

Tagungsbeitrag zu :  
 Jahrestagung der DBG – Kommission I  
 Titel der Tagung:  
 Böden – eine endliche Ressource  
 Veranstalter:  
 DBG, September 2009, Bonn  
 Berichte der DBG (nicht begutachtete  
 online Publikation)  
<http://www.dbges.de/>

## Upscaling von Abflussprozessen mit Multitracer-Methoden Komplexität oder Generalisierung?

Holger Fröhlich<sup>1</sup>, Lutz Breuer<sup>2</sup>, Sander Huisman<sup>3</sup>, Kellie Vaché<sup>4</sup>, Hans-Georg Frede<sup>2</sup>

### Zusammenfassung

Tracerbasierte Mischungsmodelle eignen sich zur Ganglinienseparation, um hydrologische Modelle zu validieren. Bei der Anwendung in mesoskaligen Einzugsgebieten (EZG) ist von zentraler Bedeutung, ob die Informationen im Gebietsauslass das gesamte EZG repräsentieren, oder ob die hydrochemische und hydrologische Komplexität auf dieser Skala repräsentative Aussagen zu Abflussprozessen verhindert. Mithilfe tracerbasierter, multivariater, räumlicher Analysen konnte der Einfluss der hydrochemischen Heterogenität und der hydrologischen Komplexität, wie die Variabilität des Niederschlags, Skaleneffekte in Grundwasserspeichern und der Transport der unterschiedlichen Abflüsse durch das Gewässernetz, gezeigt werden. Dies macht im Kontinuum zwischen Komplexität im EZG und Einfachheit der Systemantwort am Gebietsauslass die vorgestellten diagnostischen Methoden notwendig.

<sup>1</sup>Sonderforschungsbereich 564, Universität Hohenheim, Garbenstrasse 13, 70593 Stuttgart  
[holger.froehlich@uni-hohenheim.de](mailto:holger.froehlich@uni-hohenheim.de)

<sup>2</sup>Institute for Landscape Ecology and Resources Management, Justus-Liebig-University Giessen, Heinrich-Buff-Ring 26, D-35392 Giessen.

<sup>3</sup>Institute of Chemistry and Dynamics of the Geosphere, Forschungszentrum Jülich GmbH, ICG-4, 52425 Jülich

<sup>4</sup>Oregon State University, Department of Forest Engineering, 015 Peavy Hall, Corvallis OR 97331-5706, USA

## 1 Einleitung und Motivation

Politische Vorgaben, wie die EU Wasserrahmenrichtlinie machen die Erarbeitung von Managementstrategien für mesoskalige Wassereinzugsgebiete (100-1000 km<sup>2</sup>) notwendig. Dies fordert die Wissenschaft, die Effekte der Landnutzung auf den Landschaftswasser- und Stoffhaushalt zu untersuchen (Stanghellini & Collentine 2008). Dies wird vorwiegend mit räumlich verteilten, biophysikalischen, hydrologischen Modellen, wie dem SWAT-Modell bearbeitet (Eckhardt et al. 2002). Die Darstellung der Herkunft und Verweilzeit des Wassers im EZG bleibt dabei eine Herausforderung (Sayama & McDonnell 2009). Tracerbasierte Methoden ermöglichen wertvolle Einblicke in die Hydrologie eines EZGs und können damit helfen, konzeptionelle Modelle zu hinterfragen und zu verbessern (Seibert & McDonnell 2002). Insbesondere für die Übertragung von hydrologischen Erkenntnissen auf größere Skalen, also das Upscaling, haben Tracer als hydrologische Informationsträger großes Potential (Soulsby et al. 2006). Eine zentrale Methode der Tracerhydrologie ist die Ganglinienseparation mit Mischungsmodellen. Diese nutzen die Tatsache, dass zwischen dem Input in ein EZG und dem Output durch Abfluss am Gebietsauslass Wasser in den verschiedenen Wasserspeichern unterschiedliche geochemische Signaturen (Endmembers) erhält. Wenn Wasserspeicher abflusswirksam werden, mischen sich die Wässer und deren Signaturen im Vorfluter. Mischungsmodelle ordnen dieses Mischsignal in linearen Gleichungssystemen den unterschiedlichen Abflüssen zu und geben damit Auskunft zur Abflusentstehung (Glg. 1).

$$x_i = I_i B \quad (1)$$

$x_i$ =Mischsignal,  $B$ =Speichersignaturen,  
 $I_i$ =Abflussanteile

Bisher wurden solche Mischungsmodelle hauptsächlich in kleineren EZG und auf der Hangskala angewandt. Auf der Mesoskala führt die räumliche Heterogenität der EZG-Charakteristika zu einer Vielzahl von Abflüssen und zu einem raumzeitlich differenzierten Abflussgeschehen. Mischungsmodelle interpretieren das Outputsignal jedoch als repräsentativ für das gesamte EZG. Für die Anwendung auf der Mesoskala müssen sie daher an die Rahmenbedingungen ange-

passt werden. Eine zentrale Frage ist dabei, ob die kleinräumige Komplexität ein repräsentatives Mischungsmodell verhindert oder ob sie im Abfluss auf der Mesoskala nivelliert wird und ein generalisiertes Mischungsmodell das gesamte EZG repräsentiert.

## 2 Multitracermethoden im Dill-EZG

Dieser Frage wurde im Rahmen des SFB 299 „Landnutzungskonzepte für periphere Regionen“ der Universität Giessen im EZG der Dill (Hessen) nachgegangen. Um die Vielzahl der möglichen Abflüsse zu erfassen, wurde die gelöste Fraktion der Wasserinhaltsstoffe Li, Na, K, Rb, Mg, Ca, Sr, Ba, B, Mo, U erfasst. Diese zeigen im Dill EZG quasi-konservatives Verhalten. Um die Frage „Komplexität vs. Generalisierung“ zu bearbeiten, werden folgend drei methodische Schritte vorgestellt: (1) die Erfassung der räumlichen hydrochemischen Variabilität, um hydrologische Einheiten abzuleiten, (2) Untersuchung der Repräsentanz dieser Einheiten als Abflusskomponenten am Gebietsauslass und (3) Vergleich von Mischungsmodellen unterschiedlicher Konzeption zur Untersuchung der Modellunsicherheit.

### 2.1 Räumliche Variabilität

Die räumlich verteilte Beprobung der Fließgewässer im Dill EZG zu unterschiedlichen Abflusssituationen gibt durch die hydrochemischen Beschaffenheitsmuster der Fließgewässer Aufschluss über Abflüsse und abflussverhalten: Grundwasser und Grundwasserprovinzen (Abb. 1) neritischer (III) und pelagischer Petrofazies (I, II) mit Differenzierung durch Mg, Ca, Sr und U, Punktquellen

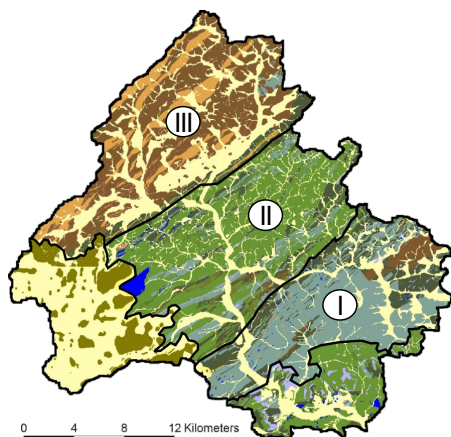


Abbildung 1: Petrofazies Einheiten des Dill EZG: pelagische Fazies (I,II); neritische Fazies (III)

[Kläranlagen B, Na, K, Rb; Stahlwerk: Mo] am anthropogen dominierten Dillunterlauf, sowie ereignisspezifische Abflüsse (Oberflächenabfluss und schneller Interflow in periglaziären Lagen).

Zudem konnte ein Skaleneffekt in der Wasserspeicherkapazität von Grundwasseraquiferen mit einem Gradienten von den Oberläufen zu größeren Teileinzugsgebieten und der Effekt der orographisch bedingten Niederschlagsverteilung (Nord-Süd-Gefälle) im Abflussverhalten des EZG nachgewiesen werden (Fröhlich et al. 2008).

### 2.2 Repräsentanz der Systemantwort

Um die Repräsentanz des EZGs am Gebietsauslass zu untersuchen, wurde die multivariate hydrochemische Zeitreihe durch Eigenvektorextraktion (PCA) in ein Koordinatensystem überführt, entlang dessen Achsen die hydrochemische Zeitreihe variiert (Glg. 2,  $X$ =Korrelationsmatrix des Systemoutputs) (Hooper 2003). Dann wurden Zeitreihen von neun Teil-EZG in dieses Koordinatensystem projiziert (Glg. 3).

$$U = XV^T \quad (2)$$

$$Y_{proj} = Y_{obs} V^T (VV^T)^{-1} V \quad (3)$$

$$E = Y_{proj} - Y_{obs} \quad (4)$$

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_{ij} - y_{ij})}{\bar{y}_j} \quad (5)$$

Die Residuen  $E$  (Glg. 4) dieser Projektionen geben Auskunft, wie die Teileinzugsgebiete am Gebietsauslass repräsentiert sind, besonders ob hydrochemisch oder hydrologisch andere Abflussprozesse vorherrschen.

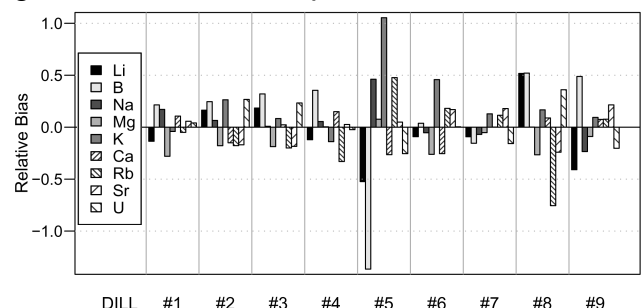


Abbildung 2: Relativer systematischer Trend der Projektionsresiduen der hydrochemischen Zeitreihen von neun Teil-EZG der Dill

Die Residuen der Teil-EZGs der Dill zeigen erhebliche systematische Abweichungen (Glg. 5,  $\hat{y}$ =projizierte,  $y$ =beobachtete und  $\bar{y}$  =mittlere Stoffkonzentration) zwischen

beobachteten und projizierten Stoffkonzentrationen. Die Teil-EZG zeigen eine eigene hydrochemische Variabilität, die zumindest teilweise nicht am Gebietsauslass des Gesamt-EZG der Dill repräsentiert wird. Anhand der Residuen lassen sich dennoch Tracer bestimmen, die im Gesamteinzugsgebiet eine ähnliche Variabilität aufweisen, was die Formulierung eines repräsentativen Mischungsmodells ermöglicht. Im vorliegenden Fall sind Rb und Mg geeignete Tracer für ein Mischungsmodell (Abb. 3) mit den Abflusskomponenten Grundwasserabfluss (hellgrau), Punktquellen (schwarze Dreiecke) und ereignisspezifischer Abfluss (dunkelgrau).

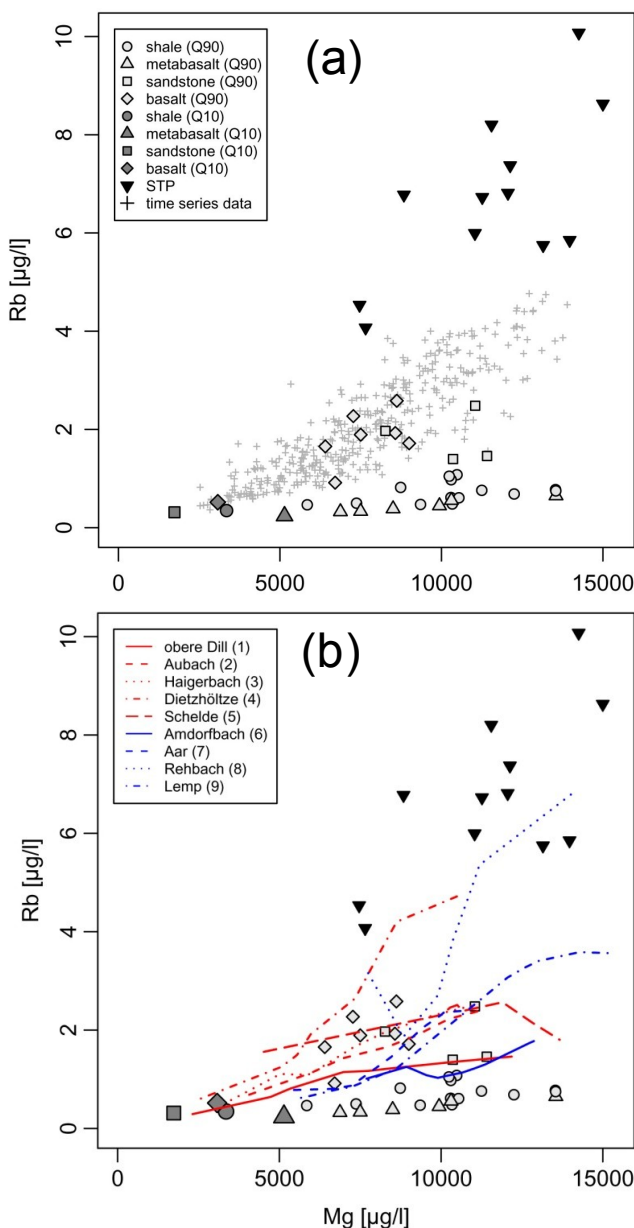


Abbildung 3: Fliessgewässersignaturen und End-member der Abflusskomponenten im Rb/Mg-Mischungsdiagramm für (a) die Zeitreihe am Gebietsauslass und (b) Teil-EZG der Dill.

### 2.3 Modellunsicherheit

Bei jeder Entscheidung für ein Modell bleibt die Unsicherheit über die Richtigkeit der Annahmen. Der Vergleich von alternativen Konzepten ist daher eine Möglichkeit, die Modellunsicherheit zu erfassen. In einem ersten Mischungsmodell wurden die drei Abflusskomponenten für das gesamte EZG ermittelt. Die hydrochemische Variabilität (statistische Unsicherheit) der End-Member wurde dabei in einer Monte-Carlo Simulation mit Uniform Sampling ( $n=1000$ , 90% Interquantil) integriert. In einem zweiten Modell wurden zuerst die Abflusskomponenten für die neun Teileinzugsgebiete analog dem ersten Modell in einer Monte-Carlo Simulation berechnet und dann über die Abflüsse der Teil-EZG mit Gauß'scher Fehlerfortführung zu Abflusskomponenten für das gesamte EZG zusammengefasst. Damit berücksichtigt das zweite Modell das räumliche Abflussgeschehen.

Im Vergleich der Modelle zeigt das räumlich verteilte Modell im absteigenden Ast eines Hochwassers (Abb. 4) ein auf kleiner Skala bekanntes Verhalten: zu Beginn eine schnelle Zunahme des grundwasserbürtigen Abflussanteils und dann ein allmähliches Einstellen der Situation vor dem Niederschlagsereignis. Das erste Modell oszilliert deutlich mit den Stoffkonzentrationen am Gebietsauslass und mit der Verhältniszahl von Teil-EZG gering und stark mineralisierter Grundwasserfazies. Das Modell kalkuliert also einen stark schwankenden Grundwasserbeitrag, wo eigentlich nur die Anteile hydrochemisch verschiedener Grundwässer variieren. Damit repräsentiert das einfache erste Modell das Abflussgeschehen im EZG nicht adäquat.

### 3 Komplexität vs. Generalisierung

Für die eingangs gestellte Frage lässt sich für das EZG der Dill zusammenfassen: Einerseits werden ganze Teil-EZG im mesoskaligen Traceroutputsignal nicht adäquat repräsentiert, was schließlich Fragen der hydraulischen Konnektivität der erfassten Abflusskomponenten aufwirft. Eine ausgeglichene Systemantwort macht eine vereinfachte, also generalisierte Definition von Abflusskomponenten notwendig. Andererseits führt die Komplexität auf der Mesoskala, wie räumlich heterogener Grundwasserabfluss

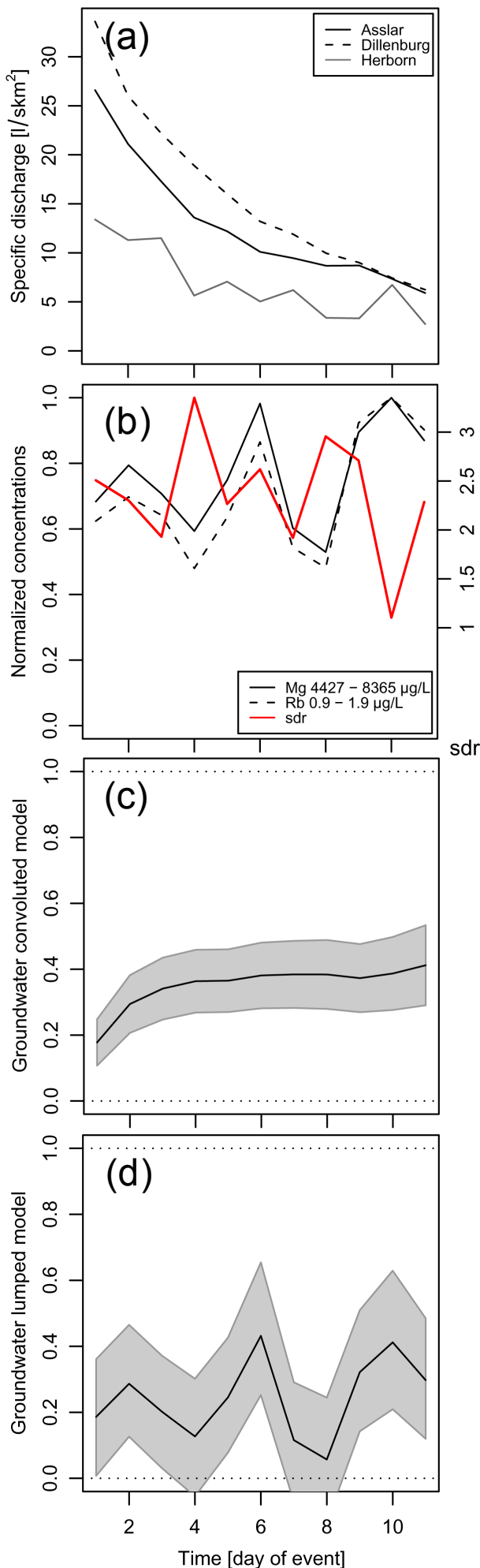


Abbildung 4: Abflussereignis im hydrologischen Jahr 2005 mit (a) Hydrographen, (b) Chemographen und spezifischem Abflussverhältnis zwischen nördlichem und südlichem EZG der Dill (sdr), (c) Grundwasserabfluss mit Median (schwarze Linie) und 90% Interquantil (graues Band) des verteilten Modells und (d) des gelumpeten Modells.

und Niederschlagsverteilung dazu, dass die Systemantwort nicht repräsentativ für das Gesamteinzugsgebiet ist und nicht von der Situation aus Kleinstzugsgebieten übertragen werden kann. Dadurch wachsen mit zunehmender Einzugsgebietsgröße auch statistische Unsicherheit und Modellunsicherheit eines Mischungsmodells. Dies macht für ein Upscaling hydrologischer Prozesse mit mesoskaligen Mischungsmodellen die angewendeten diagnostischen Methoden und zusätzliches Expertenwissen wie Informationen zum Bodenwasserhaushalt immer notwendig.

#### Dank

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des SFB 299 von der DFG und von der Forschungsbeihilfe für Jungwissenschaftler der JLU Giessen gefördert.

#### Literatur

- Eckhardt, K. et al. (2002), *Phys Chem Earth Pt A/B/C*, DOI:10.1016/S1474-7065(02)00048-7
- Fröhlich, H. et al. (2007). *Hydrol Process*, DOI: 10.1002/hyp.6804
- Hooper, R. P. (2003) *Water Resour Res*, DOI:10.1029/2002WR001528
- Sayama, T. und J. J. McDonnell (2009) *Water Resour Res*, DOI:10.1029/2008WR007549
- Seibert, J. und J. McDonnell (2002) *Water Resour Res*, DOI: 10.1029/2001WR000978
- Soulsby, C. (2006) *Hydrol Process*, DOI: 10.1002/hyp.6338
- Stanghellini, P.S.L. und D. Collentine (2008) *Hydrol Earth Syst Sci*, 12, 317-331