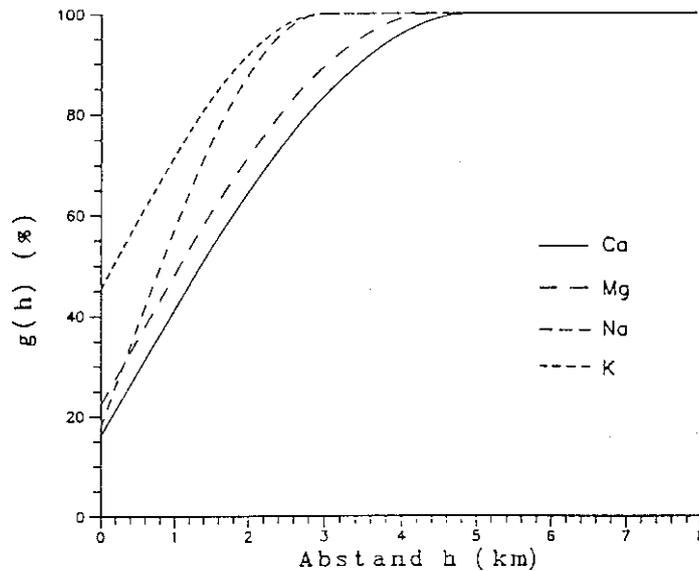


Abb. 6.4 Relative Semivariogramme der Kationen

Bei den Kationen fällt auf, daß die Reichweite der Semivariogramme beim Magnesium und Calcium mit 4.5 km bzw. 4.9 km deutlich größer ist, als beim Kalium und Natrium (beide 3 km). Die räumliche Korrelation und damit die Reichweite der Meßwert-Aussage ist bei den vorwiegend geogen bestimmten Erdalkalien offensichtlich deutlich höher. Hinzu kommt, daß der Nuggeteffekt mit 16% (Ca) bzw. 22% (Mg) recht gering bleibt. Durch die Anwesenheit von Karbonaten und durch die Belegung vieler Kationenaustauschplätze ist im Grundwasserleiter ein großer Vorrat insbesondere an Calcium-Ionen vorhanden, der abrupten zeitlichen und räumlichen Konzentrationsänderungen entgegenwirkt.

Bei den mobileren Alkalimetallen wirken sich eher anthropogene, kleinräumige Belastungen aus, so daß die Reichweite der Semivariogramme relativ gering ausfällt. Der hohe relative Nuggeteffekt beim Kalium sollte nicht überbewertet werden, da der Kaliumgehalt im Vergleich zu den anderen Kationen sehr gering ist (vgl. Tab. 6.1).

Bei den Anionen tritt das Chlorid sowohl durch die geringe Reichweite (2.7 km) des Semivariogramms als auch durch einen hohen Nuggeteffekt-Anteil (39%) hervor. Ein mit der Entnahmetiefe variierender Chloridgehalt, wie er von OBERMANN (1981) im Untersuchungsgebiet festgestellt wurde, sowie punktuelle und kleinflächige Belastungsquellen (z.B. schadhafte Kanalisationen, belastete Vorfluter, Streusalz) können zu Erklärung der geringen räumlichen Persistenz des Chlorids herangezogen werden.

Die größere Reichweite des Nitrat-Semivariogramms spricht eher für flächenhaftere Belastungen aus der landwirtschaftlichen Düngung. Der hohe Nuggeteffekt ist, wie bereits erwähnt, hauptsächlich auf die große Tiefenabhängigkeit der Stoffkonzentration zurückzuführen.

Die komplexen hydrogeochemischen Prozesse, wie z.B. Lösung, Fällung, Sorption, Ionenaustausch, Redox-Reaktionen führen dazu, daß in inhomogen aufgebauten Grundwasserleitern die Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe kleinräumigen Schwankungen unterworfen ist. Verstärkt wird dies durch den räumlich und zeitlich wechselnden Eintrag von Stoffen ins Grundwasser aus der Atmosphäre, durch die Düngung landwirtschaftlicher Flächen, aus Altablagungen, durch den Einsatz von Auftausalzen, durch schadhafte Kanalisationen etc.

Durch diese Einflüsse läßt sich sicherlich ein Teil des Nuggeteffektes und auch die relativ geringen Reichweite der Semivariogramme erklären. Es müssen jedoch auch Fehler bei der Probenahme und bei der Analyse in Betracht gezogen werden, wobei allerdings die Analysefehler bei diesen Standardparametern als gering eingestuft werden können.

Die Entnahme einer fehlerfreien, repräsentativen Wasserprobe aus einem Aquifer ist wesentlich schwieriger. So ist zum einen vor der Probenahme das Standwasser in der Meßstelle unbedingt abzupumpen, zum anderen kann durch die dadurch eintretende Änderung der Fließsituation der Chemismus der Probe verändert werden. Auch das Ausbaumaterial der Meßstelle (Durchmesser, Filter, Kiesschüttung,...) spielt eine gewisse Rolle (z.B TOUSSAINT 1987).

Von noch größerer Bedeutung für das Auftreten des Nuggeteffektes ist jedoch die Tatsache, daß in Grundwasserleitern die Inhaltsstoffe mit der Tiefe erheblich variieren können. Dadurch, daß mit der zunehmenden Tiefe das Alter des Grundwassers generell zunimmt, können Veränderungen des Stoffeintrags in der Vergangenheit innerhalb eines Grundwasserleiters zu einer vertikalen Schichtung der Inhaltsstoffe führen. Beispielsweise benutzte OBERMANN (1981) den Begriff der "Düngungsgrenze" für einen Aquifer, in dem zwischen einem durch intensivierte Düngung belasteten jungen Grundwasser und dem weniger belasteten tieferliegenden, älteren Grundwasser unterschieden werden kann.

Der vertikale Gradient von Inhaltsstoffen im Aquifer kann noch durch chemische Reaktionen auf der Fließstrecke erheblich vergrößert werden. Besonders intensiv wurde in letzter Zeit die Abnahme der Nitrat-Konzentrationen mit der Tiefe untersucht (z.B. OBERMANN, BUNDERMANN 1982, LÖHNERT, OSWALD 1991). Sie wird verursacht durch Reduktions-Reaktionen, die mit zunehmendem Grundwasseralter die Nitrat-Konzentrationen vermindern (OBERMANN 1981).

Die teilweise stark ausgeprägte vertikale Stoffverteilung im Grundwasserleiter führt dazu, daß die Stoffkonzentration in der Wasserprobe von der Tiefenlage und der Länge der Filterstrecke abhängt. Allein durch Unterschiede im geometrischen Aufbau zweier benachbarter Meßstellen kann es zu unterschiedlichen Stoffkonzentrationen in der Wasserprobe kommen, die sich beim Semivariogramm mit einem Nuggeteffekt bemerkbar machen.

Für einen weitergehenden Vergleich der Semivariogramme ist es zweckmäßig, deren Absolutwerte zu relativieren, indem man die Funktionswerte durch den jeweiligen Schwellenwert (Maximalwert) dividiert. In den Abbildungen 6.4 bis 6.6 sind diese relativen Semivariogramme, dargestellt als Prozentwerte des Schwellenwertes, zu finden.

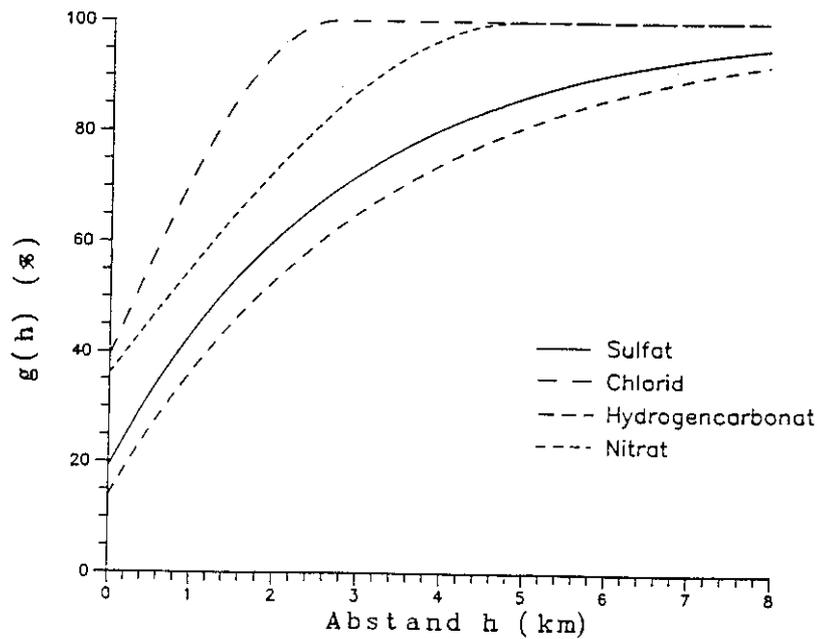


Abb. 6.5 Relative Semivariogramme der Anionen

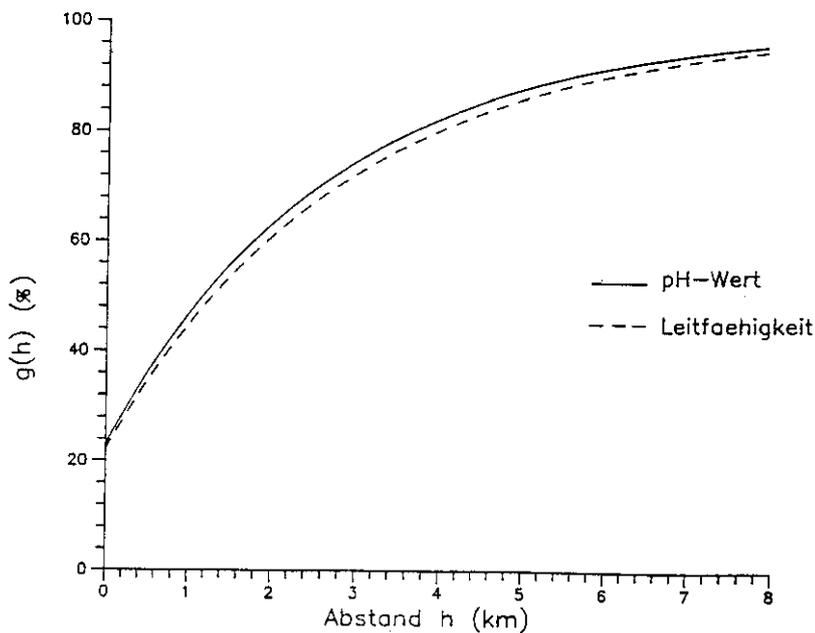


Abb. 6.6 Relatives Semivariogramm des pH-Wertes und der Leitfähigkeit

Die im Untersuchungsgebiet verbreitete anthropogene Erhöhung der Sulfatkonzentration tritt ebenfalls vorwiegend flächenhaft auf (SCHENK 1988). Dies wird anhand des relativen Semivariogramms mit seiner großen Reichweite, die nur noch vom Hydrogencarbonat übertroffen wird, recht deutlich. Die großen Konzentrationsschwankungen bei diesen beiden Anionen treten im Untersuchungsgebiet also nicht kleinräumig auf.

Auch der pH-Wert und der Summenparameter Leitfähigkeit unterliegen erwartungsgemäß keinen starken kleinräumigen Schwankungen (Abb. 6.6).

Bei der Interpretation der Semivariogramme sollte immer beachtet werden, daß die Datengrundlage mit 31 Meßpunkten nicht gerade groß war. Dies verursacht Unsicherheiten bei der Bestimmung der Semivariogramme vor allem bei kleinen Abständen (wenig Wertepaare). Zirka zehn bis zwanzig zusätzliche Meßpunkte wären zur Absicherung der Semivariogramme wünschenswert (s. Kap. 7).

6.1.2 Interpolation

Mit den Ergebnissen der Semivariogramm-Analyse und der Kreuzprüfung wurde mit dem einfachen Kriging-Verfahren die Punktmessungen auf das 250m-Raster interpoliert. Für jeden Schätzpunkt wurde ebenfalls der Standardschätzfehler berechnet.

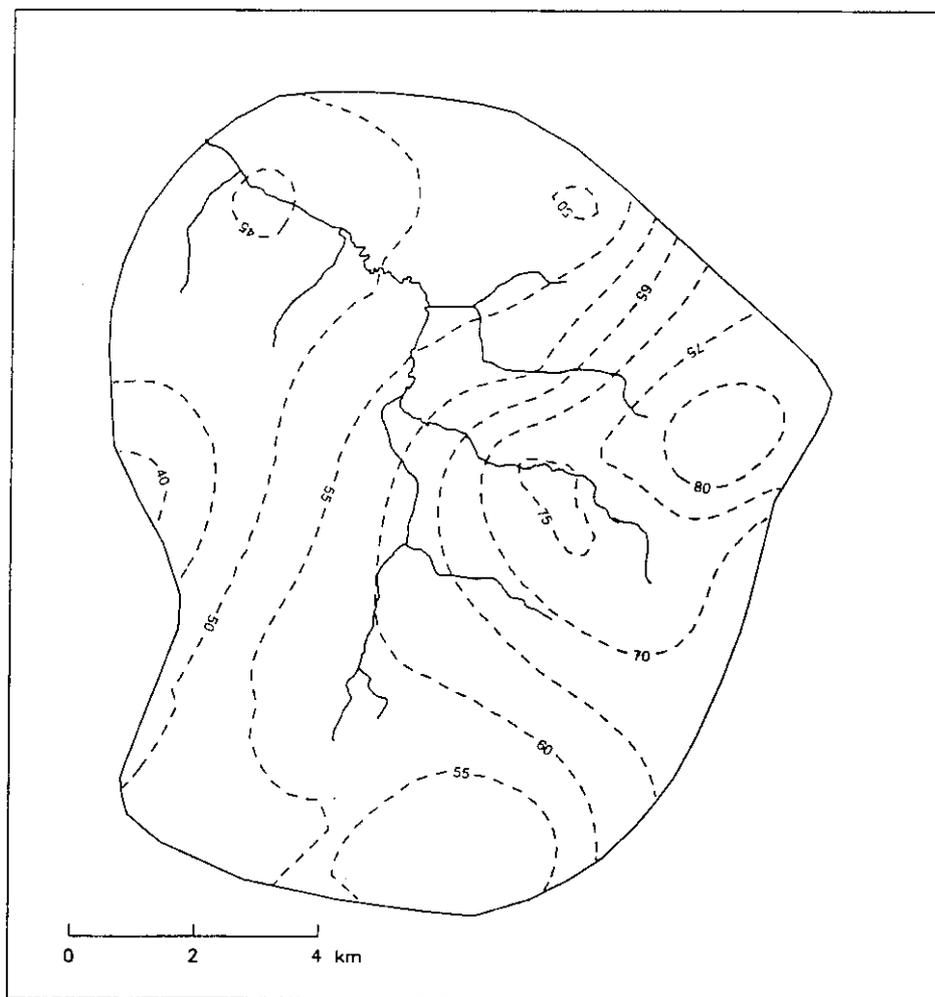


Abb. 6.7 Verteilung der el. Leitfähigkeit in mS/m beim einfachen Kriging-Verfahren

Beispielhaft für die untersuchten zehn Parameter werden im folgenden die Ergebnisse für die Leitfähigkeit, das Calcium, Natrium und Chlorid dargestellt.

Die Interpolation der Leitfähigkeits-Messungen (Abb. 6.7) ergibt ein systematisches Bild mit hohen Werten im Osten und niedrigeren Werten im Nordwesten. Die intensivere landwirtschaftliche Nutzung und die basenreicheren Deckschichten (siehe unten) bewirken im Osten ein höheren Stoffeintrag, der die Leitfähigkeit des Grundwassers ansteigen läßt.

Der Standardschätzfehler (Abb. 6.8) liegt im Flächenmittel bei 13.7 mS/m. In Gebieten mit relativ hoher Meßnetzdicke befindet er sich unterhalb von 12 mS/m und steigt im Südwesten aufgrund fehlender Meßpunkte auf über 16 mS/m an.

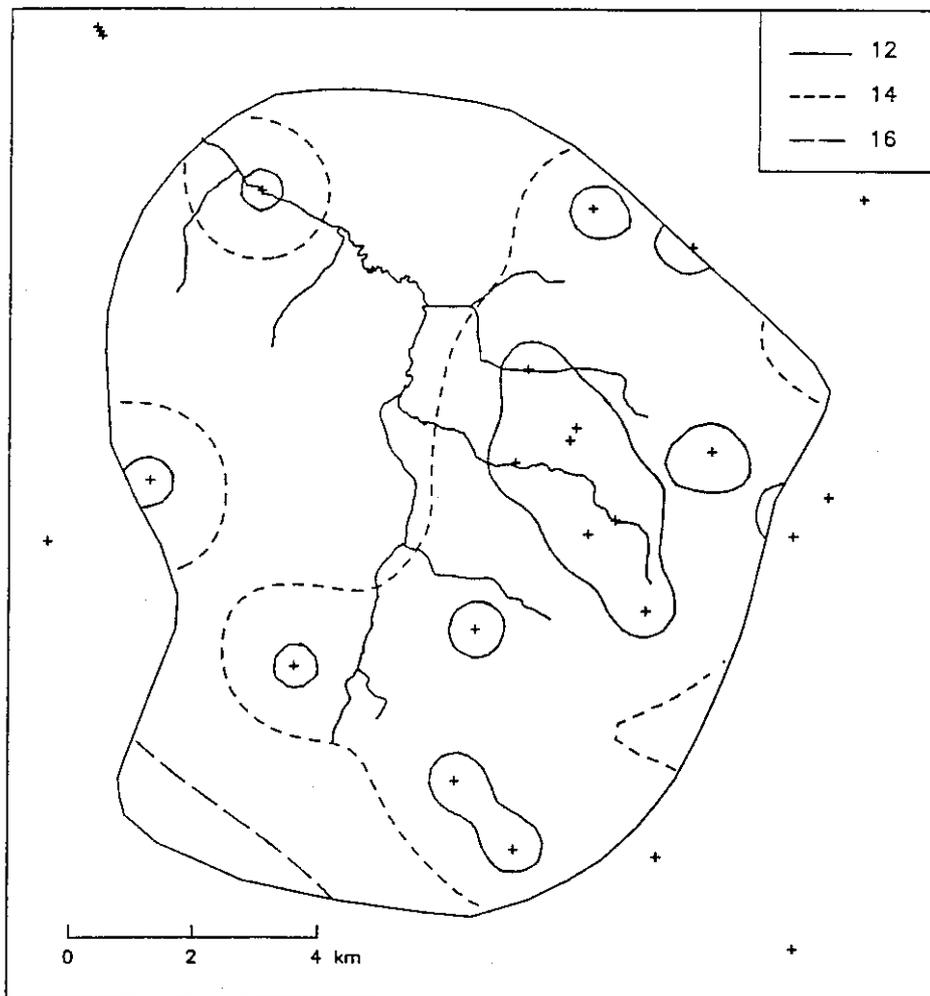


Abb. 6.8 Standardschätzfehler der el. Leitfähigkeit in mS/m; +: Meßstelle

Für das Calcium (Abb. 6.9) ergibt sich eine ähnliche räumliche Verteilung. Sie ist durch die stetige Abnahme der Konzentration von Südosten nach Nordwesten gekennzeichnet. Zusätzlich zu den Isolinien ist die nördliche Verbreitungsgrenze des Lösses im Untersuchungsgebiet dargestellt (GEOLOGISCHES LANDESAMT NRW 1972). Diese Grenzlinie stimmt in ihrem Verlauf gut mit dem Konzentrationsbereich von ca. 70 mg/l überein. Die im Nordwesten sich

anschließenden basenärmeren Deckschichten aus Sandlöß lassen nur noch Konzentrationen um ca. 50 mg/l zu.

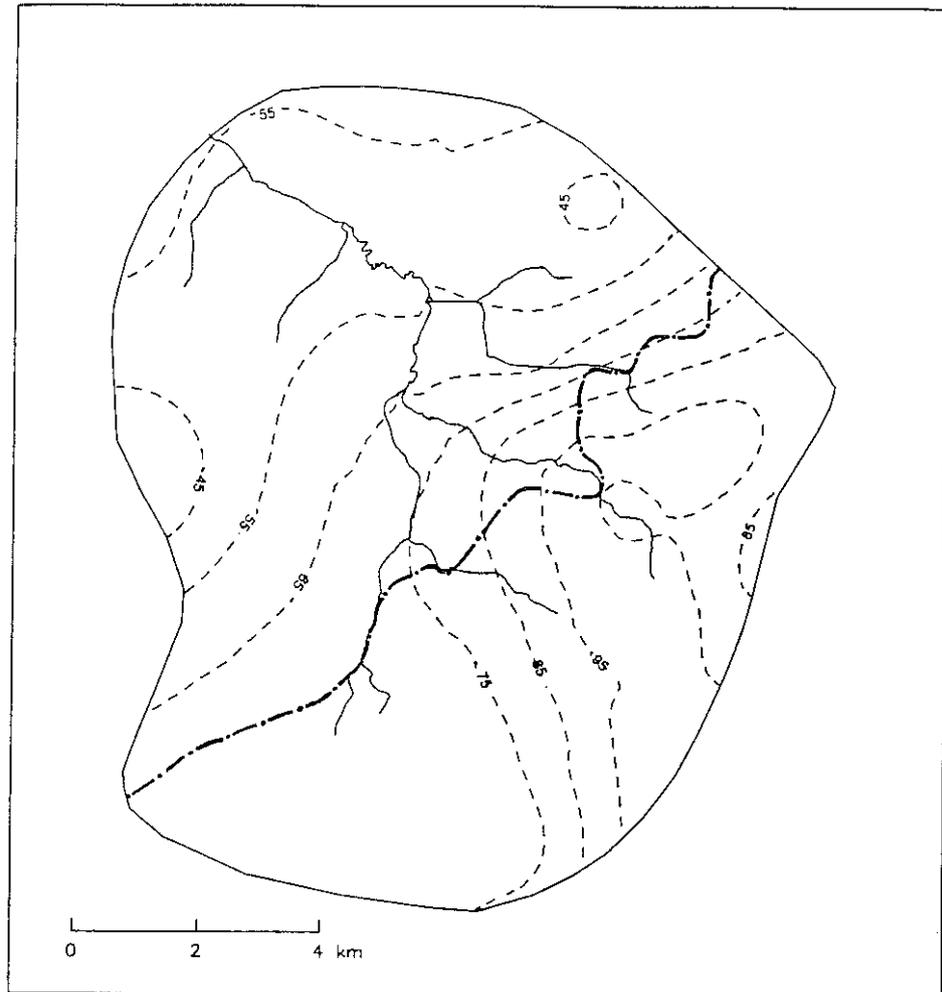


Abb. 6.9 Calcium-Konzentration in mg/l (einfaches Kriging). Strich-Punkt-Linie: Nördliche Verbreitungsgrenze des Lößes

Der Standardschätzfehler (siehe Abb. 6.10) beträgt beim Calcium im Durchschnitt 18.2 mg/l. Er schwankt im Bereich von ca. 15 mg/l bis ca. 23 mg/l.

Im Gegensatz zum Calcium zeigt das Natrium (Abb. 6.11) ein eher zufälliges Verteilungsmuster. Gebiete mit höherer Konzentration wechseln sich ohne erkennbare Systematik mit Gebieten niedrigerer Konzentration ab. Dies spricht dafür, daß kleinräumig wechselnde anthropogene Belastungen die natürlichen Einflüsse (z.B die Zufuhr aus der Silikatverwitterung) überprägen. Der mittlere Standardschätzfehler liegt bei ca. 9 mg/l.

Von großem Einfluß, sowohl auf das Interpolationsergebnis als auch auf die Höhe des Standardschätzfehlers, ist der Nuggeteffekt. Dies soll anhand eines Detailschnittes, dessen Schnittspur in der Abbildung 6.12 zu finden ist, verdeutlicht werden. Für das Chlorid, das sich durch einen besonders hohen Nuggeteffekt-Anteil auszeichnet, wird in der Abbildung 6.13 der Verlauf der Schätzwerte entlang des Schnittes dargestellt. Der Schnitt führt durch fünf Meßpunkte.

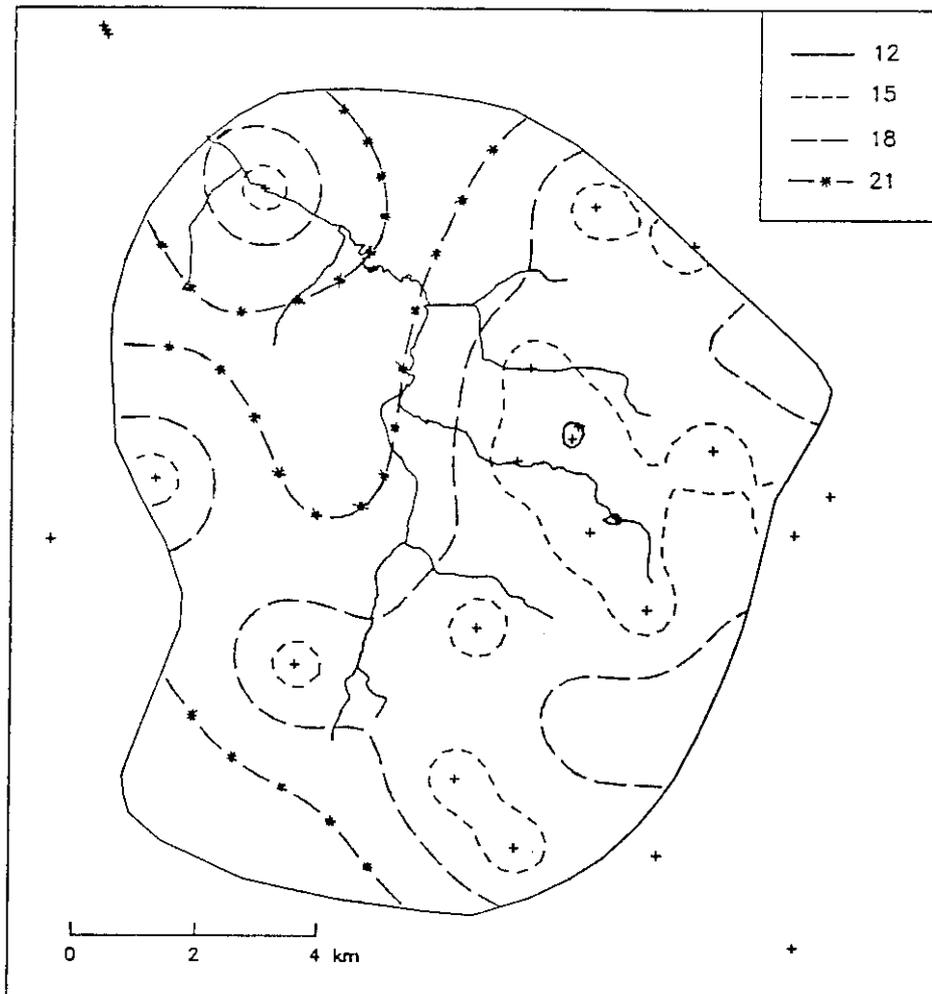


Abb. 6.10 Standardschätzfehler für Calcium (mg/l) beim einfachen Kriging-Verfahren; +: Meßstelle

Da es sich beim Kriging-Verfahren um ein exaktes Verfahren im mathematischen Sinn handelt, werden die Meßwerte an den Meßpunkten exakt reproduziert (Abb. 6.12). Aufgrund des Nuggeteffektes kann jedoch der Schätzwert in beliebig kleinem Abstand vom Meßort entfernt bereits deutlich vom Meßwert abweichen. Diese Unstetigkeit entsteht dann, wenn die Meßwerte der

benachbarten Meßstellen generell höher bzw. tiefer liegen. Der Meßwert wird über den Nuggeteffekt gewissermaßen zum lokalen Ausreißer (Meßfehler, lokale Besonderheit) deklariert, was dazu führt, daß die regionale Komponente stärker betont wird.

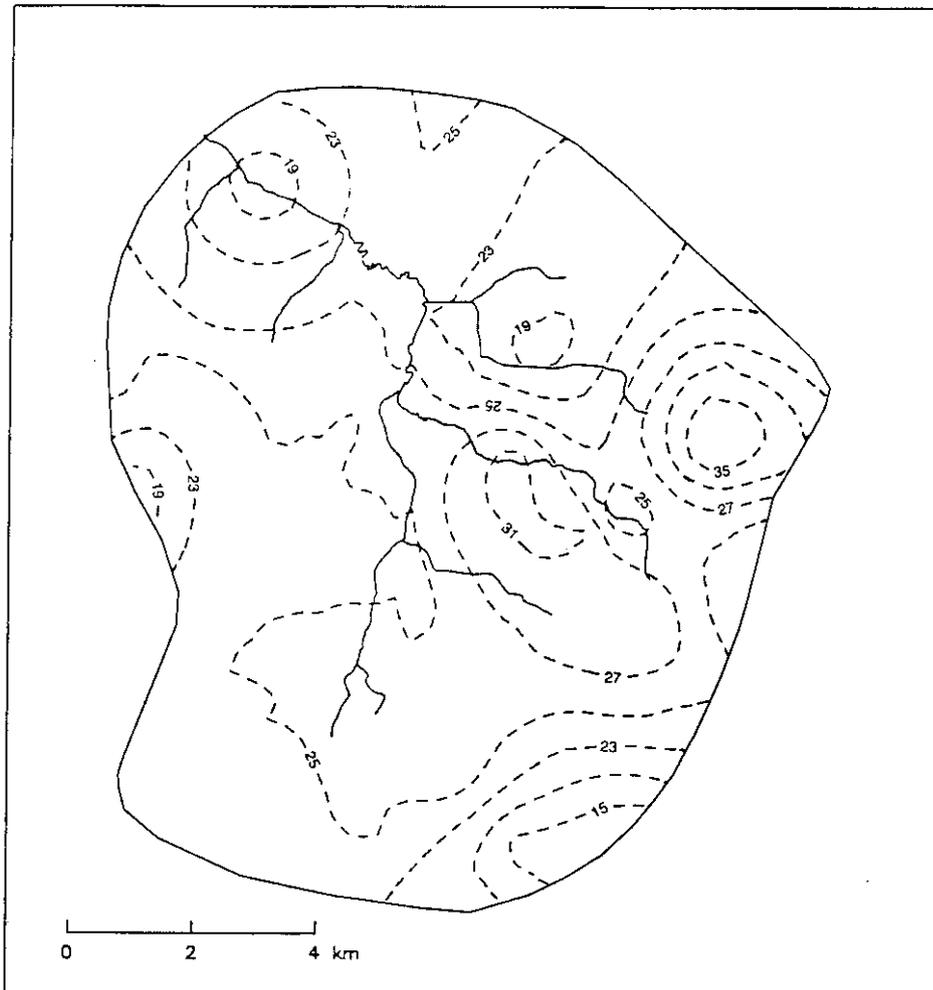


Abb. 6.11 Natrium-Konzentration in mg/l (einfaches Kriging)

Damit wird eine für die räumliche Interpolation sinnvolle Glättung erzielt, die umso größer ist, je höher der Anteil des Nuggeteffektes am Schwellenwert ist. Im Extremfall, bei reinem Nuggeteffekt (d.h. keiner räumlichen Korrelation) würden alle Meßwerte für alle Schätzpunkte das gleiche Gewicht bekommen, so daß die Schätzwerte mit Ausnahme der Meßpunkte überall dem Mittelwert der Meßwerte entsprächen.

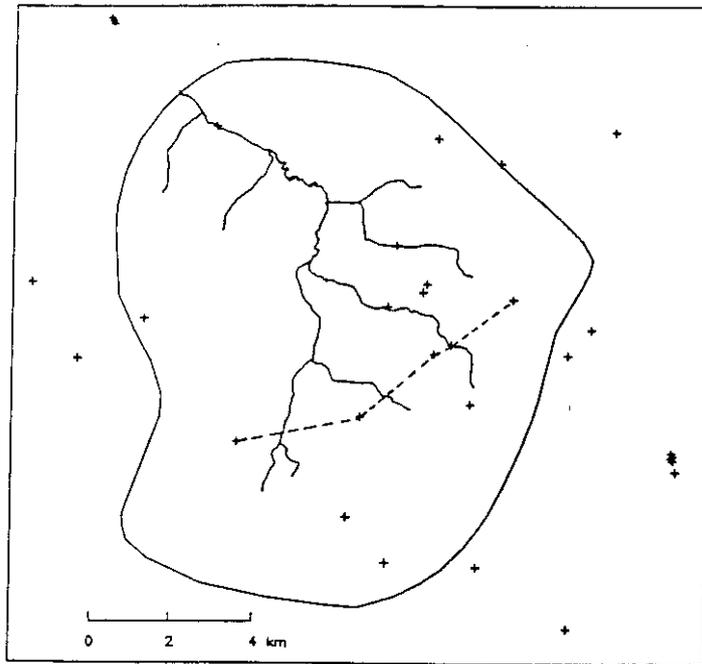


Abb. 6.12 Schnittpur (--) des Detailschnittes (s. Abb. 6.13)

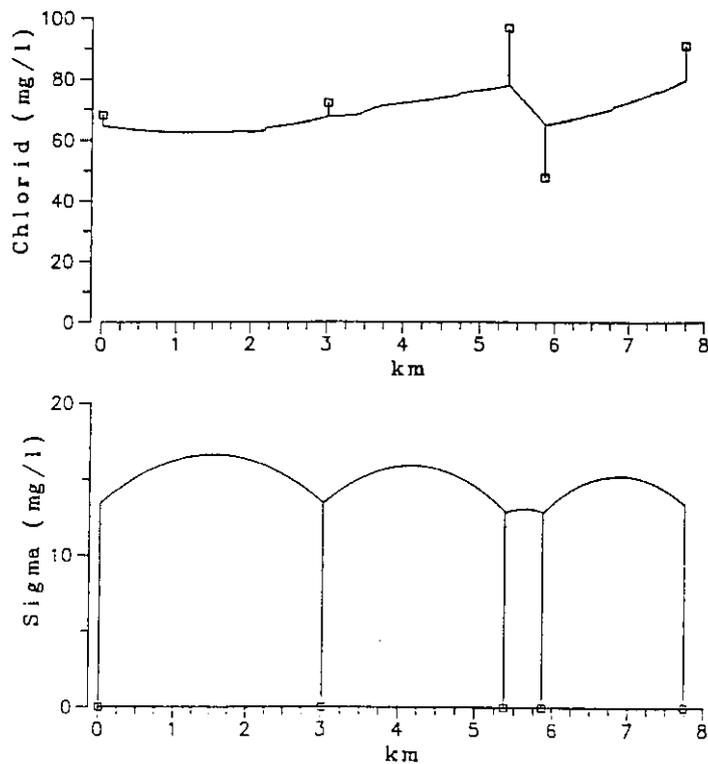


Abb. 6.13 Chlorid-Konzentration und dazugehöriger Standardschätzfehler (Sigma) entlang des Detailschnittes (s. Abb. 6.12). Quadrat: Meßpunkt

Der Standardschätzfehler ist an jedem Meßpunkt null (Abb. 6.13), steigt jedoch wegen des Nuggeteffektes schlagartig an. Dadurch ergibt sich in der Fläche ein recht hoher Sockelwert.

Darauf aufgesetzt ist die "normale" Unsicherheitskomponente, die zu einem bogenförmigen Linienverlauf zwischen den Meßpunkten führt. Ein hoher relativer Nuggeteffekt bewirkt daher auch eine räumliche Glättung des Standardschätzfehlers auf hohem Niveau. Es leuchtet ein, daß dies direkte Auswirkungen auf mögliche Ansätze zur Optimierung von Meßnetzen haben wird (s. Kap. 6.3).

6.2 Cokriging

Für die Erfassung der Grundwasserbeschaffenheit ist ein großer Aufwand bei der Probenahme und im Labor erforderlich. Deshalb ist auf diesem Gebiet die Prüfung der Einsatzmöglichkeiten des Cokriging-Verfahrens besonders angebracht. Die engen Beziehungen, die häufig zwischen den einzelnen Parametern existieren (HÖTZL 1982), könnten bei der Interpolation und der Meßnetzanalyse genutzt werden. Besonders interessant sind Korrelationen mit Parametern, die schnell und zuverlässig direkt vor Ort gemessen werden können. Vor allem die Leitfähigkeit, die auf einfache Weise im Gelände mit einer Meßsonde bestimmt wird, bietet sich für manche Inhaltsstoffe als Hilfsvariable an.

In der Tabelle 6.3 sind die Korrelationskoeffizienten der untersuchten Parameter mit der elektrischen Leitfähigkeit aufgeführt. Zum Calcium, Sulfat, Chlorid und Magnesium besteht eine enge Beziehung, beim Nitrat und Natrium ist sie deutlich schwächer ausgeprägt und beim Hydrogencarbonat, Kalium und dem pH-Wert ist keine signifikante Korrelation vorhanden.

Tab. 6.3 Korrelationskoeffizienten mit der el. Leitfähigkeit (n=31)

Ca ²⁺	Mg ²⁺	Na ⁺	K ⁺	SO ₄ ²⁻	HCO ₃ ⁻	Cl ⁻	NO ₃ ⁻	pH
0.85	0.78	0.51	0.08	0.84	0.34	0.81	0.58	-0.02

Im folgenden soll das Cokriging-Verfahren für Calcium und Natrium beispielhaft durchgeführt werden. Mit Korrelationskoeffizienten von 0.85 bzw. 0.51 wurden damit Parameter mit einem starken und einem deutlich schwächeren Zusammenhang ausgewählt.

Das empirische Kreuz-Semivariogramm für Calcium ist in der Abbildung 6.14 dargestellt. Daran wurde eine exponentielle Funktion mit einem Nuggeteffekt angepaßt. Sie erfüllt die Bedingung der Gl. (49), so daß in Verbindung mit den beiden Semivariogrammen ein funktionierendes Cokriging-Gleichungssystem aufgebaut werden konnte.

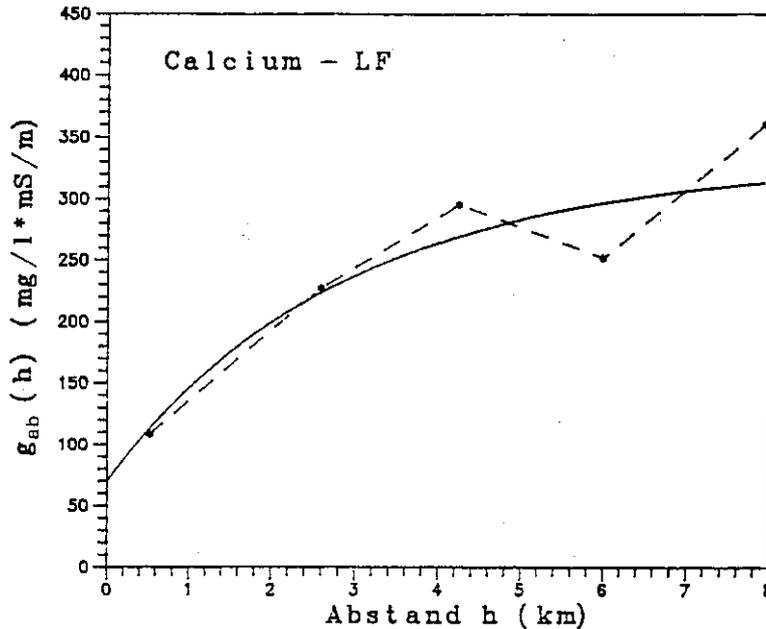


Abb. 6.14 Empirisches (--) und theoretisches Kreuz-Semivariogramm zwischen Calcium und el. Leitfähigkeit

Bei der Kreuzprüfung wurde die Werte der Hilfsvariablen am Meßpunkt und an den jeweils 10 benachbarten Meßstellen zur Schätzung der Calcium-Konzentration hinzugezogen. Damit ließ sich ein Mittlerer Quadratischer Fehler von 8.3 mg/l erzielen, was in etwa einer Halbierung gegenüber dem Ergebnis des einfachen Kriging-Verfahren entspricht. Mit einem Mittleren Fehler von -0.9 mg/l und einem SMQF-Wert von 0.95 wurden die zusätzlichen Kriterien der Kreuzprüfung voll erfüllt.

Die räumliche Interpolation des Calciums und die Berechnung des Standardschätzfehlers ergab ein sehr ähnliches Bild im Vergleich zum einfachen Kriging, so daß sich eine graphische Darstellung erübrigt. Mit 17.6 mg/l ist der mittlere Standardschätzfehler nur unwesentlich geringer als beim einfachen Kriging-Verfahren (18.2 mg/l). Die Zuverlässigkeit der Schätzung konnte also kaum erhöht werden. Eine Verbesserung wäre erst dann zu erwarten, wenn die Hilfsvariable in höherer räumlicher Dichte als die Hauptvariable erfaßt würde (s. Kap. 6.3.2).

An das empirische Kreuz-Semivariogramm des Natriums (Abb. 6.15) kann sehr gut ein sphärisches Modell angepaßt werden. Bei der Kreuzprüfung wurde damit ein Mittlerer Fehler von -0.2 mg/l bei einem SMQF-Wert von 1.04 erzielt. Der Mittlere Quadratische Fehler liegt mit 6.8 mg/l deutlich niedriger als beim einfachen Kriging-Verfahren (8.7 mg/l); die Verbesserung fällt aber geringer als beim Calcium aus.

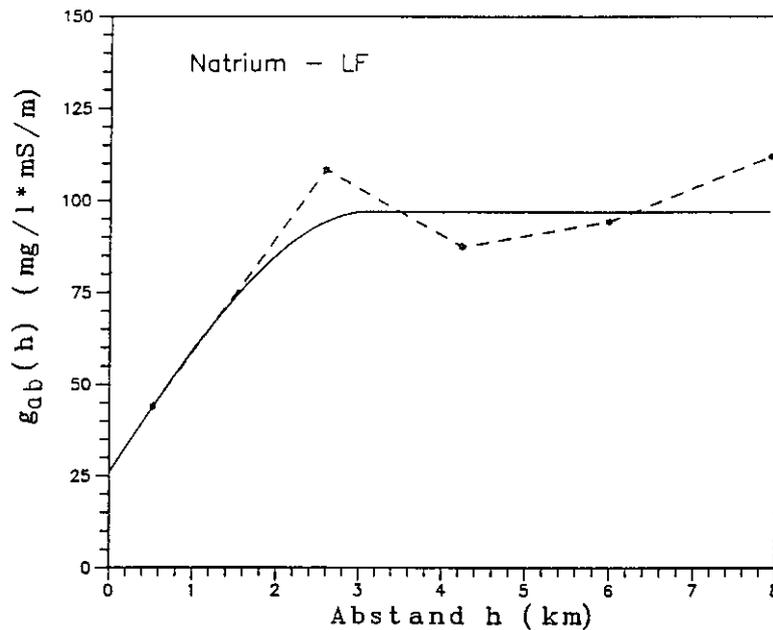


Abb. 6.15 Empirisches (--) und theoretisches Kreuz-Semivariogramm zwischen Natrium und el. Leitfähigkeit

Mit dem Cokriging-Verfahren wurde im Gebietsmittel der gleiche Standardschätzfehler ermittelt wie beim einfachen Kriging (8.7 mg/l). Während also beim Calcium noch ein geringer positiver Effekt festzustellen war, konnte die Zuverlässigkeit der Schätzung beim Natrium durch die Verwendung der Leitfähigkeitsmessungen nicht erhöht werden. Hierin kommt der schwächere Zusammenhang zwischen dem Natriumgehalt und der Leitfähigkeit zum Ausdruck. Auch für diesen Anwendungsfall gilt, daß für eine Erhöhung der Zuverlässigkeit der Schätzung zusätzliche Meßpunkte der Hilfsvariablen erforderlich wären.

6.3 Ansätze zur Optimierung des Meßnetzes

6.3.1 Beziehung zwischen Meßnetzdichte und Schätzfehler

Um die Optimierungsmöglichkeiten im konkreten Fall abschätzen zu können, ist es zweckmäßig, zunächst anhand von regelmäßigen Rastern den generellen Zusammenhang zwischen dem Standardschätzfehler und der Meßnetzdichte aufzuzeigen (s. Kap. 5.5.1).

In den Abbildungen 6.16 bis 6.18 sind diese Funktionen für die untersuchten Parameter zu finden. So wie beim Grundwasserstand ist auch hier eine kontinuierliche Abnahme des Standardschätzfehlers mit zunehmender Meßstellendichte in einer nicht linearen Funktion festzustellen.

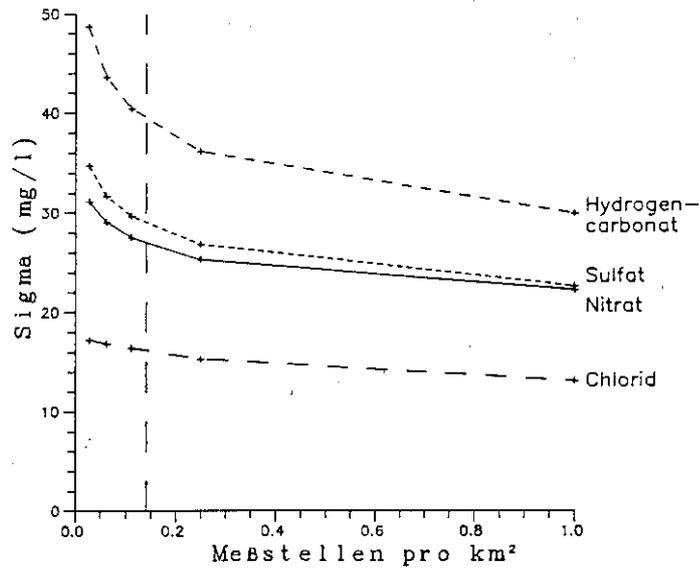


Abb. 6.16 Beziehung zwischen mittlerem Standardschätzfehler (Sigma) und Meßstellendichte (regelmäßiges Raster) bei den Kationen

Bei den Kationen liegt, wenn man die Absolutwerte betrachtet, das Calcium am höchsten, bei den Anionen das Hydrogencarbonat. Allerdings sollte bei der Interpretation der Abbildungen auch die Stoffkonzentration der einzelnen Parameter beachtet werden; so ist z.B. die Konzentration an Calcium um ein mehrfaches höher als die der anderen Kationen.

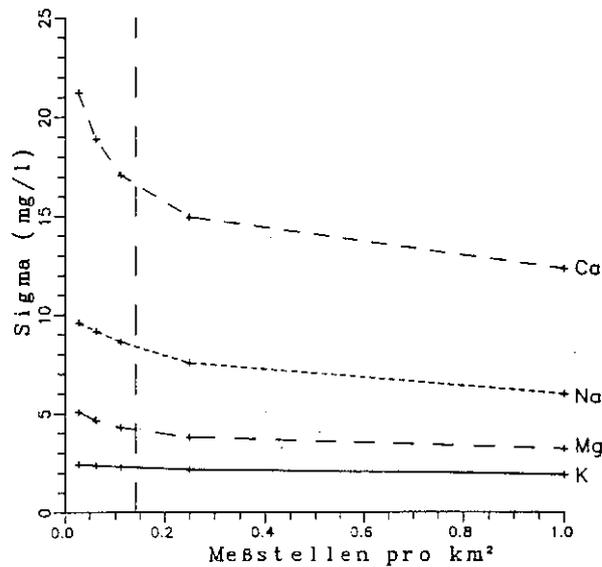


Abb. 6.17 Beziehung zwischen mittlerem Standardschätzfehler (Sigma) und Meßstellendichte (regelmäßiges Raster) bei den Anionen

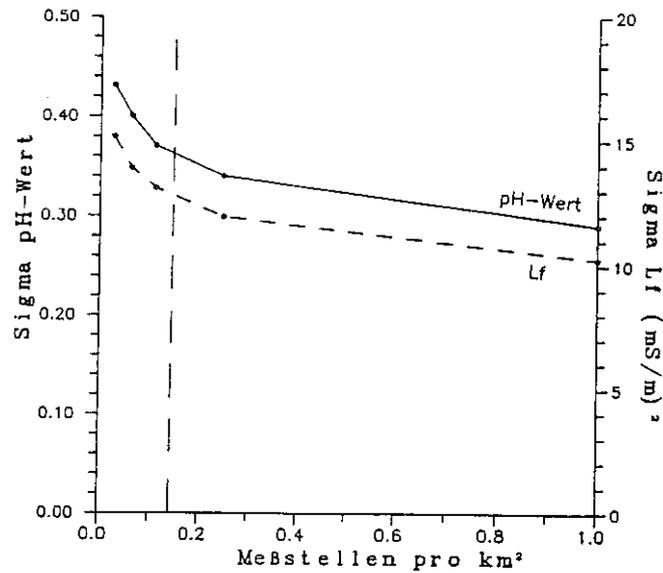


Abb. 6.18 Beziehung zwischen mittlerem Standardschätzfehler (Sigma) und Meßstellendichte (regelmäßiges Raster) bei dem pH-Wert und der el. Leitfähigkeit

Bedeutsam ist, daß der Standardschätzfehler relativ unempfindlich auf Meßnetzverdichtungen reagiert. Am ehesten wirken sie sich beim Calcium, Hydrogencarbonat, Sulfat, beim pH-Wert und der Leitfähigkeit positiv aus. Aber selbst bei diesen Parametern führt eine Verdichtung des Meßnetzes von 0.1 auf 1 Meßstelle pro km², was einer Verminderung des Rasterpunktabstandes von 3.33 km auf 1 km entspricht, nur zu einer Reduzierung des Standardschätzfehlers um ca. 30 Prozent. Beim Kalium, Chlorid und Nitrat vermindert sich die Unsicherheit der Schätzung mit steigender Meßstellendichte noch weniger.

Der Nuggeteffekt, dessen Anteil bei den letztgenannten Parametern besonders hoch ist, verhindert generell eine rasche Abnahme des Standardschätzfehlers mit steigender Meßstellenanzahl. Das hat zur Folge, daß eine starke Erhöhung der bestehenden Meßstellendichte nicht empfohlen werden kann; und dies, obwohl die bestehende Dichte von 0.13 Meßstellen/km² um ein mehrfaches geringer ist als beim Meßnetz zur Erfassung des Grundwasserstandes. Spätestens bei einer Meßstellendichte von 0.25 (= 2km-Raster) läßt sich der höhere Meßaufwand durch den Gewinn an zusätzlichen Erkenntnissen kaum noch rechtfertigen. Andererseits wäre auch eine Ausdünnung des Meßnetzes nicht zu empfehlen, da sonst bei einigen Parametern mit einem deutlichen Anstieg der Unsicherheit zu rechnen wäre.

6.3.2 Möglichkeiten der Optimierung

Die bisherigen Berechnungen haben gezeigt, daß sowohl eine Ausdünnung des Meßnetzes als auch eine generelle deutliche Erhöhung der Meßnetzdicke wenig sinnvoll erscheint. Eine Optimierungsstrategie könnte deshalb darin bestehen, vorhandene Meßlücken im Meßnetz zu

schließen. Wenn möglich, sollten die zusätzlichen Meßpunkte in ihrer Lage mit den bereits vorhandenen Meßstellen zur Messung des Grundwasserstandes übereinstimmen.

Da sich die Meßnetzgeometrie für die zehn untersuchten Parameter nicht unterscheidet, soll es hier genügen, die Auswirkungen der Meßnetzänderungen am Beispiel des Calciums durchzuführen. Dazu wurden die Bereiche mit den größten Unsicherheiten lokalisiert, dann die dazu am nächsten gelegenen Meßstellen zur Grundwasserstandsmessung bestimmt und diese dann als fiktive Meßpunkte für die Erfassung der Grundwasserbeschaffenheit eingefügt. Vor einer praktischen Durchführung dieser Vorgehensweise müßte natürlich geprüft werden, ob diese Meßstellen für die Entnahme von Wasserproben geeignet wären.

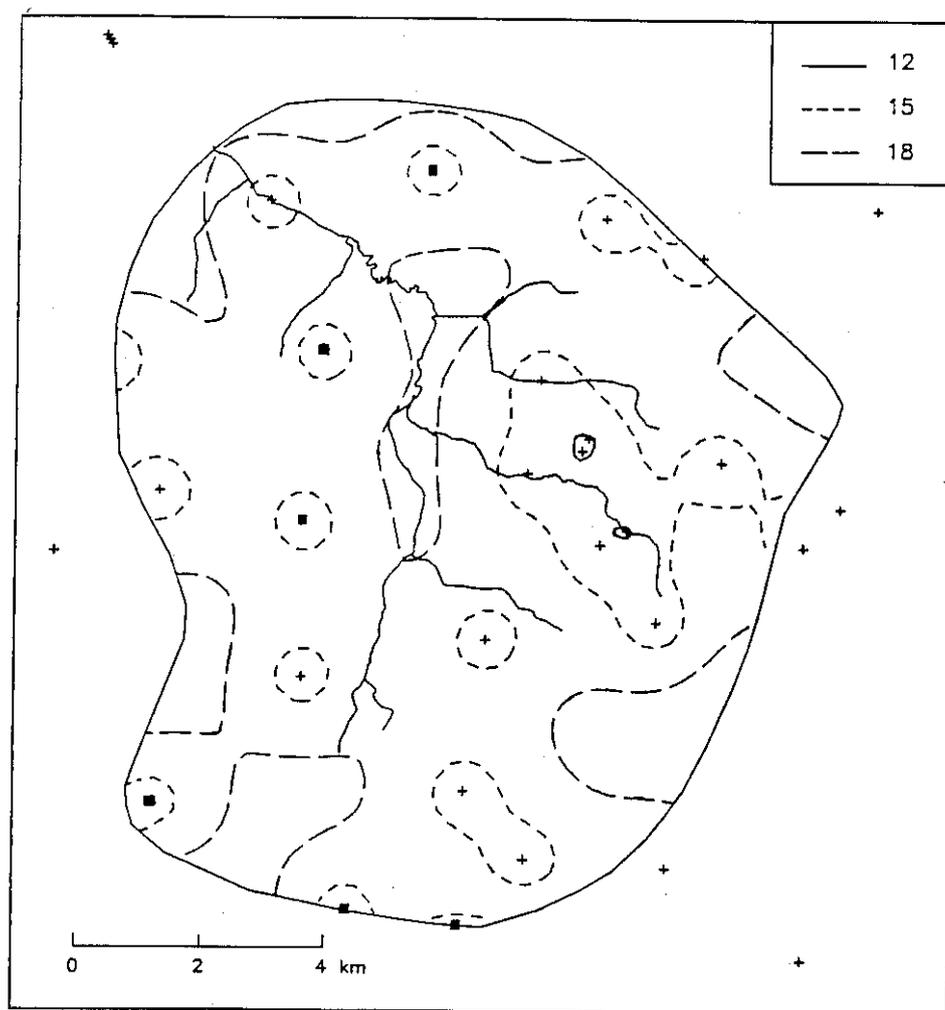


Abb. 6.19 Standardschätzfehler für Calcium in mg/l bei verändertem Meßnetz. Schwarze Vierecke: zusätzliche Meßstellen

Insgesamt wurden auf diese Weise sechs zusätzliche Meßstellen ins Meßnetz eingefügt (s. Abb. 6.19). Damit konnte der Standardschätzfehler im Gebietsmittel auf 16.6 mg/l (zuvor 18.2 mg/l) und der Maximalwert von 23.2 auf 20.1 mg/l gesenkt werden.

Mit dem Cokriging-Verfahren bietet sich ein zweiter Ansatzpunkt der Meßnetzoptimierung. Zu prüfen wäre, ob nicht durch zusätzliche Messungen der Leitfähigkeit an bereits bestehenden Meßstellen die Unsicherheit beim Übergang von der Punktmessung in die Fläche verringert werden könnte. Dazu wurden insgesamt 27 existierende Meßstellen für die Messung des Grundwasserstandes aus Gebieten ausgewählt, wo das Meßnetz zur Beobachtung der Grundwasserbeschaffenheit große Lücken aufweist. In der Abbildung 6.20 ist die Lage dieser simulierten zusätzlichen Leitfähigkeits-Meßpunkte zu finden.

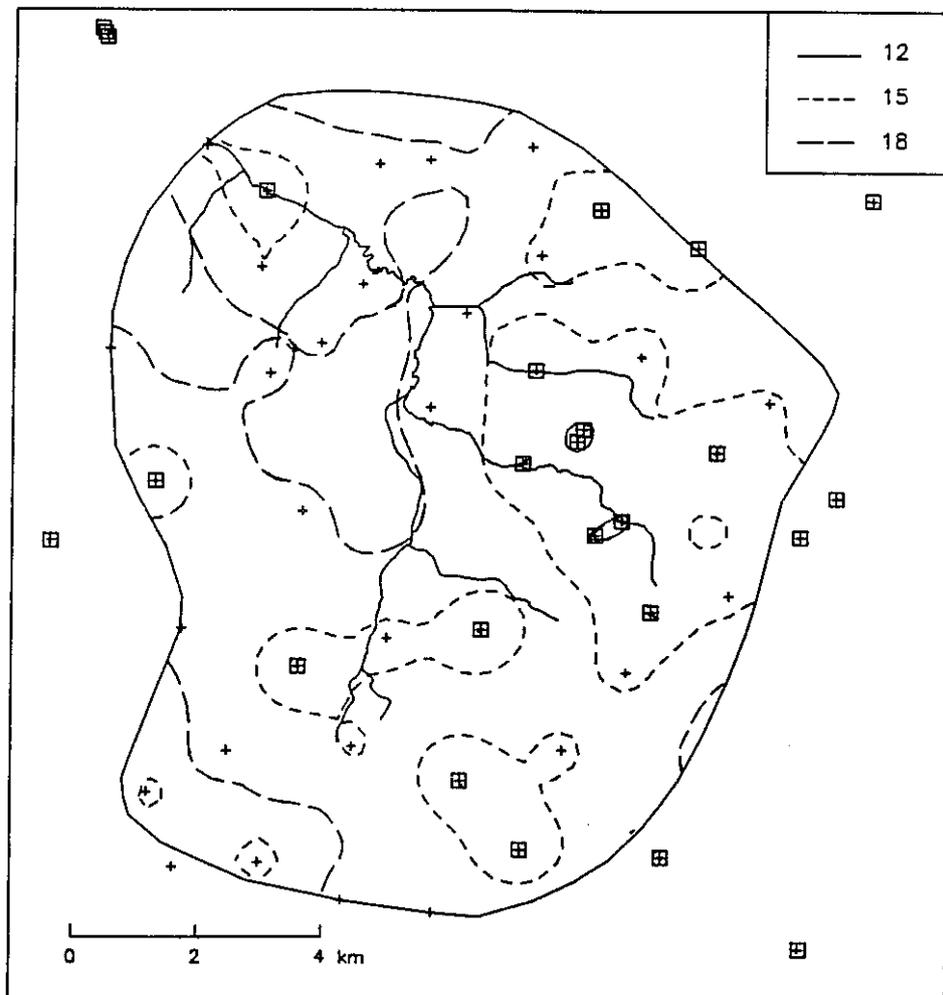


Abb. 6.20 Standardschätzfehler für Calcium in mg/l beim Cokriging-Verfahren. Quadrat: Calcium-Meßpunkt; Kreuz: Leitfähigkeits-Meßpunkt

Das Ergebnis des Cokriging-Verfahrens ist ebenfalls in der Abbildung 6.20 dargestellt. Zusätzlich zu den tieferen "Trichtern" in der Unsicherheits-Oberfläche, die durch kombinierte Calcium- und Leitfähigkeitsmessungen verursacht werden, sind auch kleinere Trichter, hervorgerufen durch alleinige Leitfähigkeitsmessungen, zu erkennen. Dadurch verringert sich der mittlere Standardschätzfehler auf 16.1 mg/l, der Maximalwert auf 20.2 mg/l. Somit läßt sich beim Calcium durch die Messung der elektrischen Leitfähigkeit an 27 zusätzlichen Meßstellen ein vergleichbarer Effekt erzielen wie durch sechs zusätzliche Calcium-Meßpunkte.

Die aufgezeigten Ansätze zur Optimierung können jedoch nicht darüber hinweg täuschen, daß auf diese Weise nur eine geringe Reduzierung des Standardschätzfehlers zu erreichen ist. Eine größere Wirkung wäre erst dann zu erwarten, wenn der Nuggeteffekt bei den einzelnen Parametern verringert und damit die Aussagekraft der Messungen erhöht werden könnte. Dies wäre wahrscheinlich durch eine tiefenspezifische Probenahme mittels Multilevel-Meßstellen oder Packersystemen möglich, da sie zu einer dreidimensionalen Abbildung der Konzentrationsverteilung im Grundwasserleiter führen. Dann könnte das Kriging-Verfahren mit wahrscheinlich geringeren Nuggeteffekten für verschiedene Tiefenzonen getrennt durchgeführt werden.

Auch die Daten zur Grundwasserbeschaffenheit aus anderen Untersuchungsgebieten, bei denen teilweise eine breitere Datenbasis zur Verfügung stand (MYERS et al. 1982, YATES, YATES 1987, SAMPER, NEUMANN 1989, SMYTH, ISTOK 1989, SPRUILL, CANDELA 1990), zeigen bei den Semivariogrammen generell einen hohen Nuggeteffekt-Anteil, so daß die Standardschätzfehler generell hohe Werte aufweisen. SAMPER und NEUMANN (1989) kommen daher nach der geostatistischen Auswertung von Grundwasseranalysen aus dem Madrider Becken ebenfalls zu dem Ergebnis, daß eine detaillierte Probenahme in drei Dimensionen für eine wesentliche Verbesserung des Informationsgehaltes erforderlich wäre.

7

Diskussion und Schlußfolgerungen

Im folgenden werden zunächst die angewendeten Kriging-Verfahren einer vergleichenden Betrachtung unterzogen (Kap. 7.1). Daran anschließend wird die grundsätzliche Eignung des Kriging-Verfahrens zur Meßnetzanalyse und Meßnetzoptimierung diskutiert. Die daraus resultierenden Schlußfolgerungen gelten in erster Linie für Grundwassermessnetze. Die grundsätzlichen Aussagen sind jedoch auch auf andere hydrologische Größen übertragbar.

7.1 Vergleichende Bewertung der Kriging-Verfahren

Die Urform der Kriging-Verfahren, das einfache Kriging, hat den Vorteil, unkompliziert in der praktischen Anwendung zu sein. Dadurch, daß das theoretische Semivariogramm direkt an das empirische Semivariogramm angepaßt und mit der Kreuzprüfung verifiziert werden kann, liefert es relativ eindeutige Ergebnisse (Objektivität) ohne allzu großen Arbeitsaufwand.

Sein Einsatz ist jedoch - zumindest aus theoretischer Sicht - auf räumlich stationäre Variablen beschränkt. Dennoch besteht für dieses Verfahren in der Praxis bei reinen Interpolationsaufgaben ein breites Einsatzfeld (siehe unten). Für die Analyse und Optimierung von Meßnetzen ist es nur dann zu empfehlen, wenn keine weiteren Informationen, z.B. von korrelierten Meßgrößen, vorliegen. Sonst besteht die Gefahr, daß die Qualität des Meßnetzes unterschätzt, d.h. der mittlere Standardschätzfehler überschätzt wird (s. Kap. 7.2).

Für instationäre, trendbehaftete Variablen wurde das einfache Kriging-Verfahren zum Universal Kriging erweitert. Da das empirische Semivariogramm nun durch die Driftkomponente verzerrt wird, müssen Annahmen über den Funktionstyp und die Koeffizienten des theoretischen Semivariogramms getroffen und mit der Kreuzprüfung überprüft werden.

Da zusätzlich der Grad der Polynomfunktion für die Driftkomponente festzulegen ist, muß über "Versuch und Irrtum" eine taugliche Kombination aus theoretischem Semivariogramm und Driftfunktion gefunden werden. Diese Vorgehensweise kann langwierig sein und führt nicht immer zu eindeutigen Ergebnissen. Unbefriedigend ist auch, daß die deterministische Komponente auf rein statistische Weise ermittelt wird und daher häufig nur eine geringe physikalische Bedeutung enthält (DAVIS J.C. 1986, GAMBOLATI, VOLPI 1979).

Aus den Ergebnissen der Kreuzprüfung mit dem Universal Kriging-Verfahren in Kap. 5.1 kann man schließen, daß die Verwendung einer Driftfunktion nur einen geringen Einfluß auf das Schätzergebnis und den dazugehörigen Standardschätzfehler ausübt. Nur dort, wo extrapoliert wird bzw. wo sehr ausgedehnte Meßlücken auftreten, ist eine wesentliche Beeinflussung der Schätzergebnisse durch die Wahl einer Driftfunktion möglich.

In der Abbildung 7.1 wird dies mit einem einfachen eindimensionalen Beispiel verdeutlicht. Solange nur interpoliert wird, sind die Schätzergebnisse und die Standardschätzfehler praktisch identisch. Erst bei der Extrapolation differieren die Ergebnisse sehr deutlich. Je höher der Grad der Driftfunktion, umso ausgeprägter wird die Drift aus den Meßwerten fortgeführt. Dabei wächst auch die Neigung zum "Überschwingen" an den Rändern verbunden mit hohen Standardschätzfehlern.

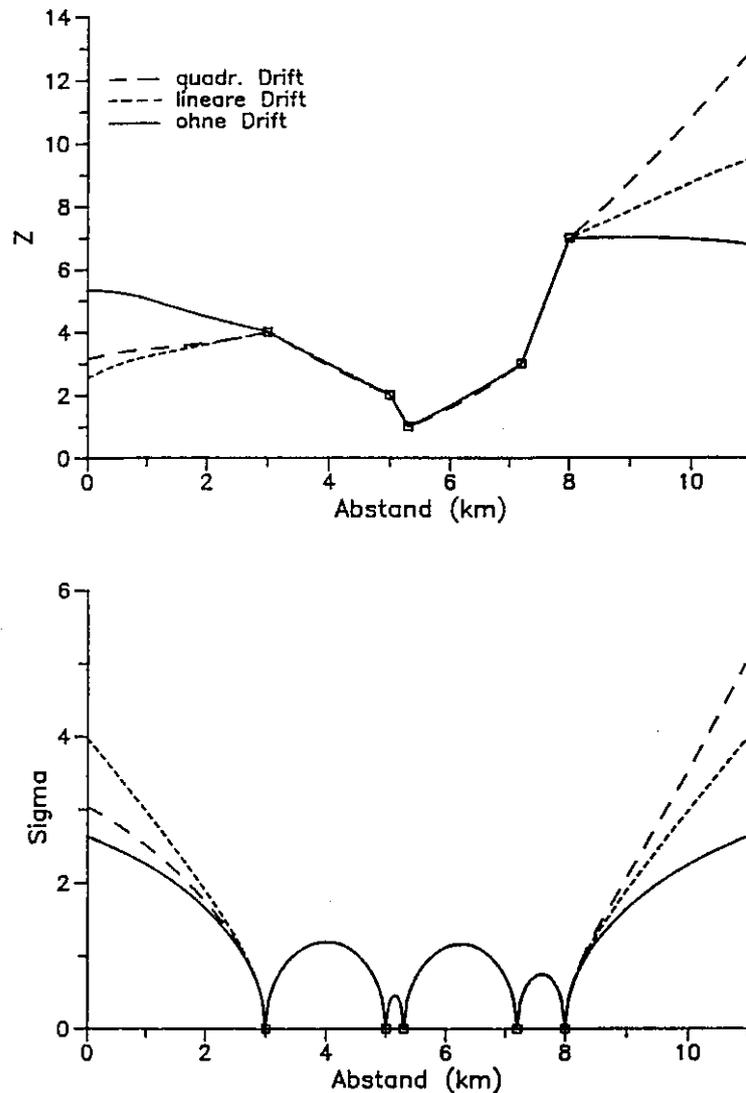


Abb. 7.1 Einfluß der Driftfunktion auf die Schätzung bei einem sphärischen Semivariogramm ($a = 7\text{km}$, $w = 6.5$, $c = 0$). Oben: Schätzung; unten: Standardschätzfehler. (Erläuterung siehe Fließtext)

In der praktischen Anwendung kann daher in der Regel auch bei instationären Variablen das einfache Kriging-Verfahren eingesetzt werden, ohne daß dadurch relevante Fehler entstehen. Der größere Aufwand, der durch die Wahl einer Driftfunktion entsteht, wird sich in den meisten Fällen nicht lohnen (VOLPI, GAMBOLATI 1978, JOURNAL 1986).

Die Anwendung des Kriging-Verfahrens mit generalisierten Kovarianzen führte in dieser Arbeit zu dem selben Ergebnis wie mit dem Universal Kriging-Verfahren. Allerdings wurde damit dieses Ergebnis sehr viel rascher erreicht. Die Berechnung eines empirischen Semivariogramms ist nicht erforderlich und die Koeffizienten der Kovarianzfunktion werden automatisch angepaßt.

Doch darin liegt auch eine gewisse Gefahr bei der Anwendung. Denn das Verfahren ist abstrakt und verlangt keine Auseinandersetzung mit den empirischen Daten. Dadurch besteht die Gefahr, daß dem Rechner zu sehr die Entscheidung über die Höhe der verschiedenen Koeffizienten überlassen wird. Beispielsweise kann die Frage, ob ein Nuggeteffekt vorliegt und wenn ja in welcher Höhe, nicht allein anhand der Meßwerte beantwortet werden. Erforderlich sind dazu auch Vorstellungen über den Charakter der Variablen und Kenntnisse über das Meßverfahren. Eine kritische Prüfung der Zwischenergebnisse ist notwendig, damit nicht physikalisch unsinnige Kovarianzfunktionen verwendet werden (siehe z.B. BROUWER, DEFIZE 1983).

Das Cokriging-Verfahren konnte in dieser Arbeit mehrfach wirkungsvoll eingesetzt werden. Es ist ein nützliches Verfahren, wenn zusätzliche Informationen von Hilfsvariablen zur Verfügung stehen. Der höhere Arbeitsaufwand für ein zusätzliches Semivariogramm und für ein Kreuz-Semivariogramm wird durch einen geringeren Standardschätzfehler belohnt, sofern der Zusammenhang zwischen beiden Variablen eng genug ist. Die Hilfsvariable sollte jedoch in höherer räumlicher Dichte als die Hauptvariable erfaßt sein und zur Berechnung des Kreuz-Semivariogramms sollten gemeinsame Meßpunkte in ausreichender Zahl vorhanden sein.

Eine noch deutlichere Reduzierung des Standardschätzfehlers war durch die Kombination des Kriging-Verfahrens mit einem deterministischen Modell erreichbar. Die zahlreichen Daten aus anderen Erkundungs- und Meßnetzen sowie Kenntnisse über die physikalischen Prozesse wurden damit intensiv genutzt. Allerdings ist in der praktischen Anwendung der erheblich wachsende Arbeitsaufwand bei der Datenbereitstellung für das Grundwassermodell zu beachten. Die Anwendung bleibt auch auf Variablen beschränkt, die sich mit deterministischen Verfahren modellieren lassen.

Die Kombination von Kriging mit deterministischen Modellen kann nicht nur zur Meßnetzanalyse eingesetzt werden. Auch bei der Kalibrierung von Modellen, bei Sensitivitätsstudien und bedingten Simulationen kann sich der kombinierte Einsatz von deterministischem Modell und Kriging-Verfahren lohnen (z.B. AHMED, MARSILY 1989, SCHAFMEISTER-SPIERLING, BURGER 1989, BARDOSSY, NACHTNEBEL 1989). Zukünftig ist daher mit einer steigenden Anzahl von Anwendungen auf diesem Gebiet zu rechnen.

7.2 Eignung des Kriging-Verfahrens zur Analyse von Meßnetzen

In Kap. 5 und Kap. 6 wurde gezeigt, wie das Kriging-Verfahren nicht nur zur Interpolation sondern auch zur Analyse von Meßnetzen eingesetzt werden kann. Dies wird dadurch möglich, daß das Kriging-Verfahren zu jedem Schätzwert den dazugehörigen Standardschätzfehler liefert. Die Unsicherheit bei der räumlichen Interpolation kann somit quantifiziert werden. Bereiche mit besonders hohen Standardschätzfehlern können lokalisiert werden. Bei der Interpretation der Standardschätzfehler-Karten sollte jedoch folgendes beachtet werden:

- (1) Das Ergebnis ist in hohem Maße von dem gewählten theoretischen Semivariogramm abhängig. Insbesondere die Steigung des Semivariogramms am Nullpunkt hat großen Einfluß auf die Höhe und das räumliche Verhalten des Standardschätzfehlers. Auf Veränderungen des Semivariogramms reagiert der Standardschätzfehler sehr viel sensibler als der Schätzwert selbst. Da das "wahre" Semivariogramm immer nur aus den empirischen Daten geschätzt werden kann, ist ausreichend

umfangreiches Datenmaterial erforderlich. Es wird für aussagekräftige empirische Semivariogramme und für die Kreuzprüfung benötigt. TAYLOR und BURROUGH (1986) sprechen von mindestens 30 Meßpunkten, nach HUGHES und LETTENMAIER (1981) sind erst bei etwa 50 Meßpunkten günstige Verhältnisse für die Anwendung des Kriging-Verfahrens zur Meßnetzanalyse gegeben.

- (2) Aus der Standardabweichung des Schätzfehlers läßt sich das Vertrauensintervall der Schätzung nur dann ableiten, wenn der Typ der Verteilungsfunktion des Schätzfehlers am Schätzpunkt bekannt ist. Üblicherweise wird eine Normalverteilung angenommen, so daß beispielsweise das Konfidenzintervall bei einer 5%-igen Irrtumswahrscheinlichkeit $\pm 2\sigma$ beträgt. Daß diese Annahme nicht immer zutrifft, wird dann deutlich, wenn das Konfidenzintervall physikalische Grenzen der Variablen überschreitet (z.B. bei negativen Stoffkonzentrationen).
- (3) Die Höhe des Standardschätzfehlers ist von dem gewählten Kriging-Verfahren abhängig. In dieser Arbeit lag der mittlere Standardschätzfehler bei den Grundwasserständen zwischen 0.85m (einfaches Kriging) und 0.6m (Kriging mit einem Grundwassermodell). Bei den Maximalwerten fiel der Unterschied mit 1.23m bzw. 0.75m noch deutlicher aus. Die unplausibel hohen Standardschätzfehler beim einfachen Kriging kommen dadurch zustande, daß vorhandene Informationen aus dem Untersuchungsraum (z.B. Morphologie, Geologie) und die Kenntnisse über die physikalischen Gesetzmäßigkeiten der Grundwasserströmung nicht verwendet werden. Daraus kann gefolgert werden, daß bei der Anwendung des einfachen bzw. universellen Kriging-Verfahrens auf Grundwasserstands-Meßnetze (z.B. BROUWER, DEFIZE 1983, SOPHOCLEOUS 1983) die Tendenz besteht, die tatsächlichen Standardschätzfehler in ihrer Höhe zu überschätzen. Das heißt, die Qualität des Meßnetzes würde damit unterschätzt.
- (4) Kriging kann zur Meßnetzanalyse nur in Gebieten mit einer ausreichenden Anzahl von Meßpunkten eingesetzt werden (s. Pkt. 1). Dies ist im allgemeinen in kleinen Gebieten nicht der Fall. Wird dann das Bearbeitungsgebiet ausgedehnt, erhöht sich zwar die Anzahl der Meßstellen, doch es wächst dann die Gefahr, daß sich die räumliche Struktur und damit auch das Semivariogramm der Variablen signifikant verändert. Eine Ausdehnung des Untersuchungsgebietes zur Verbesserung der Datenlage für die Berechnung des Semivariogramms ist deshalb nur dann zu empfehlen, wenn sich die geologischen, hydrologischen und topographischen Gegebenheiten nicht ändern. Das Problem, daß sich Meßnetze erst dann richtig analysieren und optimieren lassen, wenn bereits genügend Meßstellen vorhanden sind, könnte verringert werden, falls sich Semivariogramme aufgrund von Gebietseigenschaften regionalisieren ließen. Hierzu wären weitergehende Untersuchungen sinnvoll.

Beachtet man diese Einschränkungen und Hinweise, kann das Kriging-Verfahren in Übereinstimmung mit anderen Autoren (z.B. HUGHES, LETTENMAIER 1981, MARSILY 1986, SPRUILL, CANDELA 1990) als ein nützliches Werkzeug zur Meßnetzanalyse betrachtet werden. Es vermittelt eine gute Vorstellung über das jeweilige Anwachsen der Unsicherheit beim Übergang von der Punktmessung in die Fläche. Die Auswirkungen von Lücken im Meßnetz lassen sich damit zuverlässiger beurteilen. Bereits die Vorstufe des Kriging-Verfahrens, die Berechnung und Interpretation des Semivariogramms, kann zu interessanten und wichtigen Erkenntnissen führen (z.B. Meßfehler, Reichweite des Semivariogramms etc).

7.3 Eignung des Kriging-Verfahrens zur Optimierung von Meßnetzen

Bei der Optimierung von Meßnetzen kann man sich die Eigenschaft des Kriging-Verfahrens zu Nutze machen, daß zur Berechnung des Standardschätzfehlers die Meßwerte selbst nicht benötigt werden. Somit ist es möglich, die Auswirkungen von beliebigen Meßnetzänderungen auf die Höhe und die räumliche Verteilung des Standardschätzfehlers zu simulieren.

Als besonders nützlich erwiesen sich in dieser Arbeit die aufgestellten Beziehungen zwischen der Dichte eines regelmäßigen Meßnetzes und dem mittleren Standardschätzfehler. Damit lassen sich im konkreten Fall sehr rasch die Möglichkeiten und die Grenzen einer Meßnetzoptimierung ausloten. Aber auch hierbei gilt, daß das Ergebnis in hohem Maße von dem gewählten Semivariogramm abhängt. Eine ausreichende Datenbasis zur Bestimmung des empirischen Semivariogramms und für die Kreuzprüfung sollte vorhanden sein.

Semivariogramme sind dann zuverlässig zu berechnen, wenn in allen Abstandsklassen eine ausreichende Anzahl von Wertepaaren vorhanden ist. Dabei übt das Verhalten am Nullpunkt (Nuggeteffekt) einen besonders großen Einfluß auf die generelle Höhe des Schätzfehlers aus. Beim Aufbau eines Meßnetzes ist daher ein regelmäßiges, grobes Rastermeßnetz nicht zu empfehlen, da dann die kleinen Meßstellenabstände nicht vorkommen und dadurch das Verhalten des Semivariogramms am Nullpunkt nicht zuverlässig bestimmt werden kann. Besser ist es, wenn auch einige Meßstellen so eng positioniert werden, daß eine zuverlässige Berechnung des Semivariogramms auch für kleine Abstände ermöglicht wird (WARRICK, MYERS 1987). Damit wird dann der weitere Optimierungsprozeß erheblich erleichtert.

Bei der Bearbeitung der Grundwasserstandsdaten konnte gezeigt werden (Kap. 5.5.1), daß die Beziehung zwischen Meßnetzdichte und Standardschätzfehler stark durch die Wahl des Kriging-Verfahrens beeinflusst werden kann. Wird das einfache (univariate) Kriging-Verfahren zur Optimierung eingesetzt, obwohl zusätzliche relevante Informationen zur Verfügung stehen, besteht die Gefahr, daß zuviele Meßstellen zur Erreichung des Ziels installiert werden (s.a. SWITZER 1979).

Der schwächste Punkt im Optimierungsprozeß ist die Tatsache, daß sich das Optimierungskriterium in der Praxis nur sehr schwer quantifizieren läßt. Welcher Standardschätzfehler ist an welchem Punkt im Untersuchungsgebiet anzustreben? Welche Folgen hat es, wenn dieser Wert über- bzw. unterschritten wird? Das Festlegen eines bestimmten Grenzwertes läßt sich wissenschaftlich nur schwer begründen, da Kosten-Nutzen-Analysen von hydrologischen Meßnetzen kaum durchführbar sind. Weitere Forschungen wären wünschenswert, damit die subjektiven Komponenten bei der Definition des Optimierungsziels verringert werden können.

Bei der Optimierung der Standorte der Meßstellen sind nicht nur statistische Gesichtspunkte zu beachten. In der Praxis müssen Meßstandorte auch zahlreiche andere Kriterien erfüllen. Dazu gehören zum Beispiel die leichte Erreichbarkeit des Standorts, die möglichst geringe Beeinträchtigung der Landnutzung beim Bau und beim Betrieb der Meßstelle, die Verfügbarkeit eines geeigneten Beobachters, etc.

Da es weder machbar noch sinnvoll wäre, diese Restriktionen in Computerprogrammen zu berücksichtigen, wird auch in Zukunft nicht die Rechenmaschine, sondern der Meßnetz-Planer letztlich über Modifikationen des Meßnetzes entscheiden. Allerdings kann das Kriging-Verfah-

ren ihn bei dieser Arbeit wesentlich unterstützen, so daß er nicht mehr nur auf seine Erfahrung und Intuition angewiesen ist.

8 Zusammenfassung

Informationen zum Grundwasserhaushalt und zur Grundwasserbeschaffenheit werden in der Regel punktuell mittels Grundwassermessstellen gesammelt. Für viele Fragestellungen reicht die punktuelle Information jedoch nicht aus, so daß die räumliche Verteilung der Meßgröße geschätzt werden muß. Die Zuverlässigkeit des Schätzergebnisses wird in hohem Maße von der räumlichen Dichte der Punktmessungen im Untersuchungsgebiet bestimmt. Bislang liegen nur wenige Untersuchungen an bestehenden Meßnetzen zur Quantifizierung dieser Zuverlässigkeit vor. Für die Meßnetzplanung von Interesse ist auch, wie sich Veränderungen am Meßnetz auf die Genauigkeit der räumlichen Schätzung auswirken.

Zur Bearbeitung dieser Thematik werden in dieser Arbeit verschiedene Kriging-Verfahren eingesetzt. Dazu gehören das Universal Kriging, Kriging mit generalisierten Kovarianzen, Co-kriging sowie Kriging in Kombination mit einem deterministischen Verfahren. Da mit diesen Methoden nicht nur der Schätzwert, sondern auch dessen Zuverlässigkeit bestimmt werden kann, sind sie grundsätzlich zur Meßnetzanalyse einsetzbar.

Die Anwendung der Verfahren erfolgte mit Daten zum Grundwasserstand und zur Grundwasserbeschaffenheit aus dem Einzugsgebiet der oberen Schwalm (Niederrhein). Die Zuverlässigkeit der räumlichen Interpolation wird auf der Grundlage der bestehenden Meßnetze dargestellt; Möglichkeiten der Optimierung werden aufgezeigt.

Besonders aufschlußreich sind dabei die Diagramme, in denen die generelle Beziehung zwischen der Meßstellendichte und dem Standardschätzfehler für eine Meßgröße dargestellt wird. Damit ist rasch zu erkennen, welcher Informationsgewinn im konkreten Fall durch eine Verdichtung des Meßstellennetzes erreichbar ist, bzw. wie sich durch eine Ausdünnung des Meßnetzes die Unsicherheit im Raum erhöht.

So war für das untersuchte Meßnetz zur Grundwasserstandsmessung festzustellen, daß eine generelle Meßnetzdichte von mehr als einer Meßstelle pro km^2 für regionale Betrachtungen nicht sinnvoll wäre.

Bei der Analyse des Meßnetzes zur Erfassung der Grundwasserbeschaffenheit zeigte sich, daß hier mit hohen Unsicherheiten beim Übergang von der Punktmessung in die Fläche gerechnet werden muß. Die hohe Nuggetvarianz bei den meisten chemischen Parametern ist die Hauptursache für diese Unsicherheit. Dadurch ist auch der Informationsgewinn durch zusätzliche Meßstellen eng begrenzt.

Der Vergleich der verschiedenen Kriging-Verfahren macht deutlich, daß nicht nur durch zusätzliche Meßstellen, sondern auch durch fortgeschrittene Verfahren das Schätzergebnis verbessert werden kann. Mit dem multivariaten Cokriging-Verfahren kann durch die Verwendung von zusätzlichen Informationen die Zuverlässigkeit der Schätzung erhöht werden. Dies gilt in noch stärkerem Maße für die Kombination der Kriging-Methode mit einem deterministischen Verfahren (Grundwasserströmungsmodell). Das normale Kriging-Verfahren ist zwar einfacher anzuwenden, kann jedoch vorhandene zusätzliche Informationen nicht verwenden, so daß tendenziell die Qualität des Meßnetzes unterschätzt wird.

Der Einsatz der Kriging-Verfahren wird dadurch erschwert, daß sie nur in Gebieten mit einer ausreichenden Datengrundlage (Meßstellenanzahl) sinnvoll eingesetzt werden können. Durch

eine Regionalisierung von Semivariogrammen könnte diese Schwierigkeit möglicherweise verringert werden. Hierzu werden weitergehende Untersuchungen empfohlen.

9 Extended Summary

In many countries groundwater plays an important role in public and industrial water supply. Groundwater problems in many areas, caused by overuse or pollution, indicate clearly, that groundwater has to be managed and protected carefully.

In order to prevent or to solve these problems, insight in the behavior of groundwater is necessary. This is done by groundwater observation wells, where the water level and the water quality can be measured. But in many cases point measurements at observation wells are not sufficient. To get the required spatial information, estimates of the variable at unmeasured locations have to be made. Of course the reliability of the estimates depends on the density of the monitoring network.

Until now, little research has been done into quantifying the relationship between network density and accuracy of the estimated values. Therefore the objective of the present study is to test several methods for evaluating the quality of existing groundwater monitoring networks and to give guidelines for their optimization.

Several Kriging methods have been chosen to analyse the monitoring networks: Ordinary Kriging, Universal Kriging, Kriging with generalized covariances, Cokriging and Kriging in combination with a deterministic groundwater flow model. Knowing the spatial structure of the variable by calculating the semivariogram, Kriging methods provide not only estimated values at unmeasured locations they give also a measure of their accuracy (standard deviation of the estimation error).

It should be taken into account, that the accuracy of the estimated values do not depend directly on the measured values but on the semivariogram and the configuration of the measurement points. Therefore it is possible to evaluate the effect of changes in the network (for example additional observation wells) on the estimation error before actual measurements are carried out. Therefore Kriging methods are considered a suitable tool to analyse and optimize monitoring networks.

The Kriging approaches have been applied to a catchment of ca. 120 km² called "Obere Schwalm" in the Lower Rhine area. There the groundwater network for monitoring water levels consists of 138 observation wells. Samples for analysing groundwater quality have been taken at 31 sites. Based on these point measurements, spatial interpolation was carried out. To understand the uncertainty of the contours on the maps, the standard deviation of the estimation error has been plotted too.

In a next step some measurement points were removed from the data sets and fictitious points were added to simulate the effect of network changes on the reliability of the estimated values. Especially the developed diagram is instructive, showing for a given variable the general relationship between the network density (regular grid) and the standard deviation of the estimation error.

Based on this diagram, it can be easily realized, if a more dense monitoring network would lead to a substantial increase in spatial information or not. Thus in the studied area a network density of more than one well per km² to determine groundwater levels in a regional scale is not advisable. Otherwise the measurement effort would greatly increase obtaining only a minor decrease of the standard deviation of estimation error.

The analysis of the existing network for sampling groundwater quality in the study area results in a general uncertainty to a high degree of the estimated values. The main reason for that is a pronounced Nugget-Effect (discontinuity at the origin of the semivariogram), which occurred in most of the chemical parameters.

The comparison of the different Kriging methods indicates, that not only more observation wells, but also advanced methods are able to improve the reliability of the estimation. This is valid for the Cokriging approach too. It allows to use information on other spatially correlated variables, which are sampled generally better.

In this study the elevation data of the ground surface was used to estimate the groundwater table with the Cokriging system. Moreover, data on electrical conductivity of groundwater was used to estimate the concentration of some solutes (for instance calcium) too. In both cases the Cokriging method yields smaller estimation errors than the ordinary Kriging approach.

However, Kriging combined with a deterministic groundwater flow model led to the smallest standard deviation of estimation error. Including the physical knowledge about groundwater flow and further hydrogeological information (for example transmissivity, recharge, withdrawals) is very effective, particularly when the monitoring network is sparse.

Ordinary Kriging, which is easier to use, is advisable for analysing groundwater networks only when further useful informations are not available. Otherwise it tends to overestimate the standard deviation of the estimation error. In other words, it underestimates the real quality of the network.

The application of the Kriging methods require a sufficient number of measurement points. At least 30 measured locations should be available to get a meaningful semivariogram. The dilemma, that analysing and optimizing of a network is only possible, when many observation wells already exist, could be overcome by regionalisation of the semivariograms. Further research in this field is recommended.

Literatur

- ABOUFIRASSI, M., MARINO, M.A. (1983): Kriging of Water Levels in the Souss Aquifer, Morocco. *Mathematical Geology*, Vol. 15, 537-551
- AHMED, S., MARSILY, G. de (1987): Comparison of Geostatistical Methods of Estimating Transmissivity Using Data on Transmissivity and Specific Capacity. *Water Resources Research*, Vol. 23, No. 9, 1717-1737
- AHMED, S., MARSILY, G. de (1989): Co-Kriged Estimates of Transmissivities Using Jointly Water Level Data. In "Geostatistics" (ARMSTRONG, M., ed.), 615-628, Dordrecht
- AKIN, H., SIEMES, H. (1988): *Praktische Geostatistik*. Springer-Verlag, Berlin
- ARMSTRONG, M., JABIN, R. (1981): Variogram Models must be Positiv-Definite. *Mathematical Geology*, Vol. 13, No. 5, 455-459
- ARMSTRONG, M. (1984a): Common Problems Seen in Variograms. *Mathematical Geology*, Vol. 16, 305-313
- ARMSTRONG, M. (1984b): Problems with Universal Kriging. *Mathematical Geology*, Vol. 16, No. 1, 101-108
- BARDOSSY, A., NACHTNEBEL, P. (1989): Effect of the Observation Network Geometry on the Groundwater Solute Transport Modelling. In: "Contaminant Transport in Groundwater" (KOBUS, KINZELBACH eds.), 21-26, Balkema, Rotterdam
- BASTIN, G., LORENT, B. et al. (1984): Optimal Estimation of the Average Areal Rainfall and Optimal Selection of Rain Gauge Locations. *Water Resources Research*, Vol. 20, No. 4, 463-470
- BEAR, J. (1979): *Hydraulics of Groundwater*. McGraw-Hill, New York
- BENICHO, P. (1987): Prise en compte de la topographie pour la cartographie des champs pluviométriques statistiques. *La Météorologie*, VII, No. 19, 23-34
- BRACHT, M.J. VAN, ROMIJN, E. (1985): Redesign of Groundwater Level Monitoring Networks by Application of Kalmanfilter and Kriging Methods. *Proceedings Int. Symp. Stochastic Approach to Subsurface Flow, Montvillargenne, France, Int. Assoc. Hydrol. Res.*, (MARSILY, G. De, ed.), 117-129, Fontainebleau, France
- BROUWER, G.K., DEFIZE, P.R. (1983): Spatial Uncertainty in Piezometric Head. *Proceedings and Information No. 31 of the Committee for Hydrological Research TNO*, 118-128, Den Haag

- BUNDESANSTALT FÜR LANDESKUNDE UND RAUMORDNUNG (1963): Die naturräumlichen Einheiten auf Blatt 108/109 Düsseldorf-Erkelenz. Geogr. Landesaufnahme 1:200000, Bonn - Bad Godesberg
- CARR, J.R., McCALLISTER, P.G. (1985): An Application of Cokriging for Estimation of Tripartite Earthquake Response Spectra. *Mathematical Geology*, Vol. 17, 527-545
- CHIU, C.L. (ed.) (1978): AGU Chapman Conference on Application of Kalman Filtering Theory and Techniques to Hydrology, Hydraulics and Water Resources. Department of Civil Engineering, University of Pittsburgh, Pittsburgh
- CHUA, S.-H., BRAS, R.L. (1982): Optimal Estimation of Mean areal Precipitation in Regions of Orographic Influence. *Journal of Hydrology*, Vol. 57, 23-48
- CLARK, I. (1979): *Practical Geostatistics*. Applied Science Publishers, London
- CREUTIN, J.D., OBLED, C. (1982): Objective Analysis and Mapping Techniques for Rainfall Fields: An Objective Comparison. *Water Resources Research*, Vol. 18, No. 2, 413-431
- DAVID, D. (1976): The Practice of Kriging. In "Advanced Geostatistics in the Mining Industry", NATO-ASI, Ser.C24, (GUARASCIO, M. et al., eds.), 31-48, Reidel, Dordrecht
- DAVIS, B.M. (1987): Uses and Abuses of Cross-Validation in Geostatistics. *Mathematical Geology*, Vol. 19, No. 3, 241-248
- DAVIS, J.C. (1986): *Statistics and Data Analysis in Geology*. John Wiley & Sons, New York
- DELFINER, P. (1976): Linear Estimation of Non Stationary Spatial Phenomena. In "Advanced Geostatistics in the Mining Industry", NATO-ASI, Ser.C24, (GUARASCIO, M. et al., eds.), 49-68, Reidel, Dordrecht
- DELHOMME, J.P. (1976): Applications de la théorie des variables régionalisées dans les sciences de l'eau. Thèse, Univ. Paris VI
- DELHOMME, J.P. (1978): Kriging in the Hydrosiences. *Advances in Water Resources*, Vol. 1, No. 5, 251-266
- DELHOMME, J.P. (1979): Spatial Variability and Uncertainty in Groundwater Flow Parameters: A Geostatistical Approach. *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 2, 269-280
- DER MINISTER FÜR UMWELT, RAUMORDNUNG UND LANDWIRTSCHAFT (HRSG.) (1989): *Klima-Atlas von Nordrhein-Westfalen*. Düsseldorf
- DEUTSCHER VERBAND FÜR WASSERWIRTSCHAFT UND KULTURBAU (1982): Entnahme von Proben für hydrogeologische Grundwasser-Untersuchungen. DVWK-Merkblätter zur Wasserwirtschaft, H.1, Hamburg und Berlin
- DORHÖFER, G., JOSOPAIT, V. (1980): Eine Methode zu flächendifferenzierten Ermittlung der Grundwasserneubildungsrate. *Geologisches Jahrbuch*, Reihe C, H.27, 45-65

- GALLI, A., MEUNIER, G. (1987): Study of a Gas Reservoir Using the External Drift Method. In "Geostatistical Case Studies" (MATHERON, G., ARMSTRONG, M., eds.), 105-119, Reidel, Hingham
- GAMBOLATI, G., VOLPI, G. (1979): Groundwater Contour Mapping in Venice by Stochastic Interpolators, 1. Theory. Water Resources Research, Vol. 15, No. 2, 281-290
- GEER, F.C. VAN (1987): Applications of Kalman Filtering in the Analysis and Design of Groundwater Monitoring Networks. TNO Institute of Applied Geoscience, Delft
- GEOLOGISCHES LANDESAMT NRW (1972): Bodenkarte von Nordrhein-Westfalen 1:50 000. Blätter: L 4902 Erkelenz, L 4904 Mönchengladbach
- GIESECKE, J., SCHMITT, P., MEYER, H. (1983): Vergleich von Rechenmethoden für Gebietsniederschläge. Wasserwirtschaft 73, H. 1, S. 1-7
- GUTKNECHT, D. (1977): Überlegungen zur Anwendung mathematischer Abflußmodelle auf die Abflußvorhersage. Zeitschrift für Kulturtechnik und Flurbereinigung 18, 223-232
- HERSHFIELD, D. M. (1965): On the Spacing of Raingauges. Proc. WMO/IASH Symp. on the Design of Hydrological Networks, Quebec, IASH Publ. No. 67, 72-79
- HOEKSMAN, R.J., KITSANIDIS, P.K. (1985): Analysis of the Spatial Structure of Properties of Selected Aquifers. Water Resources Research, Vol. 21, No. 4, 563-572
- HÖLTING, B., KANZ, W., SCHULZ, H.-D. (1982): Geohydrochemie im Buntsandstein der Bundesrepublik Deutschland - Statistische Auswertung von Grundwasseranalysen. In: "Auswertung hydrochemischer Daten", Schriftenreihe des DVWK, H. 54, 87-193
- HÖTZL, H. (1982): Statistische Methoden zur Auswertung hydrochemischer Daten. In: "Auswertung hydrochemischer Daten", Schriftenreihe des DVWK, H. 54, 3-69
- HUGHES, J.P., LETTENMAIER, D.P. (1981): Data Requirements for Kriging: Estimation and Network Design. Water Resources Research, Vol. 17, No. 6, 1641-1650
- HUTCHINSON, P. (1970): A Contribution to the Problem of Spacing Raingauges in Rugged Terrain. Journal of Hydrology, Vol. 12, 1-14
- JOURNEL, A.G. (1985): The Deterministic Side of Geostatistics. Mathematical Geology, Vol. 17, No. 1, 1-15
- JOURNEL, A.G. (1986): Geostatistics: Models and Tools for the Earth Sciences. Mathematical Geology, Vol. 18, 119-140
- JOURNEL, A.G., HUIJBREGTS, J.C. (1978): Mining Geostatistics. Academic Press, New York
- KAFRITSAS, J., BRAS, R.L. (1981): The Practice of Kriging. Massachusetts Institute of Technology, Report No. 263

- KAGAN, R. L., (1966): On assessing the representativeness of pluviometric data. *Glav. Geof. Obs.*, vyp 191, 22-34, Leningrad
- KINZELBACH, W. (1986): *Groundwater Modelling*. Elsevier, Amsterdam
- KITANIDIS, P.K. (1983): Statistical Estimation of Polynomial Generalized Covariance Functions and Hydrological Applications. *Water Resources Research*, Vol. 19, No. 4, 909-921
- KITANIDIS, P.K., BRAS, R.L. (1980): Real-Time Forecasting with a Conceptual Hydrologic Model - 1. Analysis of Uncertainty. *Water Resources Research*, Vol. 16, No. 6, 1025-1033
- KLOSTERMANN, J. (1983): Die Geologie der Venloer Scholle (Niederrhein). *Geologisches Jahrbuch*, Reihe A, H. 66, Hannover
- LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL NRW (1985): *Grundwasserbericht 84/85*. Düsseldorf
- LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL NRW (1988a): *Grundwasserbericht 1987*. Düsseldorf
- LANDESAMT FÜR WASSER UND ABFALL NRW (1988b): *Grundwassergleichen Venloer Scholle*. Düsseldorf
- LANGBEIN, W.B. (1979): Overview of Conference on Hydrological Data Networks. *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 6, 1867-1871
- LANGGUTH, H.-R., VOIGT, R. (1980): *Hydrogeologische Methoden*. Springer, Berlin
- LÖHNERT, E.P., OSWALD, T. (1991): Ein Beispiel von Nitratverteilung und Stoffumsetzungen in einem pleistozänen Aquifersystem. *Wasser und Boden*, H. 2, 98-102
- MARSILY, G. DE (1986): *Quantitative Hydrogeology*. Academic Press, London
- MATHERON, G. (1963): Principles of Geostatistics. *Economic Geology*, Vol. 58, 1246-1266
- MATHERON, G. (1973): The Intrinsic Random Functions and their Applications. *Advances in Appl. Prob.*, Vol. 5, 438-468
- MOINARD, L. (1987): Application of Kriging to the mapping of a Reef from Wireline Logs and Seismic Data; a Case History. In "Geostatistical Case Studies" (MATHERON, G., ARMSTRONG, M., eds.), 93-104, Reidel, Hingham
- MOSS, M.E. (1979): Some Basic Considerations in the Design of Hydrologic Data Networks. *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 6, 1673-1676
- MOSS, M.E. (1982): Concepts and Techniques in Hydrological Network Design. WMO Operational Hydrology Report No. 19, WMO No. 580, Genf
- MYERS, D.E. (1982): Matrix Formulation of Cokriging. *Journal of Int. Assoc. Math. Geology*, Vol. 14, No. 3, 249-257

- MYERS, D.E. et al. (1982): Variogram Models for Regional Groundwater geochemical data. *Mathematical Geology*, Vol. 14, No. 6, 629-644
- NEUMANN, S.P., JACOBSON, E.A. (1984): Analysis of Nonintrinsic Spatial Variability by Residual Kriging with Application to Regional Groundwater Levels. *Mathematical Geology*, Vol. 16, No. 5, 499-521
- OBERMANN, P. (1981): Hydrochemische/hydromechanische Untersuchungen zum Stoffgehalt von Grundwasser bei landwirtschaftlicher Nutzung. *Besondere Mitteilungen zum Deutschen Gewässerkundlichen Jahrbuch*, Nr. 42
- OBERMANN, P., BUNDERMANN, G. (1982): Untersuchungen über Grundwasserverunreinigungen durch Nitrat infolge landwirtschaftlicher Nutzung. In: "Nitrat - Nitrit - Nitrosamine in Gewässern" (DEUTSCHE FORSCHUNGSGEMEINSCHAFT, Hrsg.), 51-72, Weinheim
- OLEA, R.A. (1975): Optimum Mapping Techniques Using Regionalized Variable Theory. *Kansas Geological Survey Series on Spatial Analysis*, No. 2, 137 p.
- OSTROWSKI, M.W. (1982): Ein Beitrag zur kontinuierlichen Simulation der Wasserbilanz. *Mitt. Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft*, H. 42, RWTH Aachen
- RAJAGOPAL, R. (1987): Large Data Bases and Regional Ground-Water Quality Assessments - An Iowa Case Study. *Groundwater*, Vol. 25, No. 4, 415-426
- RODDA, J.C. (1969): Hydrological Network Design - Needs, Problems and Approaches. *WMO/IHD Report No. 12*, Genf
- RODRIGUEZ-ITURBE, I., MEJIA, J.M. (1974): The Design of Rainfall Networks in Time and Space. *Water Resources Research*, Vol. 10, No. 4, 713-728
- ROUHANI, S., WACKERNAGEL, H. (1990): Multivariate Geostatistical Approach to Space-Time Data Analysis. *Water Resources Research*, Vol. 26, No. 4, 585-591
- SACHER, H.P. (1983): Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Parameterschätzung für mathematisch-numerische Grundwassermodelle. *Mitt. Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft*, H. 49, RWTH Aachen
- SAMPER, F.J., NEUMANN, S.P. (1989): Estimation of Spatial Covariance Structures by Adjoint State Maximum Likelihood Cross Validation, 3. Application to Hydrochemical and Isotopic Data. *Water Resources Research*, Vol. 25, No. 3, 373-384
- SCHAFMEISTER-SPIERLING, M.-TH., BURGER, H. (1989): Spatial Simulation of Hydraulic Parameters for Fluid Flow and Transport Models. In "Geostatistics" (ARMSRONG, M. ed.), 629-638, Dordrecht
- SCHENK, V. (1983): Erfahrungen beim Bau tiefer Grundwassermeßstellen und bei der Bestimmung des Probenahmezeitpunktes. *bbr*, H. 2, 51-56

- SCHENK, V. (1988): Die Belastung des Grundwassers im urbanen und ländlichen Raum unter besonderer Berücksichtigung kleiner Emissionen. IHP/OHP- Berichte, H. 8, Koblenz
- SCHILLING, W. (Hrsg.) (1987): Anwendungsmöglichkeiten des Kalman-Filter-Verfahrens in der Wasserwirtschaft. Mitteilung VII der Senatskommission für Wasserforschung, Deutsche Forschungsgemeinschaft, VCH, Weinheim
- SCHWALMVERBAND (1986): Aktivierung der Schwalm. Ökologisch-wasserwirtschaftliche Untersuchung. Band I-V. Brüggen
- SMYTH, J.D., ISTOCK, J.D. (1989): Multivariate Geostatistical Analysis of Groundwater Contamination by Pesticide and Nitrate: A Case History. In "Geostatistics" (ARMSTRONG, M. ed.), 713-724, Dordrecht
- SOLOW, A.R., GORELICK, S.M. (1986): Estimating Monthly Streamflow Values by Cokriging. *Mathematical Geology*, Vol. 18, No. 8, 785-808
- SOPHOCLEOUS, M. (1983): Groundwater Observation Network Design for the Kansas Groundwater Management Districts, USA. *Journal of Hydrology*, Vol. 61, 371-389
- SOPHOCLEOUS, M., PASCHETTO J.E., OLEA, R.A (1982): Ground-Water Network Design for Northwest Kansas, Using the Theory of Regionalized Variables. *Ground Water*, Vol. 20, No. 1, 48-58
- SPRECHER, K. (1988): Die Variabilität des Regens und ihre Wirkung auf den Abfluß mit Konsequenzen für das Meßnetz der Großer Runs. Diss. ETH Zürich
- SPRUILL, T.B., CANDELA, L. (1990): Two Approaches to Design of Monitoring Networks. *Ground Water* 28, No. 3, 430-442
- STARKS, T.H., FANG, J.H. (1982): The Effect of Drift on the Experimental Semivariogram. *Mathematical Geology*, Vol. 14, No. 4, 309-319
- STREIT, U. (1981) : Kriging - eine geostatistische Methode zur räumlichen Interpolation hydrologischer Informationen. *Wasserwirtschaft* 71, Nr. 7-8, 219-223
- SWITZER, P. (1979): Statistical Considerations in Network Design. *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 6, 1712-1716
- TAYLOR, C.C, BURROUGH, P.A. (1986): Multiscale Sources of Spatial Variation in Soil. III. Improved Methods for Fitting the Nested Model to One-dimensional Semivariogramms. *Mathematical Geology*, Vol. 18, No. 8, 811-821
- TOUSSAINT, B. (1987): Erfahrungen mit Eignungsprüfungen von Meßstellen zur Überwachung der Grundwasserbeschaffenheit. DGM 31, H.1, 1-11
- TRÖSCH, J. (1975): Numerische Simulation Dupuit'scher Grundwasserströmungen. Mitt. der Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie, Nr. 14/15, ETH Zürich

- VILLENEUVE, J.P., MORIN, G., et al. (1979): Kriging in the Design of Streamflow Sampling Networks. *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 6, 1833-1840
- VOGELBACHER, A. (1985): Simulation der Wasserbilanz in terrassierten Lößgebieten. *Verl. Beiträge zur Hydrologie, Kirchzarten*
- VOLPI, G., GAMBOLATI, G. (1978): On the Use of a Main Trend for the Kriging Technique in Hydrology. *Advances in Water Resources*, Vol. 1, 345-349
- VOLPI, G., GAMBOLATI, G. et al. (1979): Groundwater Contour Mapping in Venice by Stochastic Interpolators. *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 2, 291-297
- WARRICK, A.W., MYERS, D.E. (1987): Optimization of Sampling Locations for Variogram Calculations. *Water Resources Research*, Vol. 23, No. 3, 496-500
- WEBSTER, R., BURGESS, T.M., (1980): Optimal Interpolation and Isarithmic Mapping of Soil Properties, 1. The Semivariogram and Punctual Kriging. *Journal of Soil Sciences*, Vol. 31, 315-331
- WMO (1981): Guide to Hydrological Practices. Vol. 1, Data Acquisition and Processing. *World Meteorological Organisation, Publication No. 168*
- YATES, M.V., YATES, S.R. (1987): A Comparison of Geostatistical Methods for Estimating Virus Inactivation Rates in Ground Water. *Water Research*, Vol. 21, No. 9, 1119-1125