

**Methodische Entwicklung zur Berechnung
des Grundwasserflurabstandes in Festgesteinen
als Bestandteil von Wasserhaushaltsmodellen**

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der
Naturwissenschaftlichen Fakultät III
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von Herrn Ronny Lähne
geb. am 12.10.1977 in Eisleben

Gutachter:

1. Prof. Dr. Peter Wycisk
2. Prof. Dr. S. Wohnlich

Halle (Saale), verteidigt am 27.01.2014

Tales sunt aquae qualis terra per quam fluunt.

Die Gewässer sind so beschaffen, wie das Land, durch das sie fließen.

(Plinius d.Ä. 23-79 n.Chr.)

Danksagung

Ich möchte all jenen an dieser Stelle danken, die mich in den letzten Jahren durch ihre tatkräftige Hilfe und Diskussionsbereitschaft unterstützt haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. P. Wycisk, Fachgruppe Hydro- und Umweltgeologie der Martin-Luther-Universität für die Idee zur Arbeit, die Unterstützung und die Betreuung, die zur Entstehung der Arbeit beigetragen haben.

Herrn PD Dr. Wolfgang Gossel danke ich für die anregenden, fachlichen Diskussionen, insbesondere im Rahmen der hydrogeologischen Modellierung und bei der Entwicklung des Verfahrens Hydro-FaBer. Zudem möchte ich zwei ehemaligen Mitstreitern in der Fachgruppe Hydro- und Umweltgeologie danken. Sowohl für die ausführlichsten, wissenschaftlichen Diskussionen, als auch für ihre angenehm menschliche Art und die schöne Zeit sei hiermit Dr. Tobias Hubert und Dipl.-Geol. Christian Neumann gedankt. Einem weiteren Kollegen der Arbeitsgruppe sei in Person von Dr. Reiner Stollberg für seine Hilfe im Rahmen der Kalibrierung des hydrogeologischen Modells gedankt. Zudem möchte ich Herrn Dr. M. Falkenhagen für seine Hilfestellung im Themenbereich der Statistik danken.

Des Weiteren möchte ich folgenden Institutionen danken, ohne die diese Arbeit ebenfalls nicht möglich gewesen wäre. Ich danke dem HLUG und den Stadtwerke Eschwege für die problemlose Möglichkeit, ihre Daten für meine Arbeit zu nutzen. Zudem möchte ich dem Land Sachsen-Anhalt danken, welches mir ein zweijähriges Stipendium zur Verfügung stellte.

All jenen aus meinem persönlichen Umfeld, denen ich hier nicht namentlich danke, sei hiermit mein Dank vermittelt. Ich weiß, wie wichtig ihr wart und hiermit: Vielen Dank für all die kleinen und großen Dinge, die diese Arbeit ermöglichten und mein Leben bereicherten und bereichern.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Dissertation ohne unzulässige Hilfe und ohne andere als den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommen Gedanken sind als solche gekennzeichnet.

Weiterhin versichere ich, dass die vorgelegte Arbeit weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder in ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde zum Zwecke einer Promotion oder eines anderen Prüfungsverfahrens vorgelegt und in ihrer Gesamtheit noch nicht veröffentlicht wurde.

Kurzzusammenfassung

Die Erstellung von geologischen Strukturmodellen und deren Anwendung in Fragestellungen von Grundwassermodellierungen wird zunehmend zum Standard in den Geowissenschaften. Insbesondere für Strömungs- und Transportmodellierung ist die Integration von 3D Strukturdaten unabdingbar. Durch den Einsatz von interaktiven Modellierungstechniken können die geologischen Verhältnisse gut abgebildet werden.

Im Rahmen der hydrogeologischen Modellierung müssen Parameter, wie z.B. der Grundwasserflurabstand oder die Grundwasserneubildung vor der Modellierung berechnet oder abgeschätzt werden. Der Grundwasserflurabstand in Bereichen mit Festgesteinsverbreitung kann vor einer Modellierung bislang nur unzureichend abgeschätzt werden, wenn keine Messstellen in diesem Bereich vorhanden sind. Diese Information ist aber z.B. für die Berechnung der Grundwasserneubildung notwendig. Für diese Fragestellung wurde das neue Verfahren Hydro-FaBer entwickelt, welches auf Basis von Informationen eines Digitalen Geländemodells und der Lage der Bäche beruht. Durch dieses Verfahren ist es durch diese allgemein verfügbaren Informationen schnell möglich, den Grundwasserflurabstand abzuschätzen. Durch den Vergleich mit bereits bestehenden Verfahren kann gezeigt werden, dass durch die Anwendung des Verfahrens Hydro-FaBer realistischere Ergebnisse erzielt werden können.

Neben der eigentlichen Modellerstellung wurde im Rahmen der Arbeit ein weiteres Augenmerk auf die Kalibrierungsgüte gelegt. Dabei wurden die Standardverfahren angewandt, aber im Nachgang deren Güte und Aussagekraft betrachtet. Insbesondere kann anhand von generischen Datensätzen gezeigt werden, dass diese Verfahren zwar dazu dienen können, eine Modellkalibrierung zu optimieren, aber dass die Gütekriterien nicht zu verallgemeinern sind. Dadurch können verschiedene Modellgebiete und deren Kalibrierung nicht miteinander verglichen werden. Dieses Methodendefizit wurde in der vorliegenden Arbeit dokumentiert und dargelegt.

Abstract

The preparation of 3d models and their applications in groundwater modelling context becomes a standard in geosciences. Especially for flow and transport modelling, the integration of 3d structural data is necessary. The geological conditions can be modelled by using interactive modelling strategies.

In context of hydrogeological modelling, it is necessary to estimate parameters e.g. depth to groundwater or groundwater recharge to use it afterwards during the modelling process. Recently, it is difficult to estimate the depth to groundwater in hard rock areas before hydrogeological modelling, if there are no groundwater observation wells. This information is needed for groundwater recharge calculation. In this context, the method Hydro-FaBer was developed. Based on digital elevation model information and creek directions, the depth to groundwater can be calculated. By using this method, it is possible to estimate the depth the groundwater in a fast way. By comparing different existing methods, it can be shown, that the method Hydro-FaBer gives more realistic results.

Another important part of the thesis is the goodness of fit for model calibration. During the calibration process, the standard methods were used. Afterwards the goodness of fit of these methods was tested. The tested methods are useful to compare different parameter settings for one model area. By applying different generic datasets, it can be shown, that the established methods can't compare the goodness of fit of different models and their calibration. This lack in the used methods was documented in this thesis.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	II
Eidesstattliche Erklärung	III
Kurzzusammenfassung	IV
Abstract	V
Inhaltsverzeichnis	VI
Abbildungsverzeichnis	VIII
Tabellenverzeichnis	XIV
Abkürzungsverzeichnis	XVI
1. Zielsetzung und Vorgehensweise	1
1.1. Zielsetzung.....	1
1.2. Konzeptionelles Modell.....	2
1.3. Untersuchungsgebiet.....	4
1.3.1. Die geologischen Verhältnisse.....	4
1.3.2. Die hydrogeologischen Verhältnisse	13
2. Geologische Modellierung	20
2.1. Ziele und Nutzung	21
2.2. Methodische Ansätze.....	22
2.3. Qualität und Unsicherheiten in der Datenbasis.....	24
2.4. Datenverarbeitung.....	30
2.5. Beschreibung des geologischen Modells von Eschwege.....	35
2.5.1. Quartäre Abschwemmmassen und Auenlehm	37
2.5.2. Quartärer Kies-Aquifer	38
2.5.3. Tertiäre Basalte	40
2.5.4. Unterer Muschelkalk.....	41
2.5.5. Buntsandstein.....	43
2.5.6. Zechstein.....	44
2.6. Bewertung der genutzten Verfahren und Methoden.....	45
3. Ermittlung hydrogeologischer Parameter	47
3.1. Mittlerer Grundwasserflurabstand in Festgesteinsbereichen (Hydro-FaBer). 47	47

3.2.	Wasserhaushalt	65
3.3.	Grundwasserneubildung	73
3.4.	Hydraulische Durchlässigkeit	80
3.5.	Überführung der geologischen Strukturen in ein hydrogeologisches Strukturmodell	87
3.6.	Randbedingungen	92
3.7.	Bewertung der genutzten Verfahren und Methoden.....	97
4.	Hydrogeologische Modellierung.....	100
4.1.	Methoden der hydrogeologischen Modellierung.....	100
4.2.	Mathematische Grundlagen der hydrogeologischen Modellierung.....	102
4.3.	Modellerstellung	105
4.4.	Kalibrierung.....	107
4.5.	Einfluss der Werra auf den Brunnen Aue 1	115
4.6.	Bewertung der genutzten Verfahren und Methoden.....	116
5.	Zusammenfassung und Ausblick.....	119
5.1.	Anwendbarkeit der beschriebenen Methoden.....	119
5.2.	Ausblick.....	121
	Literaturverzeichnis	123
	Kartenverzeichnis	138
	Verwendete Internetseiten	139
	Genutzte Software.....	140
	Erwähnte Software	141
	Anhang – Gleichungen für Güteparameter der Kalibrierung	142
	Lebenslauf.....	145

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1: Schematische Darstellung des Gesamtmodellierungsprozesses im Rahmen der vorliegenden Arbeit mit Integration des entwickelten Verfahrens Hydro-FaBer für die Berechnung des Grundwasserflurabstandes.	2
Abb. 1.2: Schematische Darstellung konzeptioneller Ideen über Prozesse (Grundwasseraufstieg, Oberflächenabfluss, Grundwasserneubildung) im Untersuchungsgebiet.	3
Abb. 1.3: Lage des Untersuchungsgebietes (rot) in Hessen und Thüringen.	4
Abb. 1.4: Vereinfachte Übersicht über die Geologie des Untersuchungsgebietes (nach JACOBSHAGEN ET AL. 1993) und der Grenzen des Geologischen (Außengrenze) und hydrogeologischen Modells.	5
Abb. 1.5: Schwellen während der Zeit des tieferen Zechsteins, Lage des Unterwerra-Grundgebirges und rezente, paläozoische Ausbisse (nach KULICK ET AL. 1984 und BECKER 2002).	7
Abb. 1.6: Paläogeographische Fazieskarte der Basis des Unteren Buntsandsteins in der Hessischen Senke (nach HUG 2004).	8
Abb. 1.7: Der großräumige Auslaugungsbereich des Eschweger Beckens und seine Randstrukturen (nach MÖLLER 1988), die Lage des Modellgebietes des hydrogeologischen Modells ist rot umrandet.	13
Abb. 1.8: Sulfat- und Chlorid-Gehalt der geförderten Grundwässer des Brunnens Aue 2 in den Jahren 1965 bis 2000 (zusammengestellt nach Daten aus THEURER 1983 und KÖHLER 2004) mit dem Grenzwerten für Chlorid und Sulfat nach TrinkwV als Bewertungsmaßstab.	16
Abb. 1.9: Versenkmengen von Salzlauge [Tm^3/Jahr] in den Plattendolomit in den Jahren 1925 bis 2002 (nach PFOH 2003).	18
Abb. 2.1: Alter der verwendeten Bohrungen.	25
Abb. 2.2: Endteufe der verwendeten Bohrungen.	26
Abb. 2.3: Angetroffene, modellrelevante, stratigraphische Horizonte und Horizont bei Endteufe der verwendeten Bohrungen.	26
Abb. 2.4: Räumliche Verteilung und Endteufen der modellrelevanten Bohrungen.	27
Abb. 2.5: Omnidirektionales Variogramm für die Generierung des Digitalen Geländemodells aus den Stützpunkten.	28
Abb. 2.6: Das Digitale Geländemodell (2-fach überhöht) des Untersuchungsgebietes mit rot umrandeter Modellgrenze des hydrogeologischen Modells.	29
Abb. 2.7: Hypsometrische Kurve des DGMs von Eschwege mit der Talaue bei 160 mNN als tiefstes, morphologisches Element, die etwa 10 bis 15 % der Gesamtfläche umfasst.	29

Abb. 2.8: Schematischer, verkürzter Profilschnitt mit verschiedenen, stratigraphischen Horizonten (7-fach überhöht) am Schwemmfächer des Kellaer Bachs.	32
Abb. 2.9: Räumliche Verteilung der generierten Profilschnitte, die sich innerhalb des geologischen Modells befinden.	33
Abb. 2.10: Darstellung der exportierten Profilschnitt-Stützpunkte (rot) im Bereich der Jestädt-Subrosion, in schwarz sind weitere Stützpunkte in der unmittelbaren Umgebung visualisiert.	34
Abb. 2.11: Variogramm für die Generierung der Struktur der Jestädt-Subrosion (Unterkante des Kies-Aquifers) aus den Stützpunkten mit den zugehörigen Parametern in nebenstehender Tabelle.	34
Abb. 2.12: Explosionsgrafik des Talraums bei Eschwege mit allen modellierten Einheiten (5-fach überhöht).	36
Abb. 2.13: Darstellung des geologischen Modell des Talraums bei Eschwege mit allen modellierten Einheiten (2-fach überhöht).	37
Abb. 2.14: Schwemmfächer des Kellaer Baches (Blickrichtung West, 10-fach überhöht).	38
Abb. 2.15: Mächtigkeit des quartären Grundwasserleiters der Talaue Eschwege, interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.	39
Abb. 2.16: Quartärbasis im Bereich der Jestädt-Subrosion (Blickrichtung Nord, 10-fach überhöht).	39
Abb. 2.17: Quartäre Ablagerungen (Auenlehm und Kies, farblich nicht differenziert) mit der hohen Kiesmächtigkeit im Bereich der Jestädt-Subrosion (Blickrichtung Nordnordwest, 10-fach überhöht).	40
Abb. 2.18: Basaltvorkommen Blaue Kuppe mit umgebenden Buntsandstein (2-fach überhöht).	41
Abb. 2.19: Mächtigkeit der Schichten des Muschelkalkes im Untersuchungsgebiet, modelliert und interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.	42
Abb. 2.20: Abgedecktes geologisches Modell von Eschwege – Räumliche Anordnung der Einheiten Muschelkalk, Buntsandstein und Zechstein im Modellgebiet (2-fach überhöht).	42
Abb. 2.21: Mächtigkeit des Oberen Buntsandsteins im Untersuchungsgebiet, modelliert und interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.	43
Abb. 2.22: Mächtigkeit des Buntsandsteins im Untersuchungsgebiet, modelliert und interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.	44
Abb. 2.23: Extrahierte Schnitte aus dem Modell parallel zur GOK (links: 40 m unterhalb der GOK, rechts: 80 m unterhalb der GOK).	46

Abb. 3.1: Berechnete Flurabstandskarte für das Untersuchungsgebiet nach dem Ansatz von ARMBRUSTER ET AL. (2004) mit deutlich erkennbar unplausiblen Ergebnissen.	49
Abb. 3.2: Vereinfachte, schematische Darstellung der Postulate (1) bis (4) des Baches mit angebundener Grundwasseroberfläche und des Bach-Gradienten $-\beta$	50
Abb. 3.3: Bachgradient $-\beta$ als Maß für die Neigung der Grundwasseroberfläche in der Umgebung des Baches (Neigung der Grundwasseroberfläche vereinfacht dargestellt).	51
Abb. 3.4: Ermittlung des Grundwasserflurabstandes senkrecht zur Bachrichtung (h_1 =Höhenlage des Bachbettes in mNN, h_2 =Höhenlage des Zielpunktes (DGM) im Festgestein).	51
Abb. 3.5: Schema für die sich ergebenden, relativen Neigungen der Grundwasseroberfläche im Vergleich zum Betrachtungspunkt in der Mitte.	52
Abb. 3.6: Postulierte Gradienten der Grundwasseroberfläche rund um den Punkt A2 (Abb. 3.5), dabei entspricht z.B. der Wert von 180° dem abstromigen Bereich des Baches in Fließrichtung.	53
Abb. 3.7: Schema zur Berechnung der Neigung der Grundwasseroberfläche (β) aus der Vorflutrichtung (α) und der Ermittlung der Neigung der Grundwasseroberfläche bezüglich der Vorflutrichtung (relative Neigung, β').	53
Abb. 3.8: Schema zur rasterbasierten Berechnung der Neigung der Grundwasseroberfläche (β) aus der Vorflutrichtung (α) und der Ermittlung der Neigung der Grundwasseroberfläche bezüglich der Vorflutrichtung.	54
Abb. 3.9: Flow-Chart des Verfahrens zur Generierung der Informationen über den Grundwasserflurabstand im Festgestein (Hydro-FaBer).	55
Abb. 3.10: Anordnung der Zellen bei der Beispielrechnung (100 m-Raster), um den Grundwasserflurabstand für Zelle B3 aus den angrenzenden Zellen (A3, A4 und A5) mit Vorflutanbindung zu berechnen (grau: nicht relevante Zellen).	57
Abb. 3.11: Berechnung der drei anschließend zu mittelnden Grundwasserstände für Zelle B3 auf Basis des Hydro-FaBer-Verfahrens.	58
Abb. 3.12: Berechnung der anschließend zu mittelnden Grundwasserstände für die Zellen mit einem Rasterabstand von einer Rastereinheit zur Vorflut.	59
Abb. 3.13: Ermittelter Grundwassergleichenplan als Zwischenstand im Rahmen des Verfahrens Hydro-FaBer, um anschließend durch Subtraktion vom DGM den Grundwasserflurabstand zu berechnen.	59
Abb. 3.14: Durch Subtraktion der Grundwasseroberfläche (Abb. 3.13) vom Digitalen Geländemodell (DGM) erzeugte Karte des Grundwasserflurabstandes.	60

Abb. 3.15: Digitales Geländemodell (20 m-Raster) des nördlichen Bereiches des Untersuchungsgebietes (visualisiert als shaded-relief-map), welches als Basis für die Berechnung des Grundwasserflurabstandes mit Hydro-FaBer diente.	61
Abb. 3.16: Mit Hydro-FaBer, ausgehend von den Vorflutern, interpolierte Grundwasseroberfläche (10-fach überhöht).	61
Abb. 3.17: Grundwasserflurabstand des Untersuchungsgebietes nach Verrechnung des mit Hydro-FaBer erstellten Grundwassergleichenplans mit dem Digitalen Geländemodell.	62
Abb. 3.18: Lage der Kartenausschnitte (rot markiert auf den DGM) der folgenden fünf Abbildungen (Darstellung 2-fach überhöht).	63
Abb. 3.19: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt auf Basis der Wasserstände der Bäche (schwarze Linien), Interpolationsverfahren: Triangulation (LÄHNE ET AL. 2013).	63
Abb. 3.20: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt auf Basis der Wasserstände der Bäche (schwarze Linien), Interpolationsverfahren: IDW, Power 2.	64
Abb. 3.21: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt auf Basis der Wasserstände der Bäche (schwarze Linien), Interpolationsverfahren: Kriging.	64
Abb. 3.22: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt mit Hydro-FaBer, Interpolationsverfahren: Kriging (LÄHNE ET AL. 2013).	65
Abb. 3.23: Differenzenplan des nördlichen Festgesteinsbereiches, Differenz zwischen den Ergebnissen von Hydro-Faber und der reinen Kriging-Interpolation, ausgehend von den DGM-Informationen am Bachbett.	65
Abb. 3.24: Monatswerte des Niederschlages, Basisdaten der DWD-Messstation Eschwege (schwarz – Monatsniederschlag >100 mm).	66
Abb. 3.25: Regressionsanalyse Höhenlage gegen Niederschlag für die sechs Messpunkte im Raum Eschwege (Zeitraum der Niederschlagsmessung: 26.03. – 02.04.2006).	67
Abb. 3.26: Regressionsgerade zwischen Niederschlagshöhe und dem Rechtswert der Messpunkte (Auswirkung des Regenschattens des Hohen Meißners).	68
Abb. 3.27: Mittlere Monatswerte der ETp (FAO-Gras-Referenzverdunstung) von November 1996 bis Oktober 2005.	69
Abb. 3.28: Monatliche Differenz der ETp zum Mittelwert der ETp (1996 bis 2005) mit den Maximaldifferenzen im Trockenjahr 2003 (rot markiert).	70
Abb. 3.29: Monatliche, Klimatische Wasserbilanz (FAO, 1996 bis 2005), Messstation Eschwege.	70

Abb. 3.30: Klimatische Wasserbilanz (FAO) der Hydrologischen Jahre 1997 bis 2005.....	72
Abb. 3.31: Schema des TUB-BGR-Verfahrens mit den Bestandteilen, die erst mit Hilfe des Grundwasserflurabstandes berechnet werden können (blauer Rahmen).	75
Abb. 3.32: Aufbau des Doppelring-Infiltrometers 100m westlich der Messstelle B6.	80
Abb. 3.33: Lage der Messpunkte (kf-Wert) im Verbreitungsgebiet des quartären Aquifers, die zur Ableitung der zusätzlichen kf-Wert-Stützpunkte verwendet wurden.....	83
Abb. 3.34: Regressionsanalyse des Zusammenhangs zwischen den kf-Werten des Talraum-Aquifers und der Entfernung der Messwerte zum Rand der Talau (Festgestein).	84
Abb. 3.35: Variogramm der logarithmierten kf-Werte im westlichen Talraum, bis Rechtswert=3578200 und rechts der logarithmierten kf-Werte im östlichen Talraum, bei Rechtswerten größer als 3578200.....	86
Abb. 3.36: Kf-Wert-Verteilung des Kies-Aquifers im Modellgebiet nach beschriebener Interpolationsmethodik.	87
Abb. 3.37: Zielsetzung für die Generierung der hydrogeologischen Einheiten (Mindestmächtigkeit 30 cm) aus den geologischen Einheiten mittels eines C++-Programms.	88
Abb. 3.38: Verlauf der geologischen Strukturen (dicke, schwarze Linien) im Vergleich zum hydrogeologischen Strukturmodell (rote Linien, rechts), welches durch die Integration der Mindestmächtigkeit einen anderen Schichtverlauf aufweist.	90
Abb. 3.39: Wasserstands-Ganglinien der Pegel Heldra und Allendorf für den hydrologischen Winter 2007 (01.11.06 bis 01.05.07).	93
Abb. 3.40: Lage der Maxima in den Kreuzkorrelogrammen für den hydrologischen Winter und die Niedrigwasserperiode.	94
Abb. 4.1: Skalen in der Hydrogeologie (nach BLÖSCHL 1999, BRONSTERT ET AL. 2005), der rote Punkt entspricht der Skala der Modellierung der vorliegenden Arbeit.....	101
Abb. 4.2: Lage der Superelemente im Untersuchungsgebiet und das generierte Netz mit den Wassergewinnungen (rot markiert) im Buntsandstein.	106
Abb. 4.3: Kalibrierergebnisse der Simulation esw41_06 für den Stichtag 28.04.1999.....	110
Abb. 4.4: Histogramm der Messwertedifferenz [m] zwischen den gemessenen und den modellierten Werten der Simulation esw41_06 für den Stichtag 28.04.1999.....	110

Abb. 4.5: Lage der kalibrierten Brunnen Aue 1, Aue 2 und Aue 4 im Buntsandstein südlich der Talaue.....	111
Abb. 4.6: Schwankungsbreite verschiedener Simulationsergebnisse für den Brunnen Aue1 mit veränderten Porositäten für die hydrologischen Jahre 1998 bis 2003.	112
Abb. 4.7: Kalibrierergebnisse der Simulation esw40_03 für die Brunnen Aue 1 und Aue 2.	113
Abb. 4.8: Kalibrierergebnisse der Simulation esw40_03 für den Brunnen Aue 4 und die Gesamtkalibrierergebnisse der drei Aue-Brunnen.	114
Abb. 4.9: Wasserstände an Brunnen Aue 1 nach verschiedenen Simulationen, mit und ohne der Werra als Randbedingung (November 1997 bis Oktober 2003; Simulationen esw40_03a und esw40_03b).	115
Abb. 4.10: Differenz zwischen der Simulation ohne Werra-Randbedingung und der Simulation mit Werra-Randbedingung (November 1997 bis Oktober 2003; Simulationen esw40_03a und esw40_03b).	115
Abb. 4.11: Darstellung einer schlechten Kalibrierung (links) mit $R^2=0,0139$ und diese schlechte Kalibrierung mit einer zusätzlichen, hypothetischen, ebenfalls schlechten Anpassung (rechts, rot) mit $R^2=0,3816$	117
Abb. 4.12: Vier generische Kalibrierungen mit gleichem RMSE und den zugehörigen Regressionsanalysen, die zeigen, dass ein RMSE von 0,5m nicht zwangsläufig einer guten Kalibrierung entspricht.....	117
Abb. 5.1: Gebiete in Deutschland mit ähnlichen geologischen Eigenschaften, Datengrundlage: HAD (BMU 2003).	119
Abb. 5.2: Gebiete in Deutschland mit ähnlichen lithologischen Eigenschaften, Datengrundlage: HAD (BMU 2003).	119
Abb. 5.3: Gebiete mit uneingeschränkter Anwendbarkeit der beschriebenen Methoden.	120

Tabellenverzeichnis

Tab. 1.1: Mächtigkeiten der Einheiten des Buntsandsteins und des Bröckelschiefers im Raum Eschwege.....	9
Tab. 1.2: Korrelationsmatrix der geförderten Rohwässer der Messstellen Aue 1, Aue 2 und Aue 4 der Jahre 1964 bis 1982 (die fett und schwarz gedruckten Werte haben das 99,9 %-Vertrauensintervall erfüllt (2-seitiger Test), benötigtes $r=0,708$).....	17
Tab. 1.3: Niedrigste und höchste gemessene Konzentration während der Messkampagnen 1989 bis 1990 (nach THOM 1992).....	19
Tab. 2.1: Bohranzahl und zugehörige Quellenangabe.....	25
Tab. 2.2: Datenformat der Schichtenfolgebeschreibung der Datei <i>model.sfb</i>	30
Tab. 2.3: Schichtunterkantenanzuordnung zum Bohrungsnamen in der Datei <i>schicht.blg</i>	31
Tab. 2.4: Stammdaten der Bohrungen in der Datei <i>stamm.bid</i>	31
Tab. 2.5: Geologische Einheiten des 3D-Strukturmodells und deren Umsetzung in das hydrogeologische Modell.....	35
Tab. 2.6: Quantifizierung der Buntsandstein- und Zechstein-Verbreitung im Modellgebiet.....	44
Tab. 3.1: Berechnungsvorgang des Grundwasserflurabstandes anhand Abb. 3.8 und Abb. 3.10 und angenommenen, hinsichtlich der Vorflutrichtung stark vereinfachten, Beispieldaten (Rasterabstand 100 m).....	57
Tab. 3.2: Korrekturfaktoren für den Gradienten β entsprechend Abb. 3.6, die fehlenden Zwischenbereiche können durch lineare Interpolation gefüllt werden.....	58
Tab. 3.3: Vergleich der Jahressummen der Niederschläge, der FAO-Gras-Referenzverdunstung und der Klimatischen Wasserbilanz im Untersuchungszeitraum.....	71
Tab. 3.4: Abflussmesswerte [l/s] der Bäche (im Mündungsbereich) im Untersuchungsgebiet auf Basis von Messungen in verschiedenen Jahren.....	72
Tab. 3.5: Klassifizierung des Grundwasserflurabstandes.....	76
Tab. 3.6: Klassifikation der nutzbaren Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes.....	76
Tab. 3.7: Klassifikation der Landnutzungen.....	77
Tab. 3.8: Klassifikation der Niederschlagskorrektur, die Korrektur erfolgte anhand der erstellten Regressionsgleichungen.....	77
Tab. 3.9: Klassifikation der Hangneigungen und der zugehörigen Ermittlung der Grundwasserneubildung aus der Sickerwasserrate.....	77
Tab. 3.10: Übersicht der Ergebnisse der Doppelring-Infiltrationen.....	81

Tab. 3.11: Test auf Normalverteilung (Kolmogorov-Smirnov-Test) der Daten, die der kf-Wert-Interpolation zugrunde liegen.....	85
Tab. 3.12: Übersicht über die Parameter zu den in Abb. 3.35 dargestellten Variogrammen.....	86
Tab. 3.13: Ergebnisse der Regressionsanalysen der Stichtagsmessungen und den Tageswerten der Pegel Heldra und Allendorf (t-Test für den Korrelationskoeffizienten).....	95
Tab. 3.14: Datenqualität von den der Stadtwerke Eschwege zugehörigen Wasserentnahmen.....	96
Tab. 3.15: Datenqualität der Wasserentnahmen, welche von der Gemeinde Meinhard zur Verfügung gestellt werden konnten.....	97
Tab. 4.1: Primärinput (kf-Werte) für die Kalibrierung des hydrogeologischen Modells, festgelegt aufgrund der lithologischen Eigenschaften der Einheiten.....	107
Tab. 4.2: Statistische Auswertung der oben dargestellten Simulationsergebnisse hinsichtlich der Standardabweichung innerhalb der Zeitreihen.....	112
Tab. 4.3: Übersicht der Testergebnisse der Normalverteilungstests (Kolmogorov-Smirnov-Test).....	113
Tab. 4.4: Übersicht der statistischen Parameter der vier generischen Kalibrierungen, welche in Abb. 4.12 dargestellt sind.	118

Abkürzungsverzeichnis

<i>C++</i>	<i>Programmiersprache C++</i>
<i>CVRMSE</i>	<i>Coefficient of variation of the RSME</i>
<i>DGM</i>	<i>Digitales Geländemodell</i>
<i>DWD</i>	<i>Deutscher Wetterdienst</i>
<i>ETp</i>	<i>potentielle Evapotranspiration [mm]</i>
<i>ETr</i>	<i>reale Evapotranspiration [mm]</i>
<i>ETr_{Jahr}</i>	<i>reale Evapotranspiration eines Jahres [mm]</i>
<i>ETr_{Monat}</i>	<i>reale Evapotranspiration eines Monats [mm]</i>
<i>FAO</i>	<i>Food and Agriculture Organization of the United Nations</i>
<i>FD</i>	<i>Finite Differenzen</i>
<i>FE</i>	<i>Finite Elemente</i>
<i>FK</i>	<i>Feldkapazität [mm]</i>
<i>G</i>	<i>Kies</i>
<i>G1 ... 3</i>	<i>Hydrogeologische Unterkanten der geologischen Einheit Kies</i>
<i>GK 25</i>	<i>Geologische Karte (Maßstab 1:25.000)</i>
<i>GOK</i>	<i>Geländeoberkante [mNN]</i>
<i>GSi3D®</i>	<i>Geological Surveying and Investigation in 3 Dimensions</i>
<i>GW</i>	<i>Grundwasser</i>
<i>GWFA</i>	<i>Grundwasserflurabstand [m]</i>
<i>GWN</i>	<i>Grundwasserneubildung [mm/Zeitintervall]</i>
<i>GWN_{Monat}</i>	<i>monatliche Grundwasserneubildung [mm]</i>
<i>HAD</i>	<i>Hydrologischer Atlas von Deutschland</i>
<i>HRU</i>	<i>Hydrogeological Response Unit</i>
<i>HW</i>	<i>Hochwert [m]</i>
<i>Hydro-FaBer</i>	<i>Hydrographisches Flurabstand-Berechnungsverfahren</i>
<i>IDW</i>	<i>Inverse Distance Weighting (Interpolationsverfahren)</i>
<i>KA</i>	<i>mittlerer kapillare Aufstieg [mm]</i>
<i>kf</i>	<i>Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]</i>
<i>kfh</i>	<i>Durchlässigkeitsbeiwert [m/s] horizontal</i>
<i>kfv</i>	<i>Durchlässigkeitsbeiwert [m/s] vertikal</i>
<i>KR</i>	<i>mittlere kapillare Aufstiegsrate [mm/d]</i>
<i>KWB</i>	<i>klimatische Wasserbilanz [mm/Zeitintervall]</i>
<i>KRWe</i>	<i>mittlere kapillare Aufstiegsrate des effektiven Wurzelraumes [mm/d]</i>
<i>Ld</i>	<i>effektive Lagerungsdichte [-]</i>
<i>Lf</i>	<i>Auenlehm</i>
<i>Lfqz1 ... 2</i>	<i>Hydrogeologische Unterkanten der zusammengefassten, geologischen Einheiten Auenlehm und Abschwemmmassen</i>
<i>mNN</i>	<i>Höhenangabe in Meter über NormalNull</i>

<i>mu</i>	<i>Unterer Muschelkalk</i>
<i>mu1 ... 3</i>	<i>Hydrogeologische Unterkanten der geologischen Einheit Unterer Muschelkalk</i>
<i>MVS®</i>	<i>Mining Visualization System</i>
<i>ND</i>	<i>Niederschlag [mm]</i>
<i>ND_{Jahr}</i>	<i>Jahresniederschlag [mm]</i>
<i>ND_{Monat}</i>	<i>Monatsniederschlag [mm]</i>
<i>ND_{Som}</i>	<i>Niederschlag im hydrologischen Sommerhalbjahr (01.05. bis 31.10.) [mm]</i>
<i>nFK</i>	<i>nutzbare Feldkapazität [mm]</i>
<i>nFKWe</i>	<i>nutzbare Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes [mm]</i>
<i>REA</i>	<i>Representative Elementary Area</i>
<i>NRMS</i>	<i>Normalized Root Mean Square Error</i>
<i>NSE</i>	<i>Nash Sutcliffe Model Efficiency</i>
<i>RSME</i>	<i>Root Mean Square Error</i>
<i>RSR</i>	<i>RSME observation standard deviation ratio</i>
<i>RW</i>	<i>Rechtswert [m]</i>
<i>sm</i>	<i>Mittlerer Buntsandstein</i>
<i>smsu1 ... 3</i>	<i>Hydrogeologische Unterkanten der zusammengefassten, geologischen Einheiten Mittlerer und Unterer Buntsandstein</i>
<i>so</i>	<i>Oberer Buntsandstein</i>
<i>so1 ... 3</i>	<i>Hydrogeologische Unterkanten der geologischen Einheit Oberer Buntsandstein</i>
<i>SRTM</i>	<i>Shuttle Radar Topography Mission</i>
<i>su</i>	<i>Unterer Buntsandstein</i>
<i>SWR</i>	<i>Sickerwasserrate aus dem Boden (Zwischenabfluss + Grundwasserneubildung) [mm]</i>
<i>SWR_{Monat}</i>	<i>monatliche Sickerwasserrate aus dem Boden (Zwischenabfluss + Grundwasserneubildung) [mm]</i>
<i>SWR_{Jahr}</i>	<i>jährliche Sickerwasserrate aus dem Boden (Zwischenabfluss + Grundwasserneubildung) [mm]</i>
<i>ta</i>	<i>mittlere Dauer des kapillaren Aufstiegs für verschiedene landwirtschaftliche Nutzungsarten [d]</i>
<i>TK</i>	<i>Topographische Karte</i>
<i>TK 25</i>	<i>Topographische Karte (Maßstab 1:25.000)</i>
<i>TrinkwV</i>	<i>Trinkwasserverordnung</i>
<i>TUB-BGR</i>	<i>Technische Universität Berlin – Bundesanstalt für Geologie und Rohstoffe</i>
<i>VBA</i>	<i>Visual Basic for Applications</i>
<i>vkap</i>	<i>Betrag des kapillaren Aufstiegs [mm]</i>

<i>vkapkli</i>	<i>klima- und nutzungsspezifische Begrenzung des kapillaren Aufstiegs [mm]</i>
<i>We</i>	<i>effektiver Wurzelraum [dm]</i>
<i>WV</i>	<i>Menge der pflanzenverfügbaren Wasserversorgung [mm]</i>
<i>z</i>	<i>Zechstein</i>
<i>z1 ... 2</i>	<i>Hydrogeologische Unterkanten der geologischen Einheit Zechstein</i>

1. Zielsetzung und Vorgehensweise

1.1. Zielsetzung

In der hydrogeologischen Modellierung bestehen bereits seit langem Schwierigkeiten, Mittelgebirgsregionen mit Festgesteinen hinsichtlich eines Wasserhaushaltsmodells abzubilden.

Im Rahmen der geologischen und hydrogeologischen Modellierung des Talraums bei Eschwege repräsentieren verschiedene Arbeitsschritte und deren methodische Umsetzung die Ziele der vorliegenden Arbeit. Insbesondere die hydrogeologische Modellierung eines Mittelgebirgsaquifers und der angrenzenden Festgesteinsbereiche sind bislang nur durch ungenügende Modellierungsmethoden belegt. Wichtige methodische Ziele bzw. Verbesserungen der Modellierungsmethodik der vorliegenden Arbeit sind:

- Ermittlung des Grundwasserflurabstandes im Festgestein mittels eines selbst entwickelten Verfahrens (Hydro-FaBer),
- Kopplung des geologischen Modellierungswerkzeuges GSI3D® an das hydrogeologische Modellierungswerkzeug FEFLOW®,
- Integration des anspruchsvollen Modellierungsansatzes mit dreigeteilten, hydrogeologischen Schichten in FEFLOW®,
- Abbildung der lokalen Geologie,
- zeitlich und räumlich hoch auflösende Berechnung der Grundwasserneubildung nach dem TUB-BGR-Verfahren und
- Kalibrierung des hydrogeologischen Modells in FEFLOW® und Quantifizierung der erzielten Kalibrierungsgüte.

Für die hydrogeologische Modellierung stellt der Grundwasserflurabstand einen wichtigen Parameter zur Berechnung der Grundwasserneubildung dar. Die existierenden Verfahren (ARMBRUSTER ET. AL 2004, LEPPIG 2004, siehe Kap. 3.1) liefern im Untersuchungsgebiet bei Eschwege nur unzureichende Ergebnisse. Daher liegt ein Hauptaugenmerk der vorliegenden Arbeit bei der Entwicklung und Dokumentation des Flurabstand-Berechnungsverfahrens Hydro-FaBer.

Ein weiterer wichtiger Bestandteil der vorliegenden Arbeit ist die Kopplung des Modellierungswerkzeuges GSI3D® an FEFLOW®. Speziell die Adaption der geologischen Modellgeometrie an die Anforderungen von FEFLOW® wurde durch die Entwicklung einer C++-Kopplung umgesetzt.

1.2. Konzeptionelles Modell

Im Rahmen der Erstellung des konzeptionellen Modells wurden die verfügbaren, hydrologischen, hydrogeologischen und geologischen Daten interpretiert. Insbesondere die 3-dimensionale Analyse der geologischen Verhältnisse des Talraumes bei Eschwege stellte dabei eine neue Kompilierung bestehender Kenntnisse dar. Die gewonnenen Erkenntnisse gehen deutlich über die Betrachtungen von RAHBAR (1998) hinaus. Durch die Auswertung der Bohrdaten des Hessischen Landesamtes für Umwelt und Geologie (HLUG) wurde die geologische Modellierung des Untersuchungsgebietes vorbereitet.

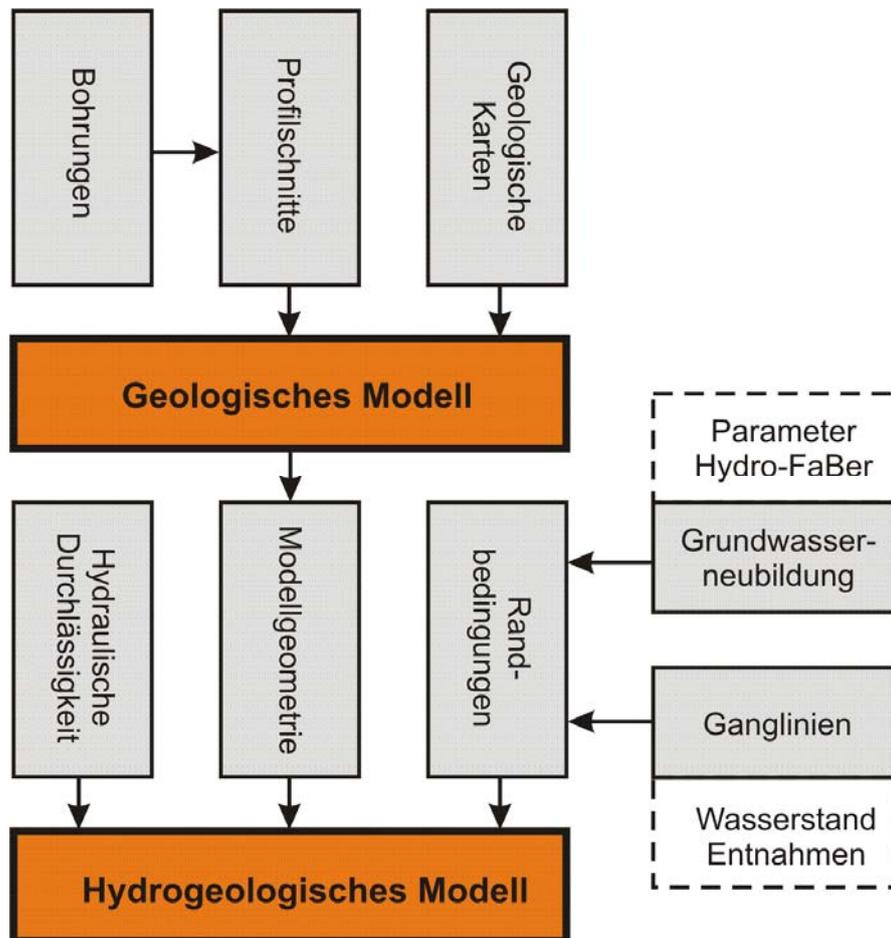


Abb. 1.1: Schematische Darstellung des Gesamtmodellierungsprozesses im Rahmen der vorliegenden Arbeit mit Integration des entwickelten Verfahrens Hydro-FaBer für die Berechnung des Grundwasserflurabstandes.

Durch eigene Vorarbeiten (LÄHNE 2003) wurden bereits im Zeitraum vor der vorliegenden Arbeit die expliziten Studienobjekte und Besonderheiten des Untersuchungsgebietes definiert. Dabei handelt es sich in hydrochemischer Hinsicht im Speziellen um die hohen Salzgehalte des Vorfluters Werra und Na-Cl-dominierte Grundwässer in der südlichen Talaue nahe der Ortschaft Niederdünzsbach. Zudem wurden aufgrund zu hoher Entnahmemengen in den Trinkwasserfassungen nahe der

Ortschaft Aue bereits in den 70er und 80er Jahren salzhaltige Tiefenwässer gefördert. Durch diese Trinkwassergewinnungen, die Staustufen in der Werra im Stadtgebiet, die früher zur Gewinnung von Wasserkraft dienten und durch die Auskiesungen z.T. in unmittelbarer Nachbarschaft zur Werra erreicht das Modellgebiet auch in hydraulischer Hinsicht eine große Komplexität (Abb. 1.2).

In Vorbereitung der hydrogeologischen Modellierung wurden im Rahmen der Konzeptionalisierung die Modellgrenzen festgelegt. Dabei bestimmten hydraulisch definierte Grenzen die Ausdehnung des zuvor zu erstellenden geologischen Modells. Als Begrenzung des hydrogeologischen Modells wurden daher die Einzugsgebietsgrenzen der dem Talraum zufließenden Bäche deklariert. Aufgrund fehlender Informationen über die unterirdischen Einzugsgebiete wurden die oberirdischen Einzugsgebietsgrenzen durch Analyse der Morphologie ermittelt. Da es sich bei den dominanten Gesteinen im Untersuchungsgebiet hauptsächlich um Sandsteine handelt, wurde vereinfachend postuliert, dass die oberirdischen Einzugsgebiete den unterirdischen entsprechen.

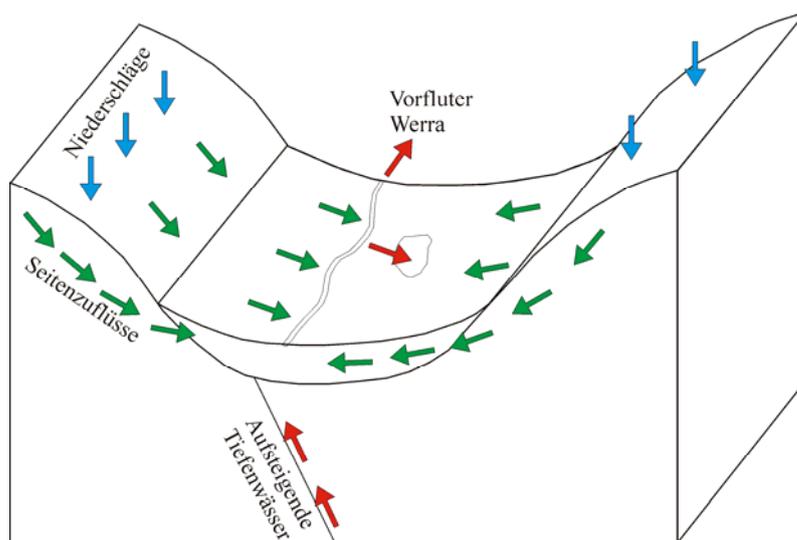


Abb. 1.2: Schematische Darstellung konzeptioneller Ideen über Prozesse (Grundwasseraufstieg, Oberflächenabfluss, Grundwasserneubildung) im Untersuchungsgebiet.

Durch die eigenen Untersuchungen im Rahmen der Diplomarbeit (LÄHNE 2003) wurden zudem bereits die Auswirkungen der Hydrodynamik und der hohen Salzgehalte der Werra auf den Grundwasserkörper quantifiziert. Für die Grundwässer nahe der Ortschaft Niederdünz bach konnte infiltrierendes Werrawasser als Ursache für den erhöhten Salzgehalt ausgeschlossen werden. Aufgrund der vergleichbar geringen Variabilität der Salzgehalte im Grundwasser im Vergleich zum Vorfluter Werra und der höheren Absolutwerte konnte diese Aussage getroffen werden.

1.3. Untersuchungsgebiet

Das Untersuchungsgebiet bei Eschwege wurde aufgrund seiner guten geologischen und hydrogeologischen Erkundung und seiner vielfältigen, hydrogeologischen Besonderheiten gewählt. Zudem war es für die Entwicklung des Verfahrens für den Grundwasserflurabstand in Festgesteinsbereichen notwendig, ein Gebiet mit verschiedenen Festgesteinen und unterschiedlichen Hangneigungen zu wählen. Für diese Fragestellungen ist das gewählte Untersuchungsgebiet sehr gut geeignet.

Der Modellraum befindet sich an der Grenze zwischen Thüringen und Hessen (Abb. 1.3) und ist etwa 200 km in nordöstlicher Richtung von Frankfurt (Main) und etwa 55 km in östlicher Richtung von Kassel entfernt. Das Gebiet ist hydrologisch von der Werra dominiert. Hydrogeologische relevante Einheiten für die Wassergewinnung sind der Buntsandstein, sowohl nördlich als auch südlich der Werra und die pleistozänen Kiese im Talraum.

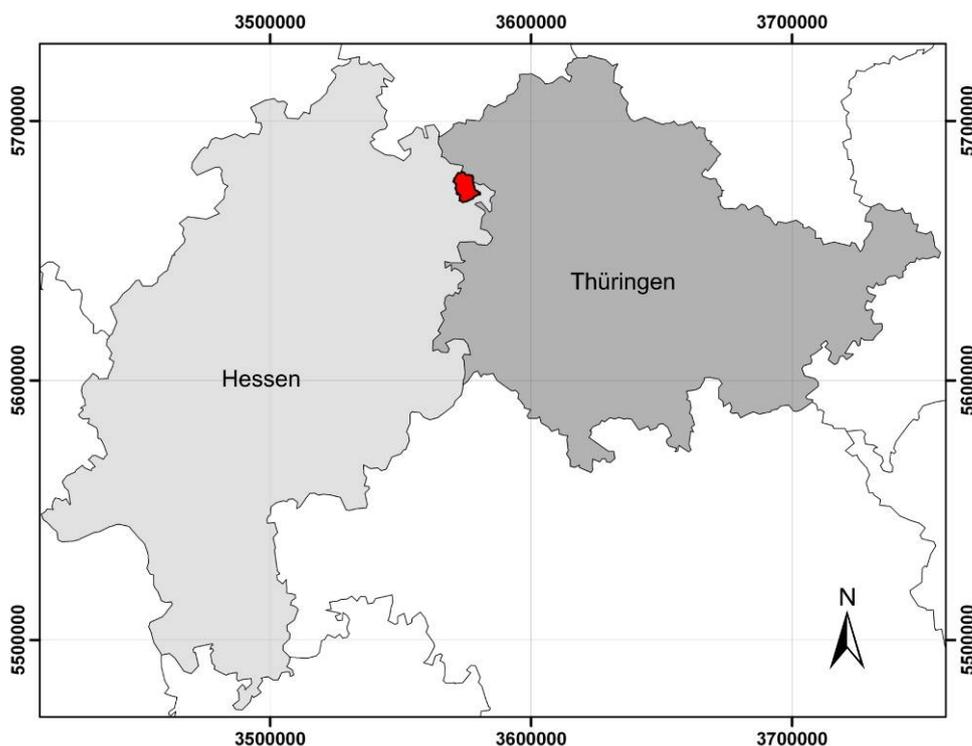


Abb. 1.3: Lage des Untersuchungsgebietes (rot) in Hessen und Thüringen.

Das gewählte Untersuchungsgebiet steht exemplarisch für Gebiete in Deutschland mit ähnlichen Eigenschaften, die insgesamt über 86.000 km² aufweisen (Abb. 5.3). Somit sind die angewandten Methoden im Talraum bei Eschwege auf viele Einzugsgebiete in Deutschland übertragbar.

1.3.1. Die geologischen Verhältnisse

Die Festgesteinsabfolge im Untersuchungsgebiet beginnt mit Zechstein-Aufschlüssen im Westen des Modellgebietes, nahe der Ortschaft Jestädt. Die weitere stratigraphische Abfolge führt über die Schichten des Buntsandsteins zum Muschelkalk. Als känozoische Elemente treten Tertiär-Basalte und quartäre Ablagerungen (u.a. Löss, Talkiese, Auenlehm, Schwemmfächer) auf (Abb. 1.4).

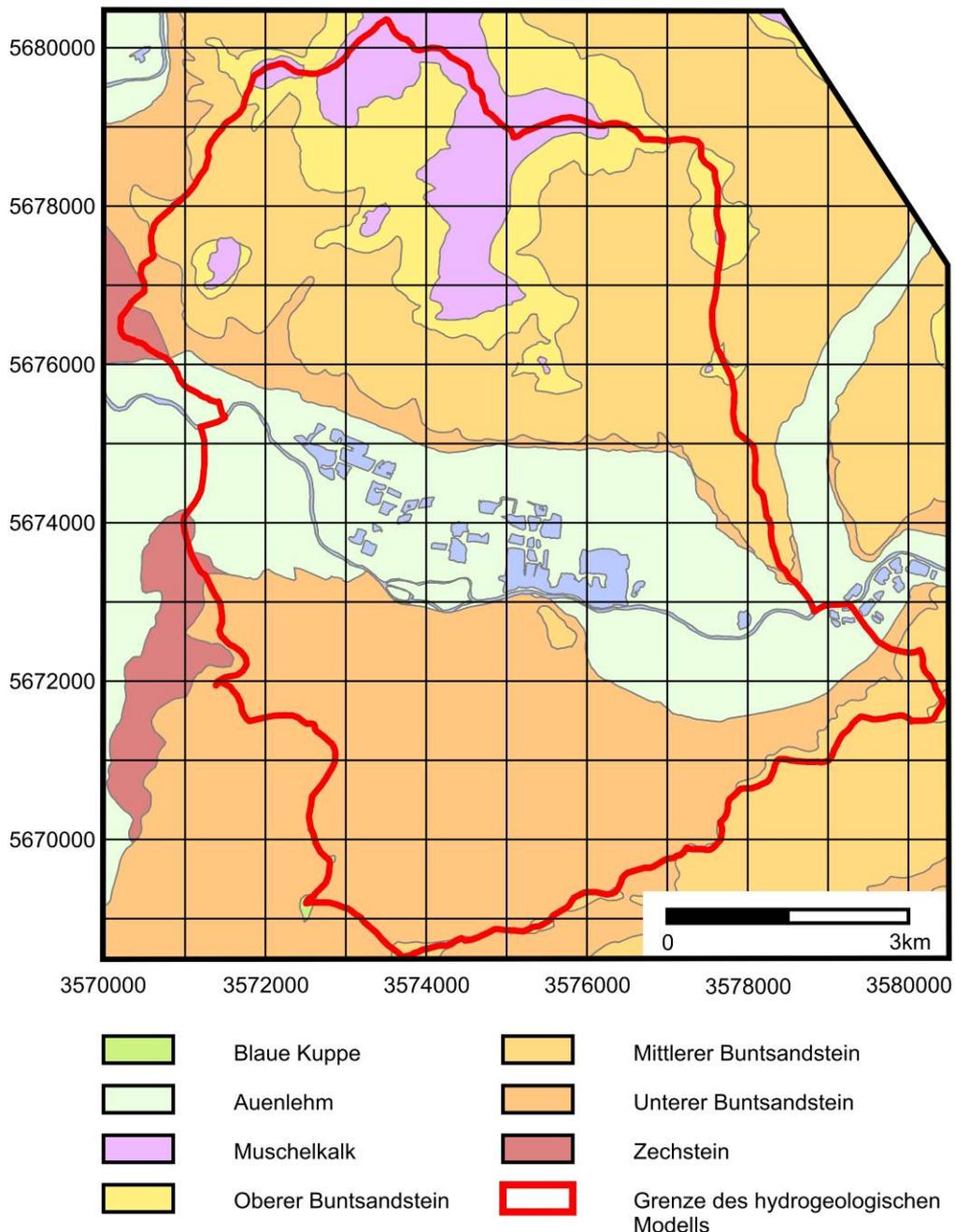


Abb. 1.4: Vereinfachte Übersicht über die Geologie des Untersuchungsgebietes (nach JACOBSHAGEN ET AL. 1993) und der Grenzen des Geologischen (Außengrenze) und hydrogeologischen Modells.

Paläozoikum

Die ältesten Gesteine im Untersuchungsgebiet streichen im östlichen Bereich des Unterwerra-Sattels bzw. Unterwerra-Grundgebirges (letztere Bezeichnung nach SCHMID 1991) aus. Nach BÜCKING ET AL. (1904) bilden die Zechsteinablagerungen den Nordrand des Werratales von Jestädt bis Albugen und greifen bei Niederhone auf das Messtischblatt Kella über. Dabei tritt der Hauptdolomit (z2) bei Jestädt, nordwestlich des sog. UVP-Gebietes (westlicher Bereich des Untersuchungsgebietes) zu Tage (JACOBSHAGEN ET AL. 1993).

Bereits MOESTA (1876, 1886) beschreibt den Zechstein als mantelförmige Umhüllung des Fußes des Grauwackengebirges. Der Kern des Unterwerra-Grundgebirges wird von tiefoberdevonischen Grauwacken eingenommen (WITTIG 1974), deren Ausstrich etwa 12,5 km² beträgt. Im Südosten schließt sich das Albunger Paläozoikum und im Nordwesten der Adorf-Kieselschiefer an. Nach WITTIG (1968) führten Conodontenfunde zu einer Einstufung der Grauwacken in das tiefe Oberdevon. Die Schüttungsrichtungen sind überwiegend SW gerichtet und zeigen einen beckenparallelen Transport innerhalb des Grauwackentroges (JACOBSHAGEN ET AL. 1977). Im Gegensatz dazu postulierte SCHUBART (1955) eine Schüttung nach Nordwesten, wobei die Mitteldeutsche Kristallinschwelle als Liefergebiet in Erwägung gezogen wurde.

Die tektonische Aufwölbung der Sattelstruktur des Unterwerra-Grundgebirges legen GUNDLACH & STOPPEL (1966) aufgrund ihrer Beobachtungen von flachen Überschiebungen und Horizontalverschiebungen von Baryt-Gängen auf tertiäres Alter fest. Weiterführende Beschreibungen der Gangmineralisationen werden in STOPPEL & GUNDLACH (1978) angeführt. Der Abbau beschränkte sich dabei vor allem auf den Kupferschiefer und Schwerspat-führende Gänge.

Die paläogeographische Gliederung der Hessischen Zechsteinsenke ist durch die Strukturen der Hunsrück-Oberharz-Schwelle und der Spessart-Rhön-Schwelle beeinflusst (Abb. 1.5). Diese beiden hercynischen Hauptschwellen wurden während des Zechsteins weitgehend überflutet. Ausschließlich die Kreuzungspunkte der Schwellen blieben aufgrund einer verstärkten Heraushebung landfest. Die Baumbacher-Schwelle und die Schemmern-Schwelle wurden vor allem durch Mächtigkeitsverteilungen des Ca1 (Zechsteinkalk) nachgewiesen (KULICK ET AL. 1984). Nach RITZKOWSKI (1978) sind die Ablagerungen des Zechsteinkalkes im Untersuchungsgebiet nur zwischen acht und zehn Metern mächtig. Die Gesamtmächtigkeit der Werra-Folge beträgt etwa 100 m, wobei der Werra-Anhydrit (A1) etwa 75 m umfasst.

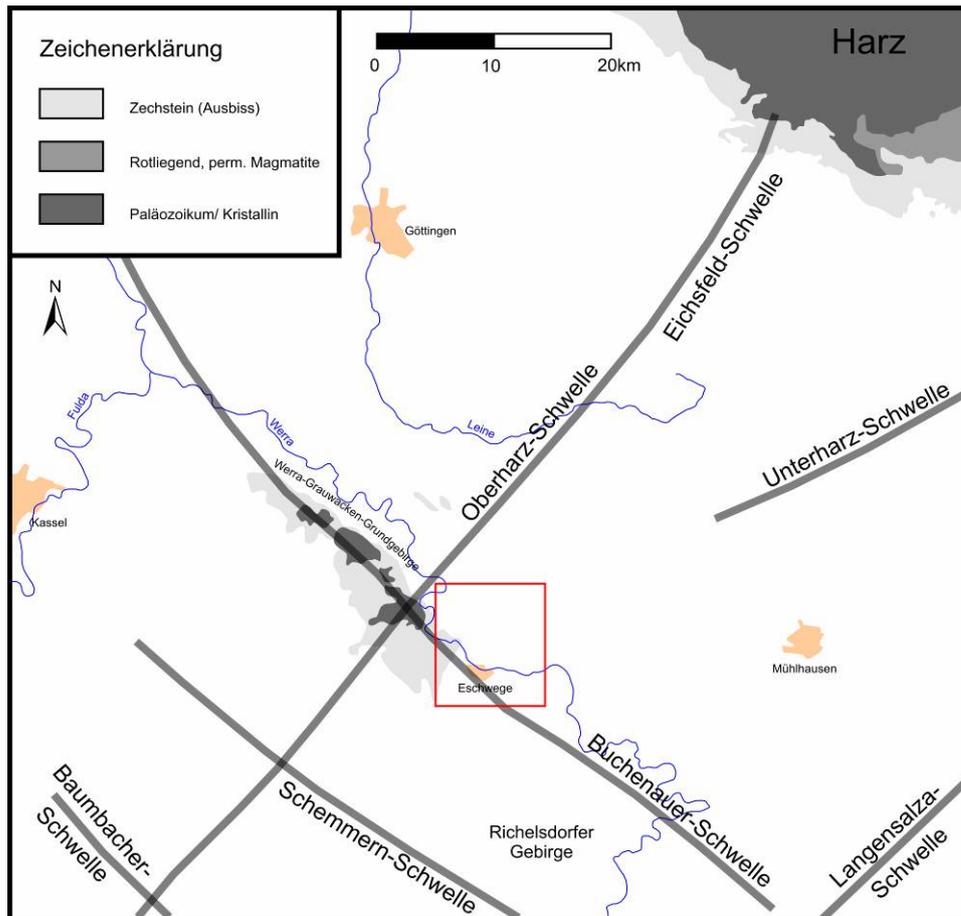


Abb. 1.5: Schwellen während der Zeit des tieferen Zechsteins, Lage des Unterwerra-Grundgebirges und rezente, paläozoische Ausbisse (nach KULICK ET AL. 1984 und BECKER 2002).

HAMPEL & PEKDEGER (1993) beschreiben die Zechsteinkalke als stark geklüftet und als ersten Grundwasserleiter. Bei ungestörter Lagerung eines hangenden Grundwassergeringleiters (Grauer Salztou der Leine-Serie) bildet der Werra-Anhydrit mit dem Staßfurt-Karbonat und dem Basalanhydrit einen zusammenhängenden Grundwasserleiter aus. Die Zechsteinfolge setzt sich mit dem Plattendolomit fort. Dunkelgraue, stark bituminöse Dolomite bilden den Hauptteil der Leine-Karbonate. Vereinzelt sind mergelige Bänke eingeschaltet. Leitformen sind in einzelnen Bänken die Muscheln *Liebea* und *Schizodus*. Die Mächtigkeit des Plattendolomits schwankt bei Eschwege zwischen zehn und 15 Metern (KUHNER 1986).

Den oberen Abschluss der Ablagerungen des Zechsteins bilden die Bunten Letten des z4 bis z6 bzw. der Bröckelschiefer (MÖLLER 1988). Letzterer wurde von HUG (2004) neu bearbeitet und durch eine neue Gliederung beschrieben. Die klastischen Sedimente des Bröckelschiefers entstammen proximalen Liefergebieten aus den Hochgebieten rund um die Hessische Senke, vor allem der Rheinischen Masse. Die Interngliederung des Bröckelschiefers wird nach HUG (2004) anhand von sechs ausgewiesenen, isochronen Zeitscheiben von Süßwasseringressionen durchgeführt. Diese sind auf

klimate Veranderungen mit einhergehenden, verstarkten Niederschlagen in den umgebenden Hochgebieten zuruckzufuhren. Im flachen Relief des Zechsteinmeeres ist zudem von kurzen Sedimentationszeiten und langen Expositionszeiten mit vielfacher Umlagerung auszugehen.

Die Zechstein-Sedimente im Untersuchungsgebiet liegen als dolomitische Kalke und Kalksandsteine im Wechsel mit uberkonsolidierten sandigen und kalkigen Tonmergeln vor. Die Oberkante dieser nahezu horizontal liegenden Gesteinsserie ist durch Verwitterungs- und Erosionsvorgange sehr stark morphologisch gegliedert und bildet auch im Untersuchungsbereich Hohenrucken und tief eingeschnittene Rinnen (GAUGLITZ 1975), welche u.a. zu einer stark heterogenen Machtigkeitsverteilung der im Quartar abgelagerten Kiese fuhrten.

Mesozoikum

Am Ende des Zechsteins verflachte das Germanische Becken und die marin-salinare Sedimentation ging in ein terrestrisch-fluviatiles Milieu uber. Es wurden die zunehmend klastischen Gesteinsserien des Buntsandsteins in der gesamten Hessischen Senke abgelagert. Die Hauptschuttungsrichtung war von SE nach NW gerichtet (HAMPEL & PEKDEGER 1993). HUG (2004) beschreibt das Ablagerungsmilieu des Unteren Buntsandsteins als eine weitgespannte, ausschlielich von Suwasser gepragte Flussebene mit Schuttungsrichtung nach NNE (Abb. 1.6).

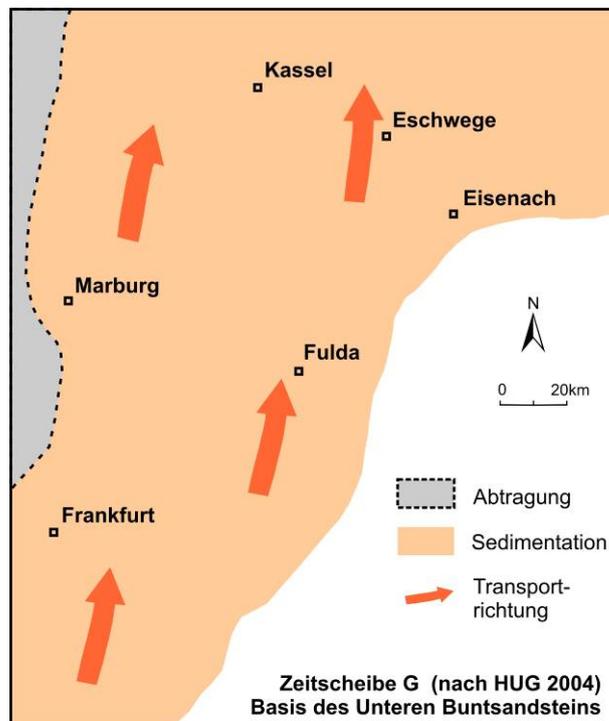


Abb. 1.6: Palogeographische Fazieskarte der Basis des Unteren Buntsandsteins in der Hessischen Senke (nach HUG 2004).

Die Erst-Untergliederung des **Unteren Buntsandsteins** im Großraum Eschwege erfolgte durch die Diplomarbeiten von BUCHSTEIN (1984) und HAAN (1984). Im Gegensatz zum aktuellen Stand der Buntsandstein-Forschung wurde der Bröckelschiefer damals noch in den Unteren Buntsandstein eingegliedert (ARBEITSAUSSCHUSS BUNTSANDSTEIN DER GEOLOGISCHEN LANDESÄMTER 1974). In der Bohrung Schlierbachswald weist die stratigraphisch hangend auf den Bröckelschiefer folgende Gelnhausen-Folge eine Mächtigkeit von 200m und die Salmünster-Folge eine Mächtigkeit von 115 m auf (BUCHSTEIN 1984, HAAN 1984, BRÜNING 1986). Die Bohrung Schlierbachswald stellt damit die einzige Bohrinformation über die Gesamtmächtigkeit des Unteren Buntsandsteins (rund 315 m) im Untersuchungsgebiet dar. Nach aktueller Nomenklatur wird der unterste Abschnitt des Buntsandsteins als Calvörde-Formation (bzw. Gelnhausen-Folge) bezeichnet. Stratigraphisch hangend schließt sich die Bernburg-Formation (bzw. Salmünster-Folge) an (vergl. Tab. 1.1).

Tab. 1.1: Mächtigkeiten der Einheiten des Buntsandsteins und des Bröckelschiefers im Raum Eschwege.

Stratigraphie	Formation	Mächtigkeit	Quelle
Oberer Buntsandstein	Röt	40 m	JACOBSHAGEN ET AL. (1993)
		90 – 100 m	KUHNERT (1986)
Mittlerer Buntsandstein	Solling (smS)	12 – 20 m	RETTIG (1996)
		15 – 23 m	KUHNERT (1986)
	Hardeggen (smH)	0 m	WYCISK (1977), KUHNERT (1986)
	Detfurth (smD)	20 – 25 m	WYCISK (1977, 1984)
Unterer Buntsandstein	Volpriehausen (smV)	60 – 75 m	WYCISK (1984)
		62 – 87 m	KUHNERT (1986)
Unterer Buntsandstein	Bernburg (suB)	ca. 115 m	BUCHSTEIN (1984), KUHNERT (1986)
	Calvörde (suC)	ca. 200 m	HAAN (1984), KUHNERT (1986)
Zechstein	Bröckelschiefer (z4-z7)	ca. 32 m	KUHNERT (1986)

Die Mächtigkeit der Volpriehausen-Formation beträgt im Raum Eschwege zwischen 60 und 75 m (WYCISK 1984). Dies entspricht einer deutlichen Reduzierung der Normalmächtigkeit von etwa 200 m bei Kassel (RAMBOW 1976, GAERTNER 1963) aufgrund der Lage des Untersuchungsgebietes auf der im Buntsandstein aktiven Eichsfeld-Altmark-Schwelle. Die Detfurth-Formation weist im Gebiet um Eschwege ebenfalls eine verringerte Mächtigkeit von 20 bis 25 m (WYCISK 1977, 1984) auf. Hingegen wurde die Hardeggen-Formation nicht sedimentiert und die Abfolge des **Mittleren Buntsandsteins** wird über einer Diskordanz mit der Solling-Formation

fortgesetzt (WYCISK 1977). Diese setzt bei Grebendorf ohne grobsandige Basisbank mit der Holunger Wechselfolge bzw. einem kalkigen, feinsandigen Schluffstein ein und weist eine Gesamtmächtigkeit zwischen zwölf und 20 Metern auf (RETTIG 1996). Lithologisch betrachtet, handelt es sich bei den Ablagerungen des Mittleren Buntsandsteins zumeist um Sandsteine mit eingeschalteten Wechselfolgen mit unterschiedlichem Schluff- und Tonanteil (JACOBSHAGEN ET AL. 1993).

Die Schichten des **Oberen Buntsandsteins** weisen nach JACOBSHAGEN ET AL. (1993) eine Mächtigkeit von 40 m auf. Die unausgelaugte, primäre Mächtigkeit gibt KUHNERT (1986) mit 90-100 m an. Im Vergleich zu der Rötusbildung in Nachbargebieten kennzeichnet sich diese im Raum Eschwege aufgrund ihrer Lage auf der Eichsfeld-Schwelle durch einen teilweisen Schichtausfall (Myophorienplatten) (KÄSTNER & SEIDEL 1965). LAEMMLEN (1958) und JACOBSHAGEN ET AL. (1993) beschreiben die Gesteine des Röts als graue Mergel im tiefsten Röt und dunkelrote, violette Tonsteine mit Gipsknollen und -residuen im oberen Röt. GRÄBNER (1970) weist zudem eine Kalksandsteinzone an der Basis des Röts aus. Die Gesteine des Röt werden von WENZEL (1994) als vornehmlich rotbraune, untergeordnet graugrüne Ton-Mergelsteine sowie graue und weiße Gipssteine beschrieben. Untergeordnet sind Dolomitsteine und siliziklastische Gesteine eingeschaltet.

Nahe den Ortschaften Neuerode und Kella (Thüringen) ist der **Untere Muschelkalk** aufgeschlossen, welcher das stratigraphisch jüngste Glied des Mesozoikums im Untersuchungsgebiet darstellt. Die morphologisch höheren Teile der Einzugsgebiete des Mühlbachs und des Kellaer Bachs werden durch den Muschelkalk gebildet. Die Lagerung der Muschelkalk-Schichten auf dem Messtischblatt Grebendorf (nördlich der Talau) ist ungestört (JACOBSHAGEN ET AL. 1993). Die Sedimentation des Muschelkalkes beginnt mit einen bis zwei Meter mächtigen gelben, dolomitischen, plattigen Kalken. Der Untere Wellenkalk setzt sich mit einer Folge grauer, mergeliger Kalke mit Fossilagen fort. Der Untere Muschelkalk wird des Weiteren von der Oolith-Zone, dem Mittleren Wellenkalk, der Terebratel-Zone, dem Oberen Wellenkalk, der Schaumkalk- Zone und den Orbicularis-Schichten gebildet (KUHNERT 1986). Alle jüngeren, mesozoischen Schichtglieder sind im Untersuchungsgebiet nicht vorhanden. Schichtglieder des Keupers sind u.a. etwa 5 km südlich des Talraums im Netra-Graben aufgeschlossen.

Känozoikum

Die känozoischen Einheiten werden im Untersuchungsgebiet von den tertiären Basalten der **Blauen Kuppe** und quartären Ablagerungen, wie Löss, pleistozänen Kiesen, Auenlehm, Schwemmfächern der Bäche und Subrosionsbildungen untergliedert. Insbesondere die Kiese und der Auenlehm nehmen große Flächen des Talraums ein.

Das Basaltvorkommen der Blauen Kuppe liegt etwa 3,5 km südlich von Eschwege. Dieser Basaltaufschluss ist wie der Hohe Meißner ein klassisches Vorkommen, an dem im Streit zwischen Neptunisten und Plutonisten die vulkanische Natur des tertiären Basalts erkannt wurde. Die Blaue Kuppe im engeren Sinne wird durch einen Alkaliolivinbasalt gebildet. Als Minerale dominieren Olivin, Pyroxen, Plagioklas (Labradorit), Magnetit und gelegentlich dünne Lamellen von Ilmenit. Makroskopisch treten die Olivine und bisweilen die Plagioklase hervor (KORITNIG 1968, JACOBSHAGEN ET AL. 1977, KORITNIG 1978).

Im Dünnschliff des thermisch überprägten Buntsandsteins sind die in einer glasigen Grundmasse schwimmenden Quarzkörner des Sandsteins zu erkennen. Dazwischen befinden sich, hauptsächlich in den ehemaligen tonigen Lagen, sehr viele kleine Cordierit-Kristalle in sechsseitigen Säulen von gedrungener Form. In den sandigen Lagen tritt grüner, nadelförmiger Pyroxen auf. Bei den gefritteten Sandsteinen war die Menge der entstandenen Teilschmelze sehr gering. Zwischen den einzelnen Quarzkörnern bildete sich ein klebriger Film, der nach dem Erkalten den Sandstein verfestigte (JACOBSHAGEN ET AL. 1977). Über besondere Minerale, wie den Cristobalit an der Blauen Kuppe und am Rosenbühl gibt bereits RAMDOHR (1920) Auskunft. Die Aragonite der Blauen Kuppe sind seit langer Zeit bekannt. Es treten alle Zwischenstufen bei der Umwandlung zu Calcit auf (SCHAUMBERG 1971).

Die äolischen **Löss**-Ablagerungen sind im Raum Eschwege weitgehend in Lösslehm umgewandelt. Die Mächtigkeiten sind meist unter einem Meter. In kurzen Lössprofilen konnten JACOBSHAGEN ET AL. (1993) die Abfolge von Steinsohlen über lehmige Fließerden zu äolisch sedimentiertem, rezent meist verlehmt Löss nachweisen.

Die fluviatilen Ablagerungen des Quartärs sind im Untersuchungsgebiet bislang nicht systematisch untersucht. JACOBSHAGEN ET AL. (1993) führen daher nur eigene marginale Beobachtungen an. Zwischen 60 und 70 % der Gerölle der **Werraschotter** (nicht nach Terrassen differenziert) stammen aus dem Buntsandstein und Muschelkalk, weitere 10 % werden durch Basaltgerölle repräsentiert. Gerölle aus dem Thüringer Wald (Quarzporphyre, Granite, Quarzite, Gangquarze) können 30-40 % ausmachen. Detaillierte Untersuchungen an Mittelterrassenkiesen bei Grebendorf von HIRSCHBERG (1997) erbrachten mit 28,6 % Thüringer Wald-, 64,3 % mesozoischen, 0,7 % Tertiär-Basalt-, 6,4 % Quarz-Geröllen (bei Korngrößen 16 bis 63 mm) ein ähnliches Ergebnis. GARLEFF (1966) leitet zudem eine mittelpleistozäne Senkung des Gebietes um Witzhausen aufgrund der Lage der Terrassenoberflächen und der außergewöhnlich guten Erhaltung älterer Terrassen ab. Nach MÖLLER & STÄBLEIN (1986) liegen die Terrassen 40-80 m (Oberterrasse), 18-40 m (Mittelterrasse) bzw. 2-7 m (Niederterrasse) über der heutigen Werra.

PAULY ET AL. (1973) beschreiben die Niederterrassen-Kiese im Talraum Eschwege für die damalige, weitere Planung des Kiesabbaus. Der Sandanteil der Lagerstätte wird mit 35 % angegeben. Die Kiesfraktion weist Komponenten bis 5 cm Durchmesser auf. Die petrographische Zusammensetzung wird mit 30-40 % Muschelkalk, 20-30 % Buntsandstein, ca. 15 % Porphy, 10-15 % Quarz und Quarzit, ca. 5 % Basalt und ca. 5 % Granit angegeben. Die Mächtigkeit wird nach Talabschnitten differenziert betrachtet und als Maximum bei Niederhone >21,6 m angegeben. Zwischen Frieda und Schwebda ist aufgrund von Salzablaugungen im Untergrund die Kiesmächtigkeit auf acht bis elf Meter erhöht (MÖLLER 1988).

Der **Auenlehm** im Untersuchungsgebiet ist im Werratal ähnlich wie im Tal des Baches Wehre und in kleineren Bachtälern ausgebildet. Es handelt sich dabei um rötlich-braune Lehme mit gelegentlich eingeschalteten Bändern aus Feinkies oder aus organischer Substanz (JACOBSHAGEN ET AL. 1993, BERNHARD ET AL. 1994). Die Mächtigkeit des Auenlehms schwankt im Talraum Eschwege zwischen einem und fünf Meter (THOM 1992).

Im Bereich der Talaue bei Eschwege befinden sich an vielen, in die Aue mündenden Bachläufen, sedimentäre **Schwemmfächer**. Insbesondere der Schwemmkegel des Kellaer Bachs ist deutlich morphologisch ausgeprägt. GRÄBNER (1970) beschreibt diese Schuttkegel im Werratal bei Wanfried und im Tal der Frieda als zwei bis fünf Meter, maximal zehn Meter mächtig. Diese Schuttkegel sind nahezu ausschließlich holozänen Alters. Nordwestlich von Wanfried konnte GRÄBNER (1970) unter einer Lösslehmdecke einen pleistozänen Schuttkegel nachweisen.

Die geomorphologischen Prozesse im Sinne der **Subrosion** im Eschweger Becken werden ausführlich in MÖLLER (1988) beschrieben und auf eine Auslaugung des Zechstein-Horizontes Na1 zurückgeführt (WEBER 1952). MÖLLER (1988) untergliedert das Eschweger Becken in drei Teileinheiten:

- Ausstrichbereiche des Unteren und Mittleren Buntsandsteins zwischen Fürstenstein und Frieda,
- Werratal-Aue zwischen Frieda und Fürstenstein und
- Fußflächenregion des Unteren Buntsandsteins zwischen Reichensachsen und Aue.

Die Kleine Hasselkuppe und die Hasselkuppe werden als inverse Erfälle (Reliefumkehr) interpretiert. Zudem wird die gesamte Talaue bei Eschwege von MÖLLER (1988) als großräumiger Auslaugungsbereich angesehen (Abb. 1.7).

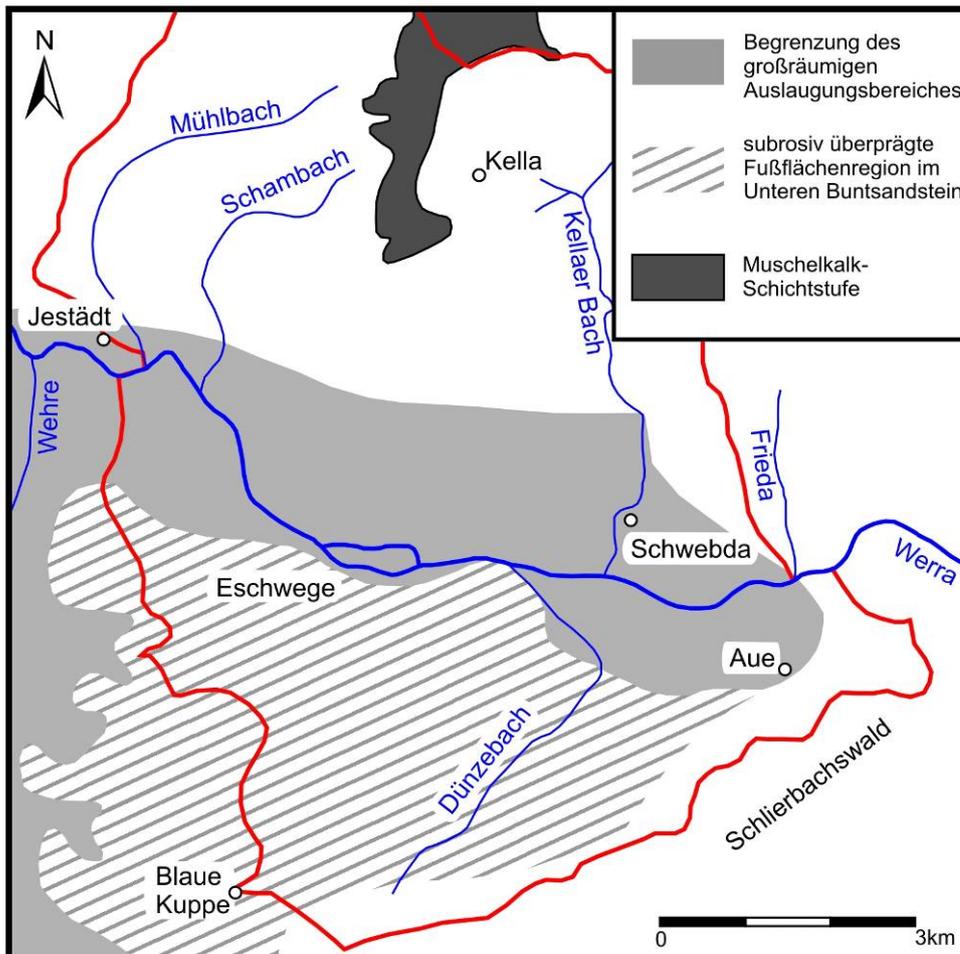


Abb. 1.7: Der großräumige Auslaugungsbereich des Eschweger Beckens und seine Randstrukturen (nach MÖLLER 1988), die Lage des Modellgebietes des hydrogeologischen Modells ist rot umrandet.

Für den Erhalt der Leuchtberge im zentralen Talbereich werden zwei mögliche Ursachen angeführt. Als erste Möglichkeit wird die Verdrückung der stratigraphisch liegenden Zechstein-Salze durch den Aufstieg des Unterwerra-Sattels angeführt, welche dazu führte, dass die Leuchtberge in direktem Kontakt zum Grundgebirge stehen. Alternativ wird die These geführt, dass die Leuchtberge auf einem Basaltkissen liegen. Im Bereich des Schlierbachswalds führt MÖLLER (1988) Dolinen im Röt als Auslaugungs-Phänomene an. Durch Wasseranalysen wird zudem ein weiterer Nachweis auf den Einfluss von Zechsteinsalzen und -gipsen auf die Wasserbeschaffenheit geliefert. FINKENWIRTH (1970) deutet die Senke von Kella ebenfalls als große Subrosionssenke, die auf Steinsalzauflösung zurückgeht.

1.3.2. Die hydrogeologischen Verhältnisse

Die Hauptgrundwasserleiter im Untersuchungsgebiet bei Eschwege werden durch die sedimentären Gesteine des Buntsandsteins und die pleistozänen Kiese gebildet. Das

tiefste bekannte Grundwasserstockwerk wird durch den Anhydrit der Werra-Serie, das Staßfurt-Karbonat und den Basalanhydrit (**Zechstein**) gebildet, wobei der unterlagernde Kupferschiefer als Grundwasserhemmer wirkt. Der überlagernde Grundwassergeringleiter wird durch die oberen Bunten Letten und die Silt- und Feinsandsteine des Bröckelschiefers gebildet (HAMPEL & PEKDEGER 1993). Diese trennen die verkarsteten Grundwasserleiter des Zechsteins von den Poren-Kluft-Grundwasserleitern des Buntsandsteins.

Die Wasserwegsamkeiten im Unteren **Buntsandstein** sind, bei einem Hohlraumanteil von 1 %, auf Trennfugen zurückzuführen (HÖLTING 1979). Die Grundwasserentnahmen bei Aue erzielten in der Vergangenheit überdurchschnittliche Pumpleistungen von bis zu 35 l/s. Im Zeitraum zwischen 1989 und 2006 lag die Maximalförderung der Brunnen bei Aue im November 1991 beim Brunnen Aue 1 bei 8,5 l/s. FINKENWIRTH (1970) führt die hohen erreichbaren Pumpleistungen auf die Lage der Wassergewinnungen am Salzhang zurück. Als Vergleichswert geben HAMPEL & PEKDEGER (1993) Pumpratzen von 2-4 l/s als normal für den Unteren Buntsandstein an. Bereits UDLUFT (1961) führt die hohe Leistung der Brunnen Aue 1 und Aue 2 auf eine tektonisch gestörte Zone mit erhöhter Wasserwegsamkeit zurück. Als alternative Erklärung verweist er auf die Möglichkeit von Auslaugungsvorgängen der unterlagernden, salinaren Zechstein-Schichten. Letztere Hypothese wird von FINKENWIRTH (1963) als wahrscheinlicher angesehen.

Am Übergang zum Mittleren Buntsandstein kommt es häufig zu Quellaustritten (z.B. die Wolfsbrunnenquelle bei Jestädt). Nach SCHRAFT & RAMBOW (1984) liegen die Werte für die Gebirgsdurchlässigkeit im Unteren Buntsandstein zu 56 % und im Mittleren Buntsandstein zu 74 % zwischen $k_f=10^{-6}$ und 10^{-5} m/s. Die Häufigkeitsverteilung der k_f -Werte weist im Unteren Buntsandstein zwei Maxima auf, wobei das Hauptmaximum die Bernburg-Formation (Salmünster-Folge) und das Nebenmaximum die Calvörde-Formation (Gelnhausen-Folge) repräsentiert. Den Hohlraumanteil im Mittleren Buntsandstein gibt HÖLTING (1979) mit ein bis zwei Prozent, in Störungsbereichen mit bis zu sechs Prozent an. Sowohl der Untere als auch der Mittlere Buntsandstein sind als Kluftgrundwasserleiter zu bezeichnen. Im Gegensatz dazu fungiert der Obere Buntsandstein als Grundwassergeringleiter (HAMPEL & PEKDEGER. 1993).

Die Gesteine des Unteren **Muschelkalks** werden als Kluft- bzw. als Karstgrundwasserleiter angesehen. Die geringe Mineralisation wird dabei auf die geringe Verweilzeit aufgrund der hohen Bewegungsgeschwindigkeit zurückgeführt (HAMPEL & PEKDEGER 1993).

Die Grundwässer des **quartären Kies-Aquifers** der Talaue wurden insbesondere in den 1980er und 1990er Jahren intensiv untersucht. Insbesondere die Versalzung der Grundwässer im Bereich der Trinkwassergewinnungen nahe der Ortschaft Aue war Gegenstand der Forschung (BRÜHL & THEURER 1986, HEGER 1988, THOM 1992, THOM ET AL. 1993, THOM ET AL. 1995, RAHBAR 1998, KÖHLER 2004). Zwischen den Ortschaften Aue und Dünzebach konnten hohe Na-Cl-Gehalte (2,5 g/l) im Grundwasserleiter nachgewiesen werden (Stichtagsmessungen zwischen 1998 und 2009), die vermutlich nicht mit der Versalzung der Werra in Einklang gebracht werden können. Für diese These können zwei Argumente angeführt werden. Zum einen sind die Na-Cl-Gehalte im Grundwasser z.T. höher als in dem Vorfluter Werra und zum anderen weist die Grundwasserfließrichtung selbst bei Hochwasser effluenten Charakter auf. Sowohl die Ergebnisse der Diplomarbeit von LÄHNE (2003) als auch die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit führen zur der Interpretation, dass die Grundwasserversalzung bei Aue als Ergebnis eines Salzwasseraufstieges aus dem Zechstein anzusehen ist.

In den Jahren 1977 bis 1982 kam es zu einem Wechsel der hydrochemischen Verhältnisse bei der Trinkwassergewinnung an dem Brunnen Aue 1, Aue 2 und Aue 4 der Stadtwerke Eschwege (Abb. 1.8). Nach den Daten von THEURER (1983) lassen sich die Versalzungserscheinungen des geförderten Grundwassers in zwei zeitlich aufeinander folgende Phasen untergliedern. Die erste Phase wird durch einen markanten Anstieg der Sulfat-Konzentration eingeleitet (ab dem Jahr 1977). Bislang nicht in der Literatur beschrieben ist die einhergehende Erhöhung der Gehalte an Natrium. Der Natrium-Gehalt stieg in allen drei beobachteten Brunnen auf das Doppelte bis Dreifache der ursprünglichen Konzentration an. Diese Veränderung ist durch einen Zutritt von einem Na-SO₄-Wasser (Austauschwasser) zu erklären. Ab dem Jahr 1978 kam es zu einer weiteren Veränderung des Chemismus. Insbesondere in den Brunnen Aue 2 und Aue 1 stiegen die Cl- und die Ca-Gehalte signifikant an. Bis zum Jahr 1980 stieg der Cl-Gehalt in Aue 2 bspw. von etwa 50 mg/l (1977) auf über 300 mg/l (Abb. 1.8). Parallel dazu erhöhte sich der Ca-Gehalt von 350 mg/l auf über 600 mg/l im Brunnen Aue 2. Diese Veränderung ist durch einen Zutritt von einem Ca-Cl-Wasser (Austauschwasser) zu erklären. Hingegen weist der Brunnen Aue 4 während des Zeitraums 1977 bis 1980 nur eine geringe Zunahme der Gehalte an Calcium und Chlorid auf.

Durch die Reduktion der Fördermengen von 570.000 m³ der Brunnen Aue 1, Aue 2, Aue 4 und Höllgraben (im Jahr 1991) auf 175.000 m³ im Jahr 2005 erfolgte eine zunehmende Aussüßung des geförderten Grundwassers. Die Chlorid-Gehalte des abgepumpten Wassers bei Aue 2 wiesen im Jahr 2003 eine Konzentration von 35 mg/l auf, welche den Werten zu Beginn der Förderung von etwa 30 bis 35 mg/l im Jahr 1964 entsprechen.

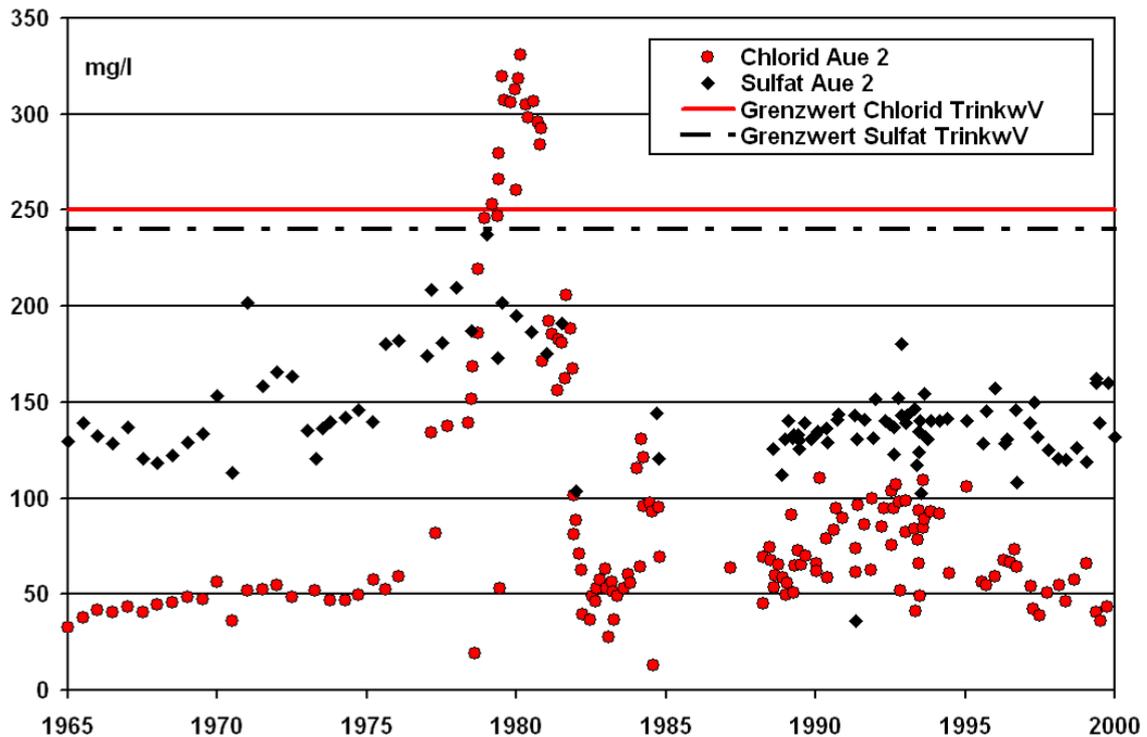


Abb. 1.8: Sulfat- und Chlorid-Gehalt der geförderten Grundwässer des Brunnens Aue 2 in den Jahren 1965 bis 2000 (zusammengestellt nach Daten aus THEURER 1983 und KÖHLER 2004) mit dem Grenzwerten für Chlorid und Sulfat nach TrinkwV als Bewertungsmaßstab.

Der Aufstieg der Austauschwässer der Trinkwasserfassungen Aue 1, Aue 2 und Aue 4 wurde zudem mit einer Korrelationsmatrix untersucht. Für die Beurteilung des Korrelationskoeffizienten r wurde der zweiseitige Test gewählt, da die Hypothese ungerichtet war. Der einseitige Test hätte bspw. herangezogen werden können, wenn von vornherein klar gewesen wäre, dass Natrium und Sulfat positiv korrelieren. Diese Aussage konnte allerdings vor der Analyse der Daten nicht getroffen werden. Daher wurde der zweiseitige Test gewählt. Üblicherweise wird in hydrogeologischen, statistischen Auswertungen das 95 %-Vertrauensintervall herangezogen, um statistische Signifikanz nachzuweisen. In der Mehrzahl der Auswertungen der vorliegenden Arbeit wird dieses Vertrauensintervall verwendet. In der folgenden Korrelationsanalyse wird jedoch aufgrund der Zielsetzung der höchsten Signifikanz für die zu erwartende Aussage das Vertrauensintervall auf 99,9 % definiert.

Beim Vergleich der Korrelationskoeffizienten (Tab. 1.2) für Natrium mit den Anionen weisen die Koeffizienten zum Chlorid (grau hinterlegt) und zum Sulfat (grün hinterlegt) ein Signifikanzniveau von 99,9 % auf. Für die Messstellen Aue 1 und Aue 4 ist die Korrelation Natrium – Sulfat höher als die Korrelation Natrium – Chlorid. Des Weiteren korreliert der Sulfat-Gehalt bei den Kationen 99,9 %-signifikant nur mit dem Natrium-Gehalt. Bei dieser Analyse konnte demnach ein deutlicher Einfluss der Na_2SO_4 -Austauschwässer auf die geförderten Rohwässer nachgewiesen werden. Die Messstelle

Aue 4 weist mit $r=0,92$ die höchste Korrelation des Natrium-Gehaltes mit dem Sulfat-Gehalt auf. Nach HÖLTING (1972) sind die Na_2SO_4 -Wässer in Deutschland, aufgrund fehlender Glaubersalzlagerstätten ausschließlich durch Ionenaustausch entstanden.

Tab. 1.2: Korrelationsmatrix der geförderten Rohwässer der Messstellen Aue 1, Aue 2 und Aue 4 der Jahre 1964 bis 1982 (die fett und schwarz gedruckten Werte haben das 99,9 %-Vertrauensintervall erfüllt (2-seitiger Test), benötigtes $r=0,708$).

	Na ⁺ Aue 1	Na ⁺ Aue 2	Na ⁺ Aue 4	Ca ²⁺ Mg ²⁺ Aue 1	Ca ²⁺ Mg ²⁺ Aue 2	Ca ²⁺ Mg ²⁺ Aue 4	Cl ⁻ Aue 1	Cl ⁻ Aue 2	Cl ⁻ Aue 4	SO ₄ ²⁻ Aue 1	SO ₄ ²⁻ Aue 2	SO ₄ ²⁻ Aue 4
Na ⁺ Aue 1	1	0,77	0,62	0,54	0,50	0,08	0,71	0,55	0,07	0,80	0,67	0,57
Na ⁺ Aue 2	0,77	1	0,57	0,73	0,73	0,42	0,87	0,80	0,49	0,65	0,76	0,55
Na ⁺ Aue 4	0,62	0,57	1	0,23	0,23	0,23	0,41	0,35	0,17	0,52	0,25	0,92
Ca ²⁺ Mg ²⁺ Aue 1	0,54	0,73	0,23	1	0,96	0,74	0,93	0,93	0,71	0,65	0,69	0,36
Ca ²⁺ Mg ²⁺ Aue 2	0,50	0,73	0,23	0,96	1	0,71	0,91	0,96	0,74	0,52	0,63	0,30
Ca ²⁺ Mg ²⁺ Aue 4	0,08	0,42	0,23	0,74	0,71	1	0,63	0,70	0,88	0,32	0,28	0,45
Cl ⁻ Aue 1	0,71	0,87	0,41	0,93	0,91	0,63	1	0,95	0,64	0,65	0,71	0,47
Cl ⁻ Aue 2	0,55	0,80	0,35	0,93	0,96	0,70	0,95	1	0,77	0,48	0,59	0,38
Cl ⁻ Aue 4	0,07	0,49	0,17	0,71	0,74	0,88	0,64	0,77	1	0,19	0,24	0,27
SO ₄ ²⁻ Aue 1	0,80	0,65	0,52	0,65	0,52	0,32	0,65	0,48	0,19	1	0,75	0,63
SO ₄ ²⁻ Aue 2	0,67	0,76	0,25	0,69	0,63	0,28	0,71	0,59	0,24	0,75	1	0,30
SO ₄ ²⁻ Aue 4	0,57	0,55	0,92	0,36	0,30	0,45	0,47	0,38	0,27	0,63	0,30	1

Bei der Analyse der Korrelationen vom Chlorid-Gehalt wurde der höchste Wert beim Vergleich mit dem Calcium-Magnesium-Gehalt (gelb hinterlegt) nachgewiesen. Dieses Rohwasser ist auf einen Ionenaustausch von Natrium durch Calcium und Magnesium zurückzuführen. I.A. werden nur Kationen ausgetauscht, da Anionen von Säuren in Verbindung mit Wasserstoff zersetzend auf die Tonminerale wirken. Bemerkenswert ist zudem, dass die Korrelation zwischen dem Sulfat-Gehalt und dem Calcium- und Magnesium-Gehalt für alle drei Messstellen das 99,9 %-Vertrauensintervall verfehlt.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sich die Genesen der beiden Austauschwässer einander diametral widersprechen. Zunächst wurde bis zum Jahr 1976 ein CaCO_3 -Wasser dem Grundwasserleiter entnommen. Im Jahr 1977 wurde an allen drei Brunnen ein Na_2SO_4 -reiches Wasser gefördert, welches durch einen Ionenaustausch von Calcium durch Natrium entstanden ist. Im Jahr 1978 lag der Na_2SO_4 -Gehalt etwa auf Vorjahresniveau, allerdings war ein deutlicher Anstieg der Calcium- und Chlorid-Gehalte zu verzeichnen, der seinen Höhepunkt 1980 aufweist. Dieses Wasser entstand durch den entgegengesetzten Ionenaustausch von Natrium durch Calcium im Grundwasserleiter. Durch die Überbeanspruchung der Trinkwasserfassungen wurde demnach ab 1977 ein salzhaltiges Tiefenwasser gefördert, wobei ab 1978 eine Veränderung des Chemismus und somit ein anderer Hauptlieferhorizont oder ein anderes Hauptliefergebiet aktiviert wurde.

Die Fördermengen der Trinkwassergewinnungen der Gemeinde Meinhard im nördlichen Bereich des Untersuchungsgebietes verringerten sich vom Jahr 1996 mit etwa 95.000 m³ auf etwa 75.000 m³ im Jahr 2005. Mit etwa 38.000 m³ pro Jahr war die Förderung am Tiefbrunnen Jestädt im Untersuchungszeitraum relativ konstant. Die Förderung des zweitergiebigsten Brunnens, dem Tiefbrunnen Neuerode sank von etwa 25.000 m³ im Jahr 1996 auf etwa 15.000 m³ im Jahr 2005. Insgesamt ist die Trinkwassergewinnung der Gemeinde Meinhard aus dem Grundwasser auf sechs Gewinnungsanlagen (drei Tiefbrunnen und drei Quelfassungen) verteilt. Die Qualität der vorliegenden Rohdaten wird in Kapitel 3.6 beschrieben.

Eine weitere hydrochemische Besonderheit des Untersuchungsgebietes stellt die hohe und stark schwankende Salzfracht des Vorfluters Werra dar. Bereits seit 1901 werden die bei der Salzförderung und Weiterverarbeitung anfallenden Abwässer in die Werra eingeleitet (KAHLERT 1993). Im Jahr 1924 wurden erstmals Grenzwerte für Chlorid in Werra und Weser festgelegt und ein Jahr später begann die Verpressung von Abwässern in den Plattendolomit. In den 1960er Jahren wurden pro Jahr bis zu 25.000 m³ Salzabwasser in den Zechsteinhorizont verpresst. Im Jahr 1968 stellten die Werke in der DDR (Thüringen) das Versenken der Salzlauge ein und leiteten die gesamten Abwässer direkt in die Werra (SINGEWALD 1980, LIERSCH 1993, KÄBEL 2006).

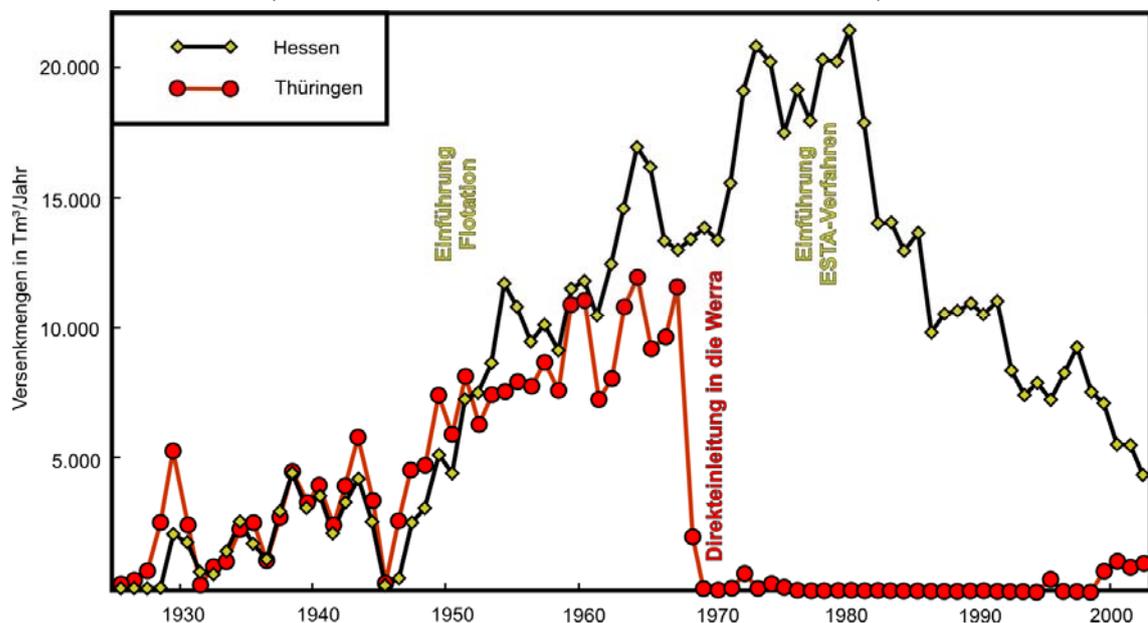


Abb. 1.9: Versenkmengen von Salzlauge [Tm³/Jahr] in den Plattendolomit in den Jahren 1925 bis 2002 (nach PFOH 2003).

Bis zum Jahr 1980 wurden jährlich etwa 11 Mill. Tonnen Salz in die Werra eingeleitet. In dieser Zeit wurden die Fischbestände der Weser durch mehrere primäre Fischsterben reduziert. Infolge dessen kam es zu Verhandlungen zwischen Vertretern der DDR und der BRD über die Verringerung der Salzfracht der Werra. Im Jahr 1988 wurden die Gespräche ergebnislos abgebrochen, da die DDR nicht an einer Lösung interessiert war. Durch den Zusammenbruch der DDR stellten mehrere Werke im Thüringischen

Kalirevier die Förderung ein, so dass nach 1990 die Salzbelastung in der Werra deutlich verringert wurde (KAHLERT 1993).

Die Schwankungsbreite der Salzfracht der Werra wurde von THOM (1992) untersucht. Dabei wurden zwischen Februar 1989 und März 1990 insgesamt fünf Probenahmekampagnen durchgeführt. Die folgenden Werte sind THOM (1992) entnommen:

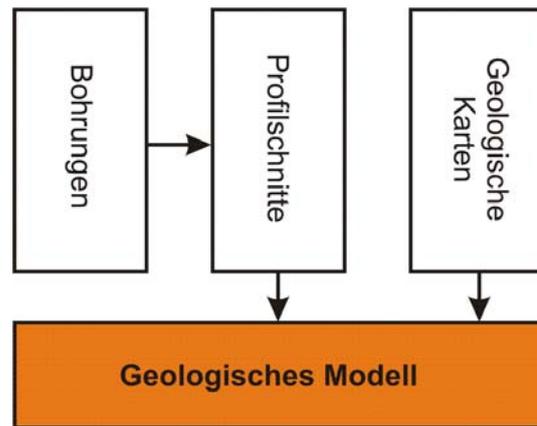
Tab. 1.3: Niedrigste und höchste gemessene Konzentration während der Messkampagnen 1989 bis 1990 (nach THOM 1992).

Parameter	Schwankungsbreite
Na ⁺	407 – 7.840 mg/l
K ⁺	52 – 615 mg/l
Cl ⁻	992 – 15.800 mg/l
elektrische Leitfähigkeit	3.800 – 49.000 µS/cm

Die Ionenverhältnisse blieben während dieser Probenahmekampagnen relativ konstant, da die in die Werra eingeleiteten Kaliabwässer immer ähnlich zusammengesetzt waren. Für die Flussfauna sind sowohl der hohe Absolutgehalt als auch die starken Schwankungen der Salzfracht problematisch. Für den Menschen besteht das hauptsächliche Problem der Werraversalzung in einer künstlichen Trinkwasserverknappung (HÜHN 1993). Neben den Direkteinleitungen der Salzabwässer kam und kommt es zu diffusen Übertritten von Salzwasser in die Werra. Im Raum Widdershausen und Dankmarshausen wurden diese diffusen Einträge quantifiziert. Zwischen den Jahren 1993 und 1995 traten 12-18 kg/s Chlorid zusätzlich zur normalen Fracht in die Werra ein. Auf diese Weise wird der Salzgehalt der Werra kontinuierlich erhöht und bis dato von der Werra unbelastete Bereiche werden durch den Salzaufstieg für die Trinkwassergewinnung unbrauchbar gemacht (SKOWRONEK ET AL. 1999).

2. Geologische Modellierung

Im folgenden Kapitel werden sowohl allgemeine methodische Aspekte der geologischen Modellierung als auch die Vorgehensweise bei der Erstellung des geologischen Modells von Eschwege sowie die Ergebnisse dieser Modellierung vorgestellt.



Im Rahmen der geologischen Modellierung als Vorstufe der hydrogeologischen Modellierung wird häufig nur ein stark vereinfachtes geologisches Modell generiert. Im ungünstigsten Fall wird die geologische Struktur mit einem nicht-topologischen Interpolationswerkzeug wie z.B. Surfer® erzeugt. Bei dieser gewählten Methodik wird die Struktur des Modells durch das Interpolationsverfahren bestimmt und nicht durch geologischen Sachverstand und geeignete Modellierungsalgorithmen. Störungszonen, Schichtversätze und eine komplexe Geometrie sind nur schwierig oder gar nicht in stark vereinfachte geologische Modelle integrierbar.

Durch die Verwendung konstruktiver oder iterativer Modellierungsalgorithmen werden die Ergebnisse einer geologischen Modellierung realitätsnäher und komplexere Strukturen können nachgebildet werden. Als Modellierungswerkzeug mit konstruktiven Modellierungsalgorithmen ist u.a. GSI3D® zu nennen. Insbesondere die Integration von Profilschnitten verbessert die Möglichkeiten geologische Strukturen abzubilden. Aus diesem Grund wurde das Modellierungswerkzeug GSI3D® für die geologische Modellierung des Untersuchungsgebietes genutzt.

Das Modellierungswerkzeug Surpac® ist als Programm mit iterativen Modellierungsalgorithmen anzuführen. Durch eine optimierte Editiermöglichkeit temporär erstellter Schichtflächen und Störungselemente kann das Modellierungsergebnis iterativ an die Realität bzw. das konzeptionelle Modell des Modellierers angepasst werden.

Im Rahmen hydrogeologischer Modellierungen ohne besondere Gewichtung auf die geologische Modellierung wird häufig das Interpolationswerkzeug Surfer® eingesetzt. Einfache, geologische Strukturen lassen sich dadurch abbilden. In der vorliegenden Arbeit wurde Surfer® im Rahmen der geologischen Modellierung nur für die Generierung der Struktur der Jestädt-Subrosion verwendet, da eine manuelle Erstellung dieser Struktur in GSI3D® einen unverhältnismäßig hohen Aufwand verursacht hätte.

Die Kopplung des Modellierungswerkzeuges GSI3D® mit dem Interpolationsverfahren Kriging (Surfer®) erbrachte in diesem Fall sehr gute Ergebnisse.

Neben den Beschreibungen der Standardanwendungen von verschiedenen Modellierungswerkzeugen ist insbesondere die Kopplung der Surfer®-Interpolationsergebnisse an das Modellierungswerkzeug GSI3D® von großer Bedeutung für die vorliegende Arbeit. Die in Kap. 2.4 beschriebene Kopplung stellt dabei eine Besonderheit im Vergleich zur Standardmodellierung von geologischen Strukturen dar. Des Weiteren werden in Kap. 2.5 die Ergebnisse der geologischen Modellierung des Modellraumes beschrieben.

2.1. Ziele und Nutzung

Im Allgemeinen führen die Ergebnisse der geologischen Modellierung zu einer verbesserten Darstellung der geologischen Verhältnisse im Betrachtungsraum. Durch 3D-Visualisierungen können geologische Zusammenhänge zudem geowissenschaftlichen Laien einfach nahe gebracht werden (vgl. GONZÁLEZ-AQUILERA et al. 2009, ROSENBAUM 2003). Durch die optimierte Kenntnis der Heterogenität und der Lagebeziehungen hydraulisch relevanter Schichten kann u.a. die Beurteilung von Strömungs- und Transportverhalten von Kontaminanten verbessert werden (WYCISK ET AL. 2002). Das geologische 3D Modell kann dabei als hydrogeologisches Strukturmodell genutzt werden. Zudem ist der Bedarf entstanden, aus den geologischen Modellen objektive Entscheidungen abzuleiten (NASSER ET AL. 2003). Die geologischen Modelle sind somit auch Ausgangsbasis für Berechnungen, dienen als Grundlage für Parameterstudien (GAU 2005) und für Betrachtungen bzgl. CO₂-Speicherung im Untergrund (u.a. EIGESTAD ET AL. 2009).

Weitere Voraussetzungen und Auswertemöglichkeiten von geologischen Modellen werden in WYCISK ET AL. (2003) angeführt:

- Erfassung und Abbildung der geologischen Körper bei sehr unterschiedlicher Bohraufschlussdichte,
- 3D-Modellierung von natürlichen und anthropogen lithostratigraphischen Körpern,
- Abbildung der Mächtigkeitsverteilung,
- Berechnung der Kubaturen,
- Erstellung von virtuellen Bohrungen,
- Einbindung von hydrogeologischen Messwerten und Kontaminanten,
- Parametrisierung der Zellen einzelner Schichtkörper nach unterschiedlichen Anforderungen,

- Übernahme des digitalen Datensatzes über Schnittstellen in hydraulische Modellierungssoftware und
- vollständige GIS-Fähigkeit.

Die Komplexität des zu erstellenden Modells hängt direkt mit den späteren Nutzungszielen zusammen (TURNER 2003, EVANS 2003). Die Zielsetzung und Weiterverarbeitung des Modells ist demnach vor Beginn der Modellierungsarbeiten zu klären. Insbesondere die spätere Nutzung hinsichtlich der Strömungs- und Transportmodellierung definiert die hydraulisch relevanten Schichten als Elemente mit erhöhter Wichtigkeit und größeren Ansprüchen an die Genauigkeit der Modellierung.

In der geologischen Modellierung treten Unsicherheiten und Ungenauigkeiten des Modells, durch das mangelnde Vermögen der Modelle, beobachtete Phänomene (Messwerte) zu reproduzieren bzw. vorherzusagen, zu Tage (BUCHHOLZ 2001, MOREL-SEYTOUX 2001). SAKSA ET AL. (2003) listen verschiedene Unsicherheiten bei der geologischen Modellierung auf:

- geologisches Konzept (Deformationen, Alter, Beschreibungen),
- Messwerte (Limitierungen in Probenahme, Bedeckung, räumliche Erstreckung),
- Strukturgeometrie (Zonierung, Anisotropie),
- strukturelle Eigenschaften (allgemeine und diskrete Daten, Variabilität),
- Fehler (in Beobachtungen, in Korrelationen),
- Unstimmigkeiten (fehlende Definitionen, subjektive Einschätzungen),
- Skale (Generalisierungen) und
- unbekannte Lithologie oder Struktur (unbeprobte Horizonte, verfügbare Untersuchungsmethoden).

Diese Unsicherheiten fasst EVANS (2003) zu Unsicherheiten in Daten und Messungen zusammen. Demgegenüber stellt er Unsicherheiten, die im Modellierungsprozess durch die mathematischen Gleichungen erzeugt werden. Die Unsicherheiten steigen dabei mit abnehmender Bohrdichte an. Die Entscheidung, ob die Unsicherheiten zu groß sind, muss der Modellentwickler hinsichtlich der Zielsetzung treffen. Anschließend müssen diese Unsicherheiten gegen die Kosten ihrer Reduzierung abgewogen werden. Unsicherheiten der Modellparameter können u.a. durch eine Monte-Carlo-Simulation abgeschätzt werden (SEPPELT 2003).

2.2. *Methodische Ansätze*

Die Modellierung bezeichnet einen Prozess, um eine nicht originalgetreue, aber originalähnliche Abbildung (STACHOWIAK 1973) zu erzeugen, die bestimmte Eigenschaften des Modellobjektes hervorhebt und andere wiederum vernachlässigt

(KASTENS & KLEINE BÜNING 2005). Ein Modell ist dabei immer eine Vereinfachung des Originals und wird mit dem Ziel angewandt, Phänomene der Realität zweckgerichtet abzubilden (BUCHHOLZ 2001, CARRERA & BASTIDAS 2005, MORTON & SUÁREZ 2001). Dabei obliegt es dem Modellierer, die relevanten und die zu vernachlässigenden Attribute des Originals festzulegen und diese in der Modellierung umzusetzen (STACHOWIAK 1973), um die Simulation des Systemverhaltens zu optimieren (LESER 1997).

Für die Erstellung des geologischen Modells können verschiedene Input-Parameter als Datenbasis genutzt werden. Klassische, geologische-3D-Modellierungsprogramme, wie z.B. Rockworks® der Firma RockWare®, nutzen primär ausschließlich geologische und DGM-Informationen aus den Bohrungen sowie verschiedene Interpolationsalgorithmen, um die Bohrdaten zu einem geologischen 3D-Modell zu verarbeiten. Wird mittels einer der Methoden IDW (Inverse Distance Weighting), TIN (Triangular Irregular Network) oder Nearest Neighbor (vergl. XUE ET AL. 2004) direkt aus der Datenmenge eine Fläche erzeugt, wird diese Methode von NEUMANN (2002) als nicht-interaktiv bezeichnet. Im Gegensatz dazu, wird der Einsatz geostatistischer (Kriging) und statistischer Verfahren als approximierende Methode betrachtet. Bei der Wahl des Interpolationsverfahrens ist zu beachten, dass bei großen Bereichen mit wenig oder keinen Informationen das gewählte Verfahren und dessen Optionen einen signifikanten Effekt auf das Ergebnis haben (SCHAFMEISTER 1999, LEMON & JONES 2003, MALLET 2002, CALCAGNO ET AL. 2008, WYCISK ET AL. 2009, WYCISK ET AL. 2008).

Als Optimum in der Modellierung führt NEUMANN (2002) interaktive Modellierungstechniken (z.B. Profilschnitte) an. Mittels Profilschnitten sind heterogene Informationen über sehr komplexe, geologische Strukturen integrierbar. Des Weiteren ist durch die Integration von nutzergenerierten Profilschnitten mehr Kontrolle über die resultierenden Körper vorhanden (KAUFMANN & MARTIN 2009, LEMON & JONES 2003, SOBISCH 2000). Im Gegensatz dazu führt EVANS (2003) als Kritikpunkt an, dass Modellierungsergebnisse nicht reproduzierbar sind, wenn diese durch interaktive Modellierungstechniken erzeugt wurden, da geologisches Wissen und geologische Regeln nicht normiert sind und Geologen einer „unscharfen Logik“ folgen, wenn sie Entscheidungen treffen.

Aufgrund der optimierten Modellierung und Abbildung der geologischen Strukturen bilden interaktive Modellierungstechniken dennoch eine bessere Grundlage für die Modellierung komplexer, geologischer Strukturen (BERG & KEEFER 2004). Daher wurde das Modellierungswerkzeug GSI3D® mit der Möglichkeit, Profilschnitte zu integrieren, für die geologische Modellierung des Modellgebietes genutzt.

Geologische Modellierungssoftware GSI3D®

Bei der genutzten Modellierungssoftware GSI3D® handelt es sich um ein Tool, welches auf interaktiven Modellierungstechniken beruht. Aus dem wichtigsten Input, den stratigraphischen und lithologischen Bohrdaten, wird durch nutzergenerierte Profilschnitte und anschließende Interpolation das geologische Modell aufgebaut. Des Weiteren werden in CULSHAW (2005) und SOBISCH & BOMBIEN (2003) zusätzliche Eingangsparameter aufgeführt:

- stratigraphische und lithologische Bohrdaten,
- 2D geologische Karten,
- Digitales Geländemodell (DGM),
- Profilschnitte,
- Karten von tieferen geologischen Einheiten,
- geophysikalische Daten,
- geochemische Beschreibungen,
- hydrogeologische Daten und
- geotechnische Daten.

Nach CULSHAW (2005) wird das Programm GSI3D® intensiv vom British Geological Survey für die geologische Modellierung der oberen 100 m genutzt. Bei der Modellierung von Überschiebungen, Verfaltungen und Intrusionen sollten andere Programme genutzt werden, da diese z.T. tektonischen Elemente nicht integriert werden können. RUSSELL ET AL. (2005) weisen darauf hin, dass die Modellierung oberflächennaher, quartärer Schichtenfolgen ein Modellierungsaspekt ist, für den umfassende Kenntnisse und Erfahrungen fehlen (BERG & THORLEIFSON 2001).

Im Modellgebiet Eschwege konnten durch eine hohe Profilschnittdichte, u.a. im Bereich der Blauen Kuppe, komplexe geologische Strukturen modelliert werden (Abb. 2.18). Die Einbindung der Interpolationssoftware Surfer® erbrachte im Gebiet der Jestädt-Subrosion ebenfalls optimierte Ergebnisse (Abb. 2.17). Demnach ist es durch Optimierung der Profilschnitte und durch Kopplung mit anderen Programmen möglich, komplexe Strukturen zu modellieren.

2.3. *Qualität und Unsicherheiten in der Datenbasis*

Bei einem regionalen Modell stellt die Qualität der Datenbasis einen der wichtigsten Bestandteile des Modellierungsprozesses dar. Bei der Modellierung in der vorliegenden Arbeit wurden Bohrdaten, ArcView-Shapes der Geologie nach JACOBSHAGEN ET AL. (1993), ein DGM, nutzergenerierte Profilschnitte und Karten von tieferen geologischen

Einheiten als Eingangsparameter genutzt. Die Profilschnitte und die Karten von tieferen geologischen Einheiten zählen hierbei nicht zur primären Datenbasis.

Für die geologische Modellierung des Untersuchungsgebietes konnte auf insgesamt 191 Bohrungen zurückgegriffen werden. Alle Bohrungen wurden in das Datenbankprogramm GeODin eingetragen und verwaltet. In das geologische 3D-Modell des Talraums Eschwege wurden 95 Bohrungen integriert. Die 96 nicht genutzten Bohrungen wurden aufgrund fehlender Koordinaten, zu geringer Bohrtiefe, zweifelhafter Schichtansprache oder direkter Nähe zu Nachbarbohrungen aus der Modellierungsdatenbasis entfernt.

Tab. 2.1: Bohranzahl und zugehörige Quellenangabe.

Anzahl	Quelle
109	Bohrarchiv HLUG (TK 4826)
59	Bohrarchiv HLUG (TK 4726)
14	Bohrungen Fachgruppe Umweltgeologie, Halle (Saale), 2002 bis 2006
9	THOM (1992), abgeteuft 1989

Rund 74 % der verwendeten Bohrungen sind jünger als 1960 (Abb. 2.1). Es wurde bei der Auswahl der Bohrungen versucht, die Bohrungen vor dem 2. Weltkrieg nur dann zu verwenden, wenn dies zwingend nötig war. Hauptgrund dieser Selektion war die schlechte Bohrungsaufnahme und die z.T. sehr geringe stratigraphische Auflösung. Teilweise enthalten 20 m tiefe Bohrungen ausschließlich Angaben über das angetroffene Prä-Quartär, obwohl nach Bohrprotokoll bis zu acht Meter mächtige, quartäre Deckschichten die dokumentierten Zechstein- oder Buntsandstein-Schichten überlagern.

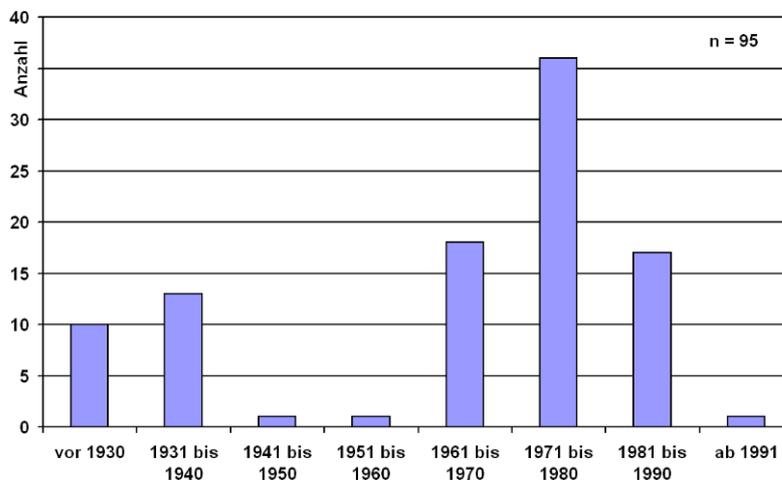


Abb. 2.1: Alter der verwendeten Bohrungen.

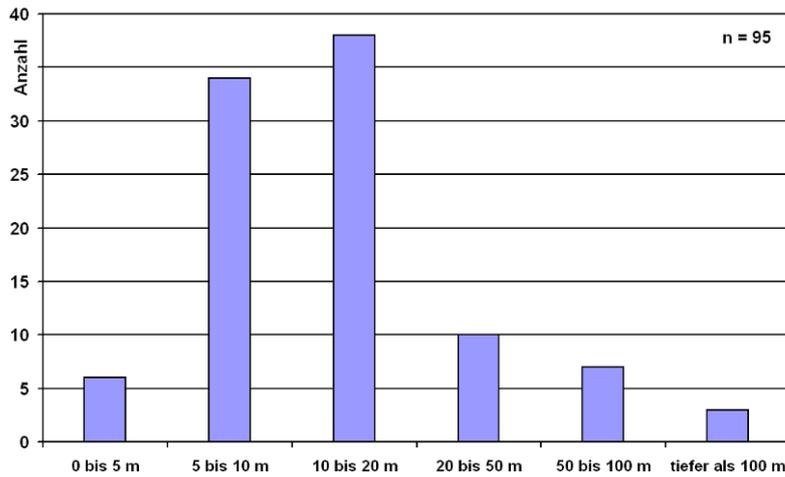


Abb. 2.2: Endteufe der verwendeten Bohrungen.

Die meisten Bohrungen (75 %) weisen eine Tiefe von bis zu 20 m auf. Insbesondere für die Lagerstätten erkundung für den Kiesabbau wurden diese Bohrungen niedergebracht und befinden sich daher in Bereichen mit mächtigen, quartären Lockergesteinsablagerungen. Tiefere Bohrungen für eine optimierte Modellierung des Festgesteins-Untergrundes im Bereich des Unteren Buntsandsteins und Zechsteins sind nur in gerinem Umfang vorhanden (Abb. 2.2). 27 Bohrungen erreichen als Endhorizont den Zechstein, allerdings ist die Buntsandstein-Zechstein-Grenze nur in drei verwendeten Bohrungen dokumentiert (von 56 Bohrungen mit Buntsandstein-Anteilen enden 53 dort auch). Eine verbesserte Modellierung dieser Schichtfläche konnte nur durch zusätzliche Informationen (u.a. Verbreitungspolygone, Profilschnitte) erreicht werden (Abb. 2.3).

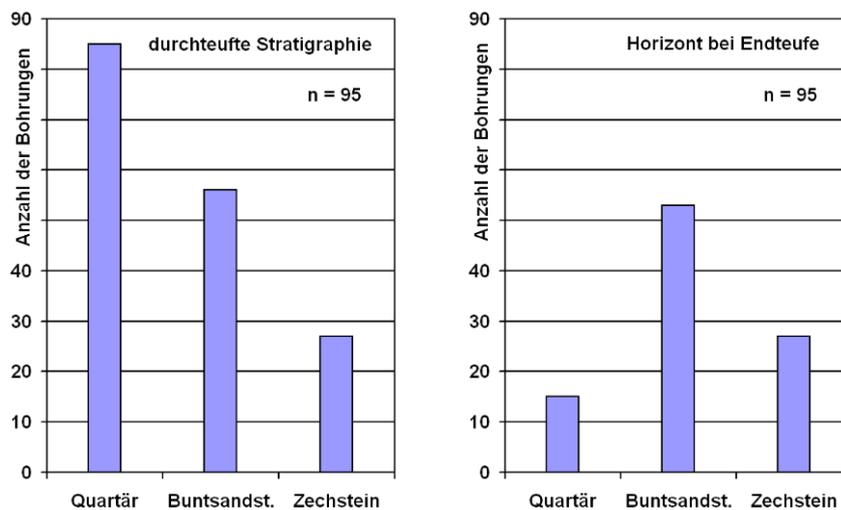


Abb. 2.3: Angetroffene, modellrelevante, stratigraphische Horizonte und Horizont bei Endteufe der verwendeten Bohrungen.

Die räumliche Verteilung der verwendbaren Bohrungen im Untersuchungsgebiet ist sehr heterogen (Abb. 2.4). Insbesondere im Zentralbereich des Modellgebietes ist die Bohrdichte gut bis sehr gut. In den nördlichen und südlichen Randbereichen sowie in

Teilgebieten im Zentrum mussten die Primär-Bohrinformationen durch Zusatz-Bohrungen erweitert werden, die aus Gutachten und Publikationen abgeleitet wurden (PAULY ET AL. 1973, GAUGLITZ 1975, JACOBSHAGEN ET AL. 1993, OSA ESCHWEGE 1977).

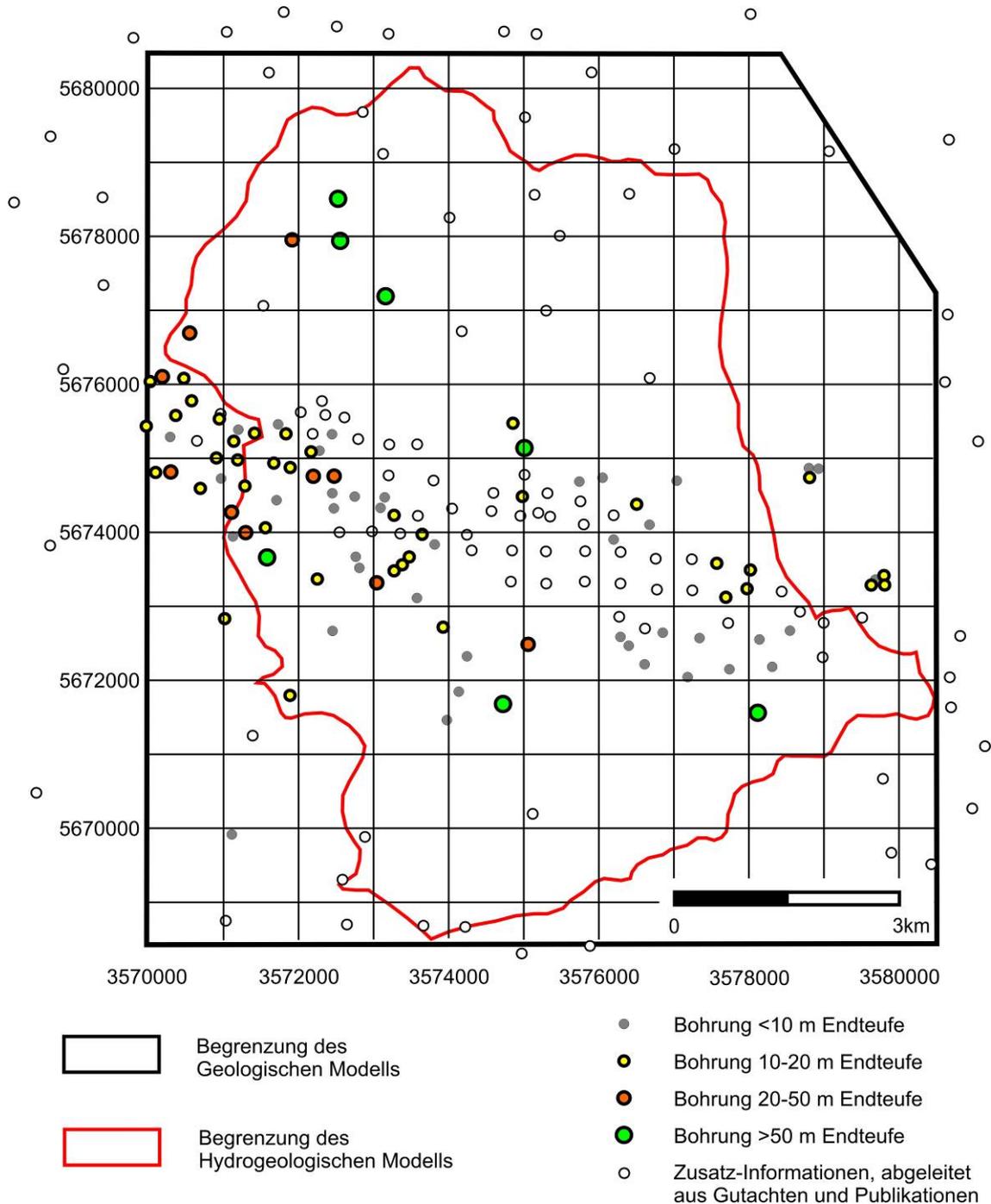


Abb. 2.4: Räumliche Verteilung und Endteufen der modellrelevanten Bohrungen.

Aufgrund der unterschiedlichen Bohrdichte nehmen die Unsicherheiten in der geologischen Modellierung mit der Tiefe und größerem Abstand zum Talraum-Aquifer zu. Eine Quantifizierung der Unsicherheiten konnte nicht erfolgen, da durch die Integration der Zusatz-Bohrungen und Verbreitungspolygonen (siehe Abb. 2.4) und des profilschnittgestützten Modellierungsansatzes (siehe Abb. 2.9) die ursprüngliche

Datenbasis erweitert und die ursprünglich bestehende Unsicherheit nicht quantifizierbar verringert wurde.

Als zweiter, wichtiger Eingangsparameter für die geologische Modellierung in GSI3D® können Verbreitungspolygone der geologischen Einheiten genutzt werden. Die Stützpunkte der ArcView-Polygone werden als zusätzlicher Input für die Generierung der Raumlage der Schichten genutzt. Die Polygone weisen nach der Projektion auf das DGM nutzbare 3D-Informationen über die Lage der zugehörigen Schicht auf. Für die geologische Modellierung des Untersuchungsgebietes wurde dabei auf die Kartendarstellung von JACOBESHAGEN ET AL. (1993) zurückgegriffen.

Den dritten, unabdingbaren Input stellt das DGM dar. Vor Beginn der vorliegenden Arbeit bestand in der Fachgruppe bereits ein gering auflösendes DGM, welches mittels Digitalisierung und anschließender Interpolation der Höhenlinien der topographischen Karten TK25 4826 Eschwege (HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT 1995a), TK25 4726 Grebendorf (THÜRINGER LANDESVERMESSUNGSAMT 1997), TK25 4825 Waldkappel (HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT 1995b) und TK25 4725 Bad Sooden-Allendorf (HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT 1997) erzeugt wurde.

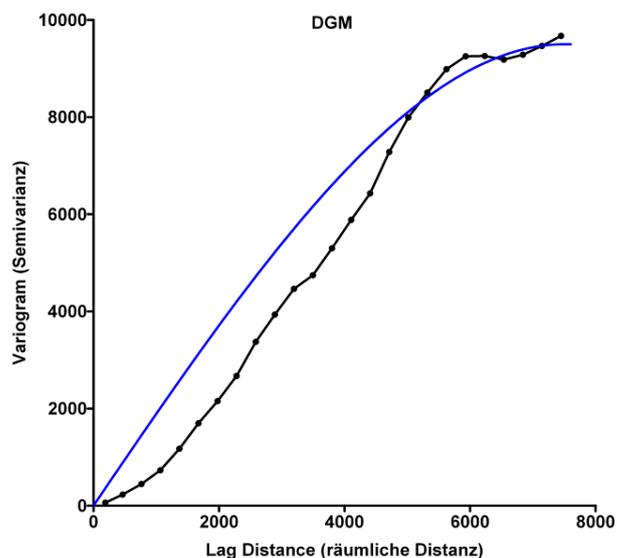


Abb. 2.5: Omnidirectionales Variogramm für die Generierung des Digitalen Geländemodells aus den Stützpunkten.

Für die Interpolation des DGMs wurde das Interpolationsverfahren Kriging mit den Parametern Sill=9.300, Range=7.500 und dem Nugget-Effekt=0 genutzt (Abb. 2.5, Abb. 2.6, Abb. 2.7).

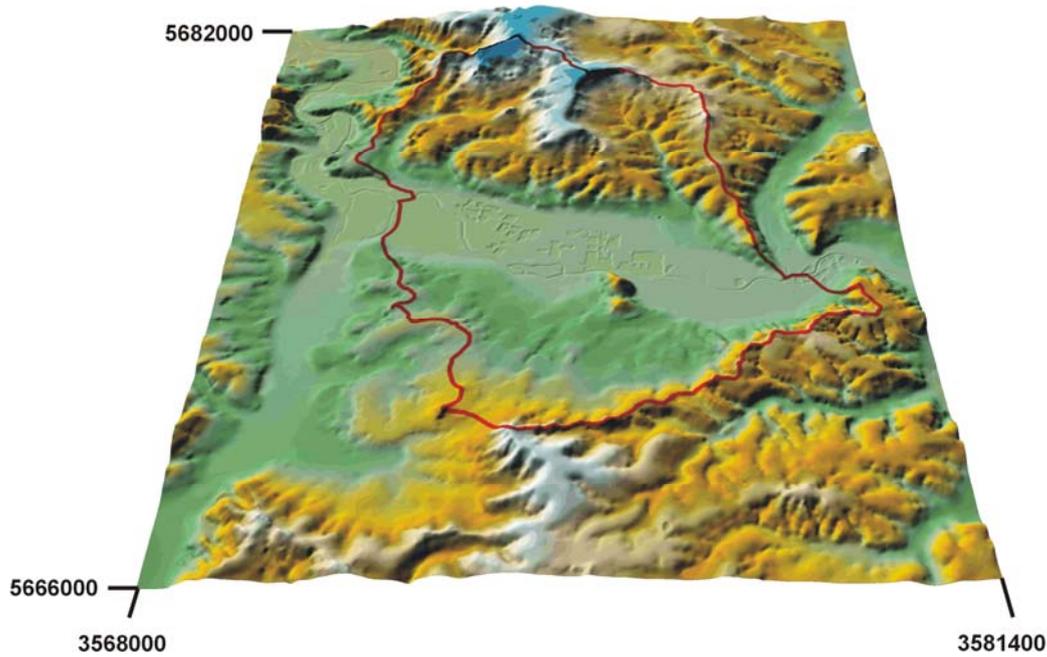


Abb. 2.6: Das Digitale Geländemodell (2-fach überhöht) des Untersuchungsgebietes mit rot umrandeter Modellgrenze des hydrogeologischen Modells.

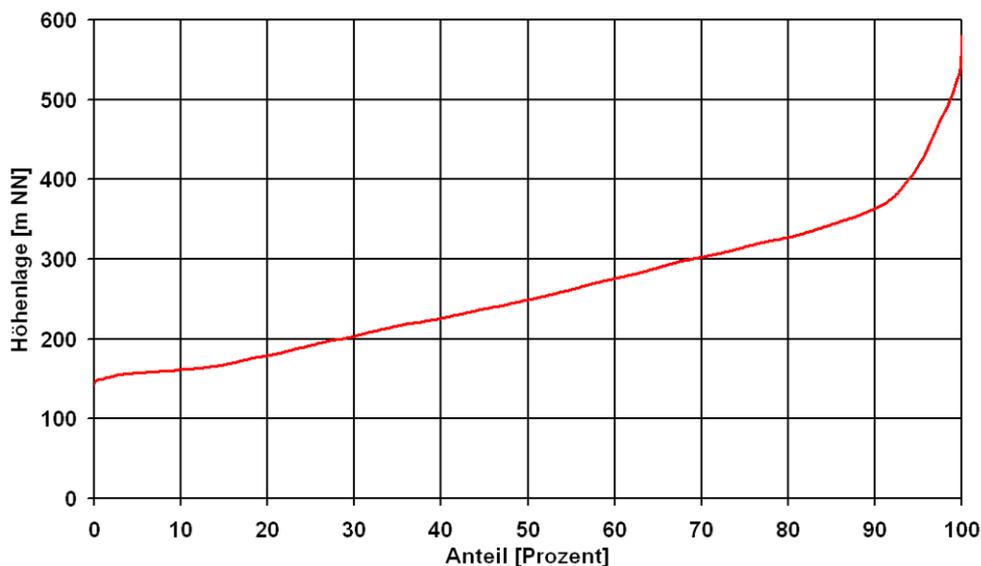


Abb. 2.7: Hypsometrische Kurve des DGMS von Eschwege mit der Talau bei 160 mNN als tiefstes, morphologisches Element, die etwa 10 bis 15 % der Gesamtfläche umfasst.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde das Digitale Geländemodell auf das gesamte Modellgebiet erweitert und insbesondere im Talauenbereich deutlich verfeinert und verbessert. Nach Abschluss der Digitalisierarbeiten wurde aus den über 110.000 gesetzten Höhenlinien-Punkten mittels Interpolation (Kriging) das DGM (20 m Raster) generiert. Aufgrund des Bestehens eines DGMS vor Beginn der eigenen Arbeiten wurde dieses erweitert und andere Quellen der Gewinnung von flächenhaften Höheninformationen nicht genutzt.

Als mögliche Alternative, ein DGM zu generieren, sind die SRTM-Daten zu nennen. Da diese jedoch im Untersuchungsgebiet mit einer 90 x 90 m-Auflösung und einer hohen vertikalen Ungenauigkeit vorliegen, konnten diese Daten nicht genutzt werden. Andere, frei verfügbare Datensätze, wie z.B. GTOPO30 weisen teilweise noch schlechtere Auflösungen auf.

2.4. Datenverarbeitung

Die geologische Modellierung wurde, wie bereits erwähnt, mit dem Programm GSI3D® durchgeführt. Zunächst wurden die modellrelevanten Einheiten festgelegt. Dabei wurden geringmächtige Einheiten wie bspw. Löss, lokale Abschwemmmassen, Hangschutt und Fließerden als nicht relevant für das geologische Strukturmodell des Talraums bei Eschwege bzw. als nicht modelltechnisch abbildbar erachtet. Die hydraulischen Einflüsse dieser Einheiten wurden jedoch bei der Ermittlung der Grundwasserneubildung berücksichtigt. In Tab. 2.2 sind die modellierten, geologischen Einheiten im von GSI3D® benötigten Format für die Schichtenfolgebeschreibung aufgeführt. Die Tabellenköpfe der Tab. 2.2, Tab. 2.3 und Tab. 2.4 sind nicht Bestandteil des Datenformats.

Die Verknüpfung der Tab. 2.2 und Tab. 2.3 untereinander erfolgt in GSI3D® durch die Eingabe der Position der ID-Spalte im Datenformat. Die Anbindung der Stammdaten aus Tab. 2.4 erfolgt automatisch nach dem Import, da die Bohrbezeichnung wie auch in Tab. 2.3 an erster Stelle stehen muss.

Tab. 2.2: Datenformat der Schichtenfolgebeschreibung der Datei *model.sfb*.

ID	Nr.	Stratigraphie	Beschreibung
DGM	1	DGM	Digitales Geländemodell
Schwemm	2	q	Schwemmfächer
Lf	3	q	Auenlehm
Kies	4	q	Quartärer Kies-Aquifer
TerBa	5	t	Tertiäres Basaltvorkommen
MuKaU	6	mu	Unterer Muschelkalk
BuSaO	7	so	Oberer Buntsandstein
BuSaM	8	sm	Mittlerer Buntsandstein
BuSaU	9	su	Unterer Buntsandstein
Zech	10	z	Zechstein
Devon	11	d	Devon

Die Daten in den beiden folgenden Tabellen (Schichtenfolge und Stammdaten) wurden anonymisiert, da die Bohrdaten vom HLOG ausschließlich für die Erstellung des

geologischen Modells bereitgestellt wurden und daher nicht explizit in dieser Arbeit aufgeführt werden.

Tab. 2.3: Schichtunterkantenanzuordnung zum Bohrungsnamen in der Datei *schicht.blg*.

Bohrbez.	Tiefe in m unter GOK	Stratigraphie	ID
4726x-*1	2,50	q	Lf
4726x-*1	8,96	q	Kies
4726x-*1	10,12	z	Zech
4726x-*2	2,50	q	Lf
4726x-*2	18,70	q	Kies
4726x-*2	20,72	z	Zech
4726x-*3	2,50	q	Lf
4726x-*3	5,40	q	Kies
4726x-*3	13,50	z	Zech
...

Tab. 2.4: Stammdaten der Bohrungen in der Datei *stamm.bid*.

Bohrbez.	Rechtswert	Hochwert	Höhe in mNN
4726x-*5	3578830	5674810	175,5
4726x-*6	3570500	5676780	211,0
4726x-*7	3573240	5674300	158,3
4726x-*8	3573060	5674400	158,4
...

Bei der geologischen Modellierung in GSI3D® wird zunächst aus den Bohrungen der Verlauf eines Profilschnittes generiert. Dabei kann der Profilschnitt auch über den von den Bohrungen erfassten Bereich hinausgehen. Zwischen den Bohrungen wird anschließend der Profilschnitt generiert (Abb. 2.8), der den geologischen Interpretationen der Stratigraphie entspricht. Auf der Basislinie des Auenlehms sind zudem die gesetzten Digitalisierungspunkte dargestellt, auf deren Grundlage die Interpolation mittels Triangulation erfolgt. Die Bohrung selbst ist ohne zusätzlich digitalisierten Punkt nicht als Input für die Interpolation verfügbar. Im vorliegenden Fall wurde aber die Bohrung in einem kreuzenden Profilschnitt mit einem Digitalisierungspunkt versehen.

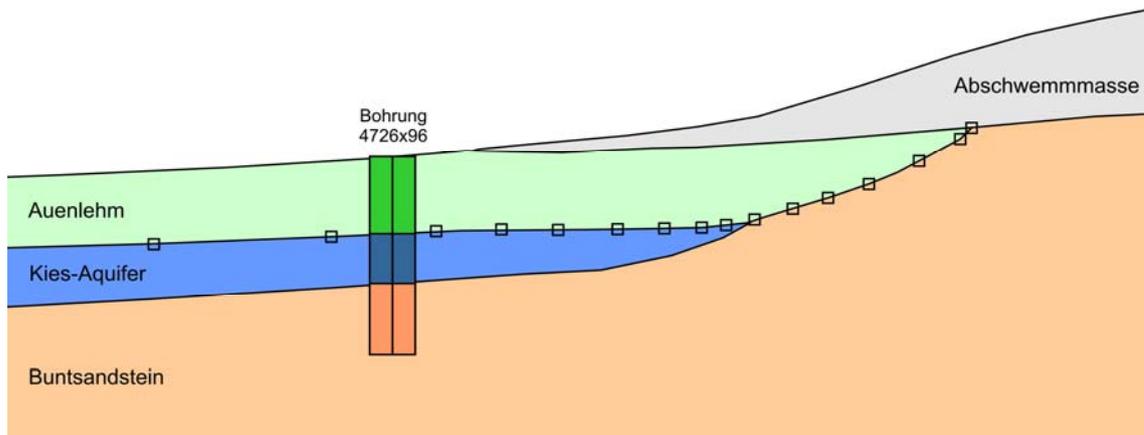


Abb. 2.8: Schematischer, verkürzter Profilschnitt mit verschiedenen, stratigraphischen Horizonten (7-fach überhöht) am Schwemmfächer des Kellaer Bachs.

Aus den insgesamt 95 Bohrungen, zzgl. der etwa 100 Zusatz-Bohrungen wurden 105 Profilschnitte generiert. 80 davon bilden u.a. die Strukturen des Auenlehms und des Kies-Aquifers ab. Diese starke Vernetzung im Talraum führt mit der hohen Anzahl an Bohrungen zu einer sehr guten Qualität der geologischen Modellierung des Talraum-Aquifers (Abb. 2.9).

Im Bereich der sich nördlich und südlich anschließenden Festgesteinsbereiche ist die Profilschnitt-Dichte deutlich geringer (Abb. 2.9). Dies wird sowohl in der geringen Bohrdichte als auch im geringen Grad der Relevanz für die Aufgabenstellung begründet. Aufgrund der unzureichenden Anzahl von Bohrungen, die verschiedene Festgesteinseinheiten durchteufen, ist in den Festgesteinsbereichen eine Profilschnittkonstruktion nur mit Einschränkungen hinsichtlich der Aussagesicherheit möglich. Bei der Optimierung der Profilschnitte wurde auf Mächtigkeitsangaben in JACOBESHAGEN ET AL. (1993) zurückgegriffen. Eine höhere Dichte an Profilschnitten im Festgestein ist programmtechnisch umsetzbar. Es wurde allerdings darauf verzichtet, da die Unsicherheiten der Lage der Gesteinsschichten nicht reduziert werden konnten.

Als weitere Inputparameter wurden Geologische Karten (JACOBESHAGEN ET AL. 1993) genutzt. Nach der Generierung von Verbreitungspolygonen in ArcView® (Polygon-Shapes) können diese in GSI3D® importiert werden. Die Stützpunkte der digitalisierten Polygone werden als gleichrangige Informationen zu den digitalisierten Profilschnitt-Punkten betrachtet und stellen somit Eckpunkte bei der anschließenden Triangulation dar. Diese Verbreitungspolygone wurden für die Schichten Schwemmfächer, Auenlehm, quartärer Kieskörper und Basaltvorkommen Blaue Kuppe genutzt. Bei den übrigen Schichten wurde auf die Anwendung von Verbreitungspolygonen verzichtet, da durch die implementierte Hierarchie der geologischen Einheiten eine automatische Verschneidung mit den jüngeren Einheiten und der Geländeoberkante erfolgt.

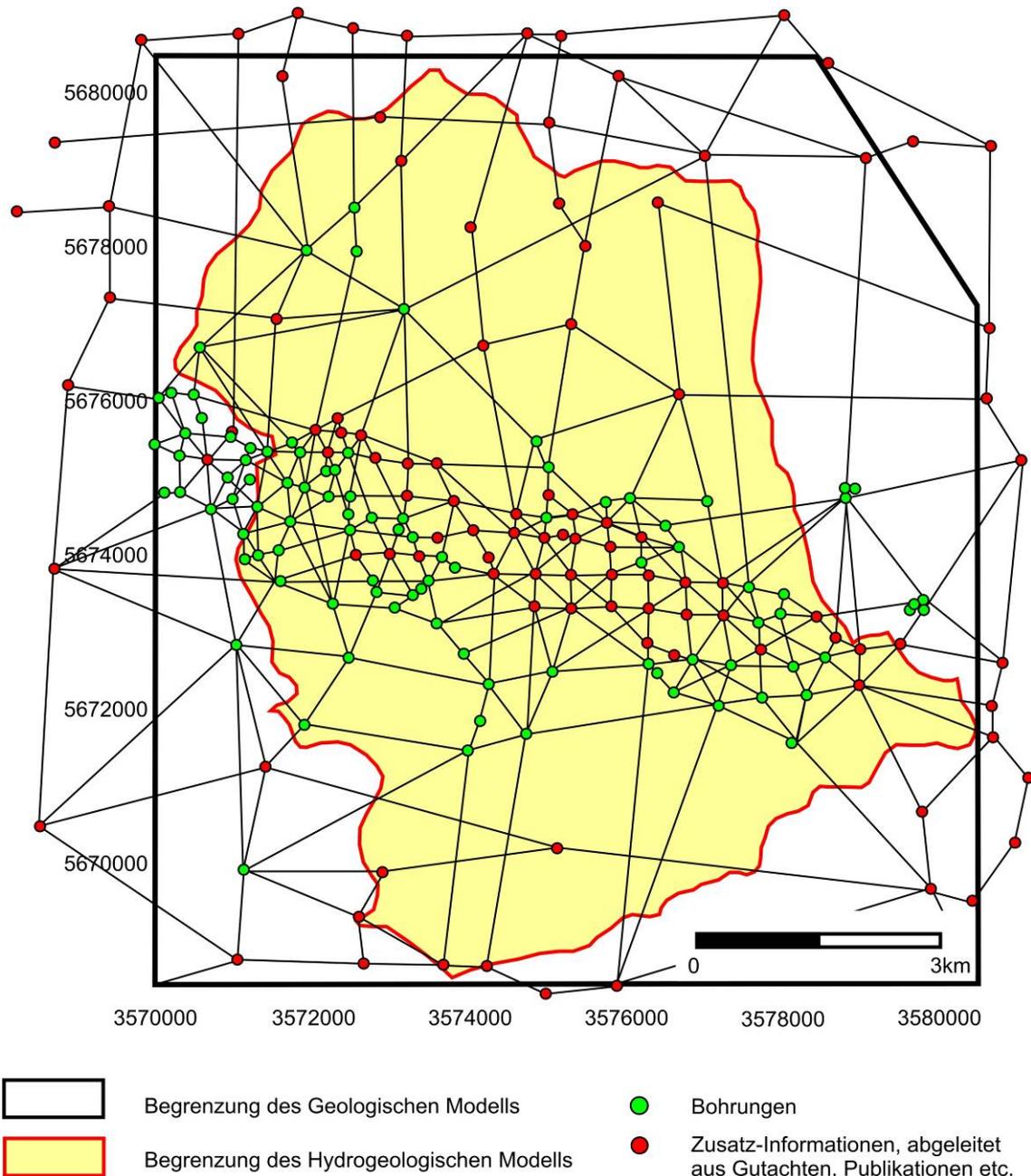


Abb. 2.9: Räumliche Verteilung der generierten Profilschnitte, die sich innerhalb des geologischen Modells befinden.

Besondere Ergebnisse der geologischen Modellierung

Südlich von Jestädt, im westlichsten Bereich des Untersuchungsgebietes, weisen mehrere Bohrungen Kiesmächtigkeiten von mehr als 20 Metern auf. Dort wurde der unterlagernde Zechstein stärker abgelaugt als im übrigen Tal, da er dort direkt unter dem quartären Aquifer lagert. Die Standard-Interpolation in GSI3D® lieferte aufgrund der Triangulation eckige und unplausible Strukturen für die Zechstein-Subrosion. Für eine optimierte Modellierung und Visualisierung wurden folgende Arbeitsschritte durchgeführt:

- Export der digitalisierten Punkte (18 Profilschnitte) der Kies-Unterkante als ASCII-Daten (Abb. 2.10),
- Interpolation der Struktur auf 100 m-Raster mittels Triangulation (Surfer®),
- Zweit-Interpolation der Struktur auf 10 m-Raster mittels Kriging (Surfer®) und
- Rückimport als ASCII-Daten in GSI3D®.

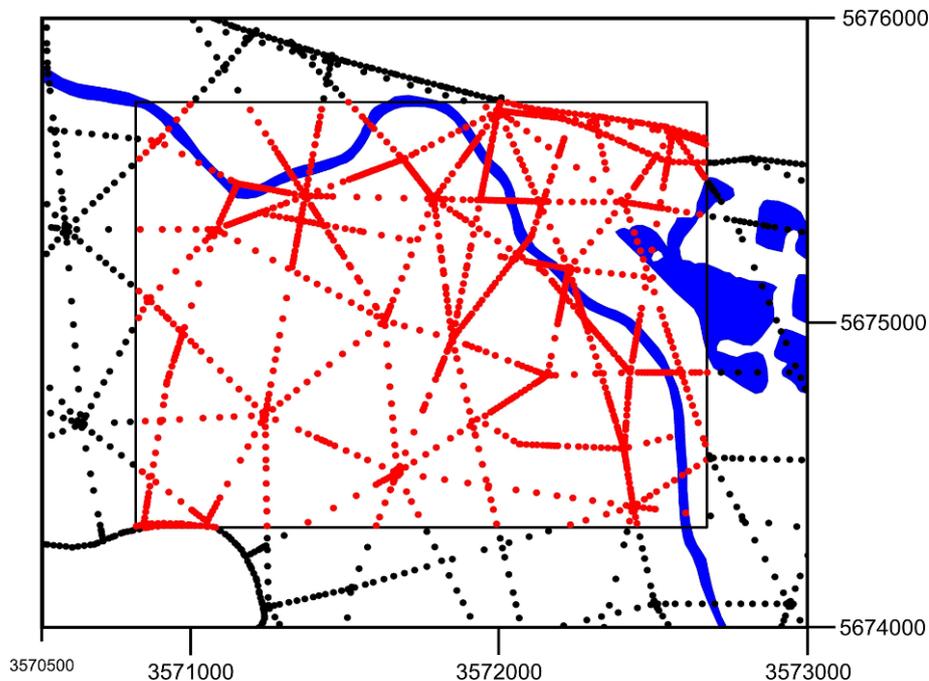


Abb. 2.10: Darstellung der exportierten Profilschnitt-Stützpunkte (rot) im Bereich der Jestädt-Subrosion, in schwarz sind weitere Stützpunkte in der unmittelbaren Umgebung visualisiert.

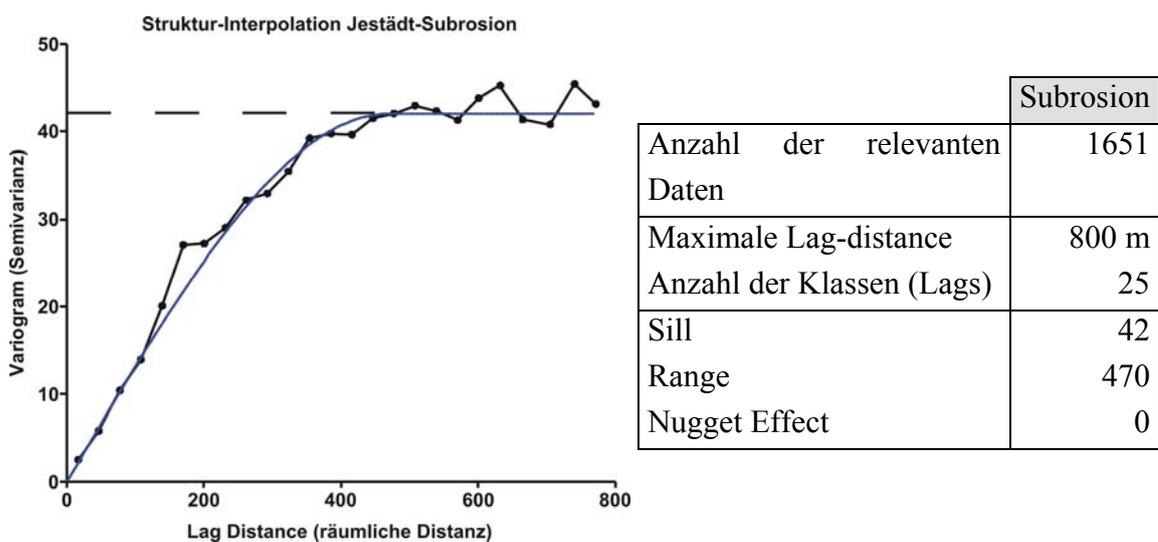


Abb. 2.11: Variogramm für die Generierung der Struktur der Jestädt-Subrosion (Unterkante des Kies-Aquifers) aus den Stützpunkten mit den zugehörigen Parametern in nebenstehender Tabelle.

Für die Interpolation auf ein 100 m-Raster wurden insgesamt 1405 exportierte, digitalisierte Punkte genutzt (Abb. 2.10). Zunächst wurde eine Triangulation als Interpolationsverfahren verwendet, um mit den so zusätzlich generierten Punkten die Trendextrapolation des Kriging im zweiten Interpolationsschritt zu reduzieren. Nach dem Kriging im Programm Surfer® und dem Rückimport nach GSI3D® wurde das 10 m-Raster als Input für die interne Triangulation genutzt, wobei aufgrund der Datendichte keine Änderung des Datensatzes durch die Neuinterpolation entstand.

2.5. Beschreibung des geologischen Modells von Eschwege

Das erstellte geologische 3D-Modell des Untersuchungsgebietes von Eschwege umfasst eine Fläche von etwa 120 km², in die insgesamt 95 abgeteufte und etwa 100 weitere, virtuelle Bohrungen integriert wurden. Dies entspricht im Gesamtgebiet einer Bohrdichte von einer realen Bohrung pro 1,3 km².

Das geologische Modell weist eine Ost-West-Erstreckung von 10,5 km auf (Rechtswert von 3570000 bis 3580500) und erreicht eine Nord-Süd-Erstreckung von 12 km (Hochwert von 5668500 bis 5680500). Das Modell wurde in einer 20 x 20 m Auflösung erstellt. In das Gesamtmodell wurden folgende, geologische Einheiten integriert (Tab. 2.5).

Tab. 2.5: Geologische Einheiten des 3D-Strukturmodells und deren Umsetzung in das hydrogeologische Modell.

Geologische Einheit	Hydrogeologische Einheit
Abschwemmmassen	1
Auenlehm	1
quartärer Kies-Aquifer	2
Basaltvorkommen Blaue Kuppe	-
Muschelkalk	3
Oberer Buntsandstein	4
Mittlerer Buntsandstein	5
Unterer Buntsandstein	5
Zechstein	6

Die modellierten Einheiten des geologischen Modells wurden für das hydrogeologische Modell teilweise zusammengefasst (Tab. 2.5). Hydrogeologisch ähnliche Einheiten, wie z.B. die Abschwemmmassen und der Auenlehm wurden zu einer hydrogeologischen Einheit verbunden. Zudem wurden der Mittlere und der Untere Buntsandstein für das hydrogeologische Modell zusammengefasst.

Das erstellte 3D-Modell ist in den folgenden Abbildungen (Abb. 2.13 und Abb. 2.12) dargestellt. Insbesondere durch die Darstellung mit Hilfe der Explosionsgrafik in Abb. 2.12 kann der 3-dimensionale Aufbau des geologischen Modells sehr gut nachvollzogen werden.

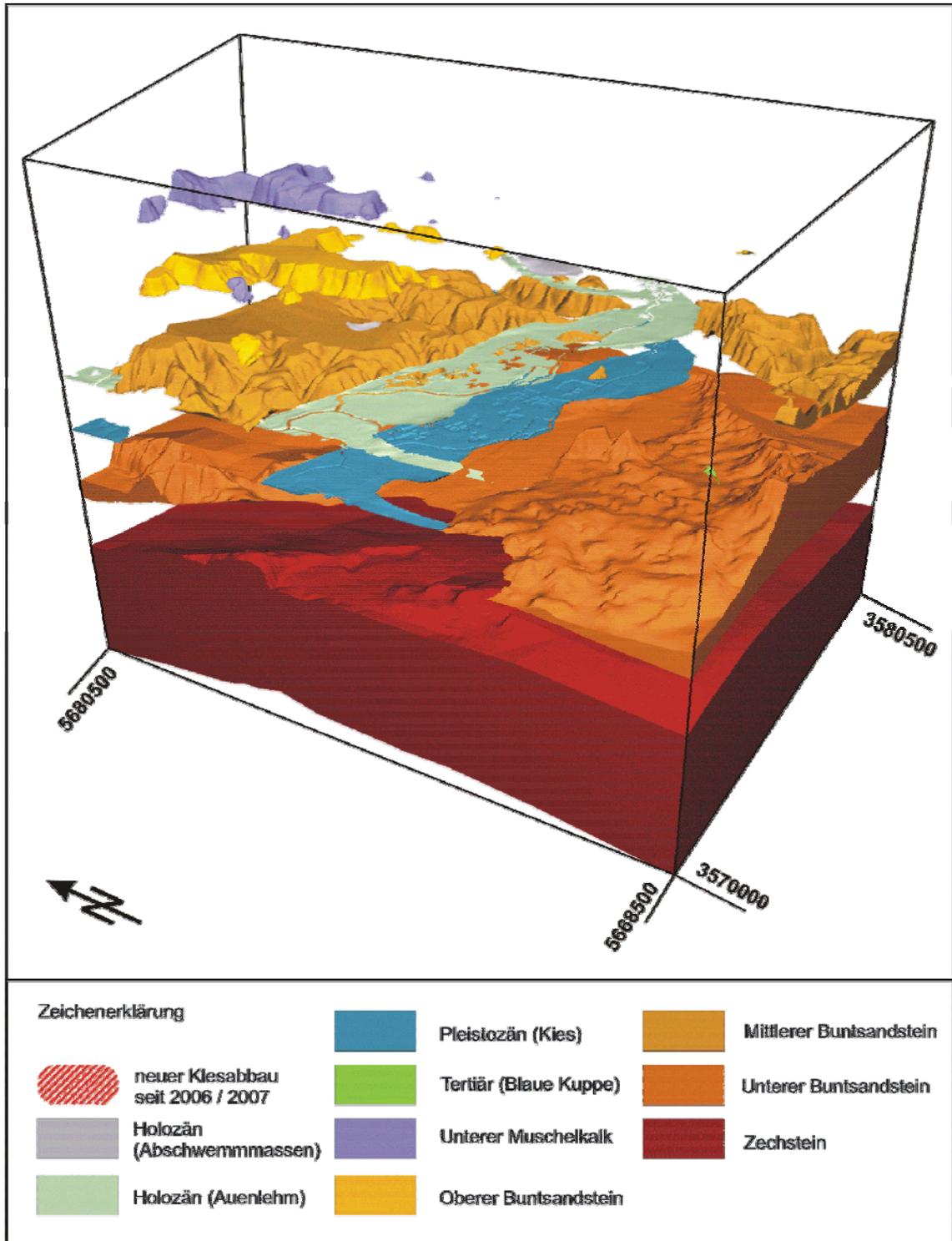


Abb. 2.12: Explosionsgrafik des Talraums bei Eschwege mit allen modellierten Einheiten (5-fach überhöht).

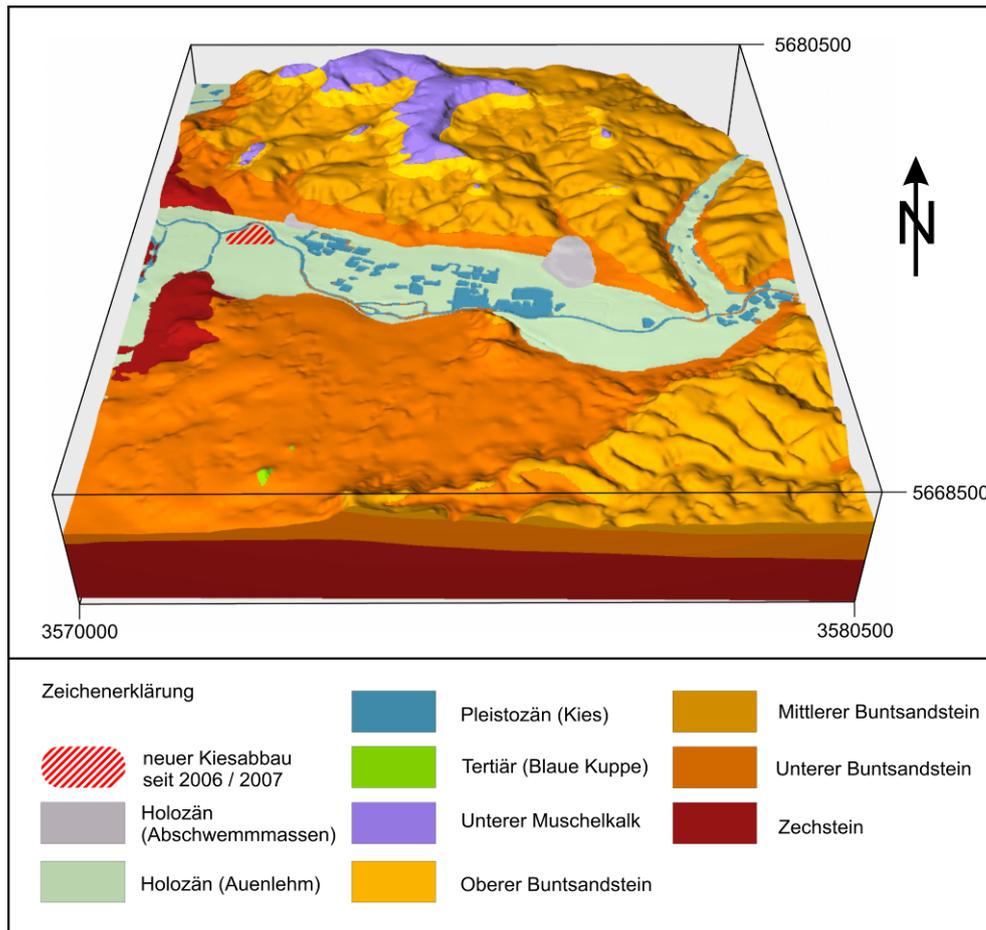


Abb. 2.13: Darstellung des geologischen Modell des Talraums bei Eschwege mit allen modellierten Einheiten (2-fach überhöht).

2.5.1. Quartäre Abschwemmassen und Auenlehm

Die jüngsten, modellierten Schichten stellen die quartären Abschwemmassen des Kellaer Baches und des Mühlbaches dar, die sich im Übergang zur Talaue durch eine deutliche, positive Morphologie auszeichnen. Die Notwendigkeit der Modellierung dieser geologischen Einheit ergab sich durch die durchschnittliche Mächtigkeit von etwa fünf Meter des Schwemmfächers des Kellaer Baches. Bei einer Nichtimplementierung hätten diese Ablagerungen, hydraulisch betrachtet, in den Auenlehm integriert werden müssen. Für die optimierte Visualisierung des Gesamtmodells wurde aber eine separate Modellierung der Abschwemmassen vorgezogen.

Sowohl von der oberflächlichen Verbreitung als auch bezüglich des Volumens stellen die Abschwemmassen nach den Basalten der Blauen Kuppe die kleinsten, modellierten Einheiten dar. Aufgrund der geringen Verbreitung dieser Einheit und der damit einhergehenden geringeren Beanspruchung der Modellierungssoftware GSI3D® konnte diese in einem 10 x 10 m-Raster modelliert werden.

Die Fläche des Schwemmfächers des Kellaer Baches umfasst 98 ha bei einem modellierten Gesamtvolumen von 4,5 Mio. m³. Damit weist er etwa die 25-fache Fläche des Schwemmfächers des Mühlbaches auf. Dieser bedeckt eine Fläche von etwa vier Hektar, bei einem modellierten Volumen von knapp 0,2 Mio. m³. Bei dieser Ablagerung handelt es sich um Sedimente des Kellaer Baches, welche in der Talaue nach der Ablagerung des Auenlehms sedimentiert wurden.

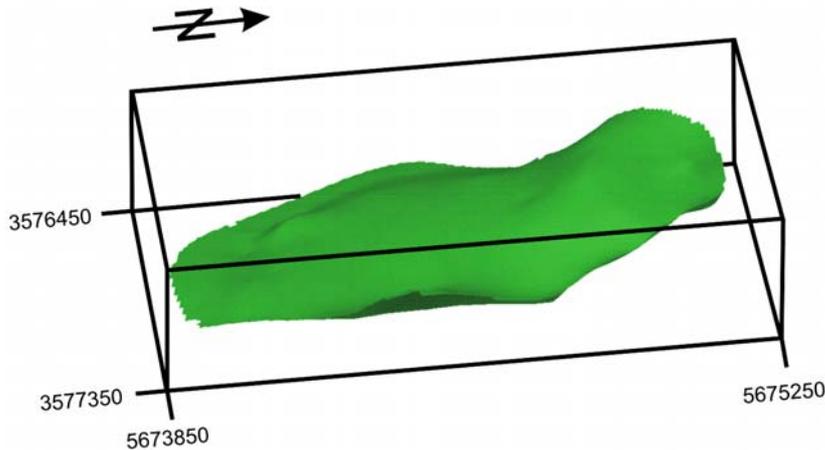


Abb. 2.14: Schwemmfächer des Kellaer Baches (Blickrichtung West, 10-fach überhöht).

Die Auenlehme im Untersuchungsgebiet weisen eine Mächtigkeit zwischen einem und fünf Metern auf und sind auf einer Fläche von 19,3 km² verbreitet. Dies entspricht etwa 16 % der geologisch modellierten Gesamtfläche. Das Volumen des Auenlehms beläuft sich auf 34,4 Mio. m³, bei einer errechneten, durchschnittlichen Mächtigkeit von 1,78 m.

2.5.2. Quartärer Kies-Aquifer

Die quartären Kiese des Talraums stellen unter Lagerstättengesichtspunkten die wichtigste Einheit des Talraums bei Eschwege dar. Durch den Abbau der Lagerstätte im zentralen Bereich ist der Talraum deutlich anthropogen beeinflusst. Insbesondere der aktuell noch aktive Abbau am Werratalsee führte zu einer starken Veränderung des hydraulischen Systems des Talraums. Vor Beginn der Kiesgewinnung existierten nur etwa drei Hektar offene, stehende Wasserflächen im Untersuchungsgebiet (vgl. HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT, 1957, HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT, 1958). Im Vergleich zur Abb. 2.15 wurde der Werratalsee nach Westen erweitert und im Bereich der größten Kiesmächtigkeiten (bei den Koordinaten RW: 3571500 – HW: 5675500) wurde seit 2006 eine neue Fläche zur Kiesgewinnung vorbereitet (vgl. Abb. 2.13).

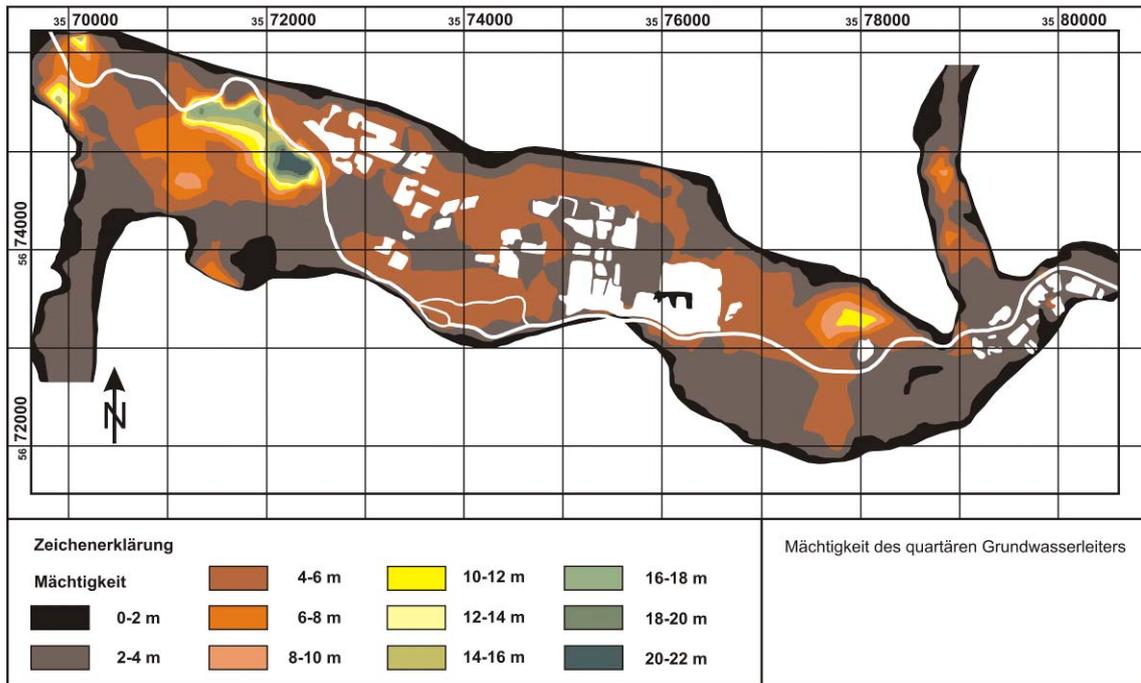


Abb. 2.15: Mächtigkeit des quartären Grundwasserleiters der Talau Eschwege, interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.

Die Kiesablagerungen sind im modellierten Gebiet auf einer Fläche von 21,1 km² verbreitet und weisen ein Gesamtvolumen von 85,9 Mio. m³ auf. Dies entspricht einer durchschnittlichen Mächtigkeit von 4,1 m (Abb. 2.15). Die größten Mächtigkeiten werden dabei mit über 20 m in der Jestädt-Subrosion im westlichen Bereich des Talraums bei Eschwege erreicht. Die Jestädt-Subrosion weist eine Ost-West-Erstreckung von 1,3 km und eine Nord-Süd-Erstreckung zwischen 300 und 500 m auf (Abb. 2.16 und Abb. 2.17).

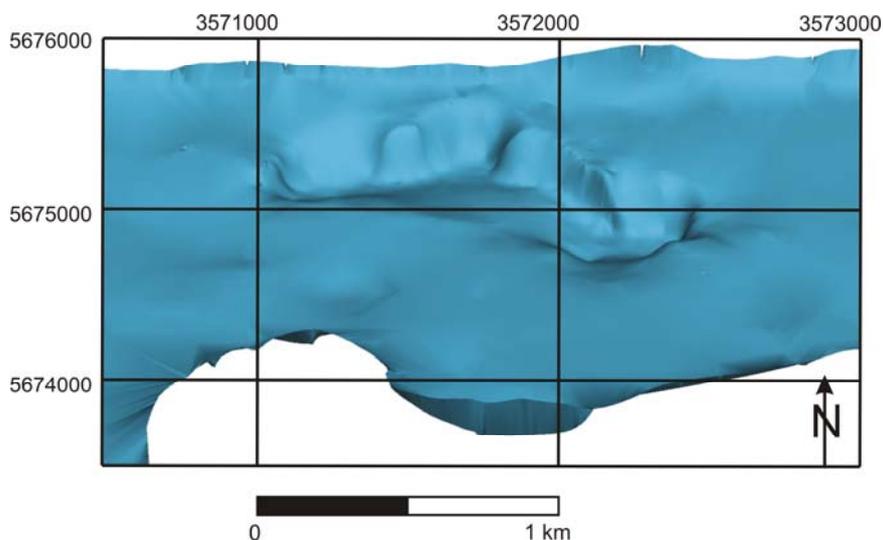


Abb. 2.16: Quartärbasis im Bereich der Jestädt-Subrosion (Blickrichtung Nord, 10-fach überhöht).

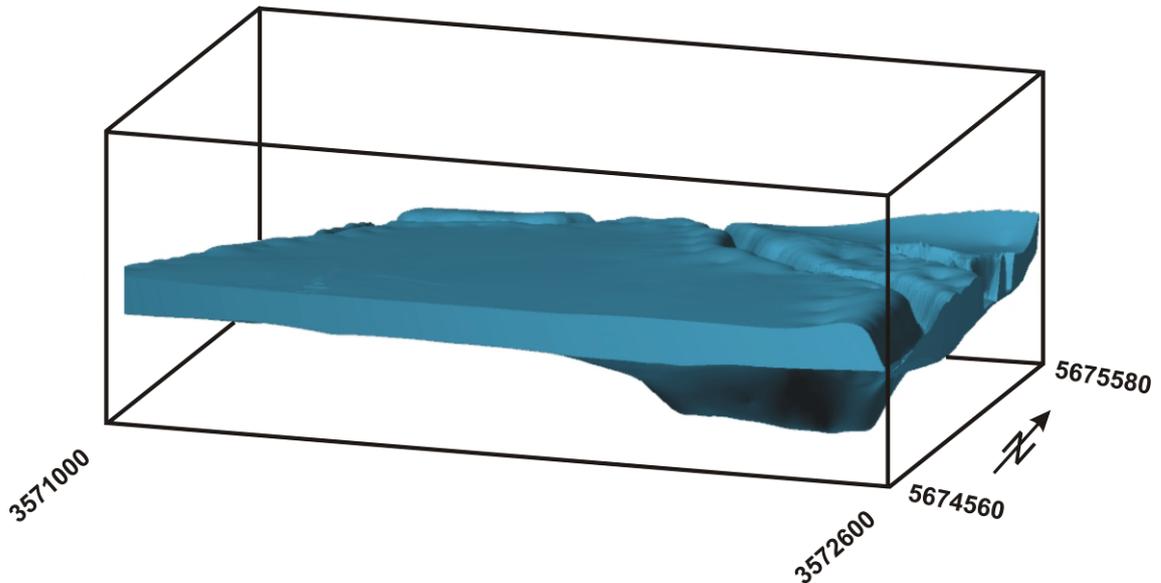


Abb. 2.17: Quartäre Ablagerungen (Auenlehm und Kies, farblich nicht differenziert) mit der hohen Kiesmächtigkeit im Bereich der Jestädt-Subrosion (Blickrichtung Nordnordwest, 10-fach überhöht).

Die Jestädt-Subrosion umfasst eine Fläche von knapp 700.000 m² und weist ein Volumen von etwa 9,87 Mill. m³ auf. Dieses Volumen entspricht 11,5 % des gesamten, modellierten Kiesvorrates im Untersuchungsgebiet. Für diese Berechnungen wurde der Bereich der Jestädt-Subrosion herangezogen, welcher eine Mächtigkeit von größer als acht Meter aufweist. Dieser Wert entspricht der doppelten, mittleren Mächtigkeit der Kiesablagerungen.

2.5.3. Tertiäre Basalte

Die Modellierung des Basaltvorkommens Blaue Kuppe und Kleine Kuppe erfolgte in einer 5 x 5 m Auflösung. Die Hohlform des Steinbruches blieb im DGM und somit auch im erstellten Modell unberücksichtigt. Für die hydraulische Modellierung wurden die Blaue und die Kleine Kuppe als nicht relevant betrachtet. Die Basaltvorkommen erstrecken sich über eine Fläche von 53.000 m² (fünf Hektar), bei einem modellierten Gesamtvolumen von etwa 450.000 m³.

Untersuchungen zur Lage der Förderkanäle der Blauen und Kleinen Kuppe wurden bislang nicht durchgeführt. Der dargestellte Förderschlot wurde postuliert und etwa in die Mitte des Vorkommens modelliert. Die laterale Begrenzung der Basaltverbreitung wurde aus den Darstellungen von JACOBSHAGEN ET AL. (1993) entnommen (Abb. 2.18).

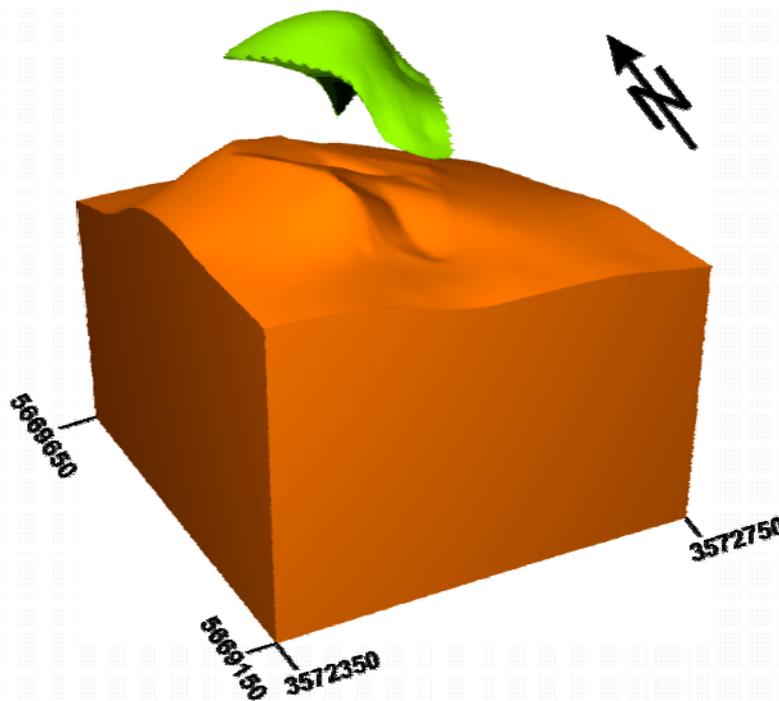


Abb. 2.18: Basaltvorkommen Blaue Kuppe mit umgebenden Buntsandstein (2-fach überhöht).

2.5.4. Unterer Muschelkalk

Der Untere Muschelkalk stellt die morphologisch oberste, modellierte Einheit dar. Nördlich des Modellgebietes sind stratigraphisch jüngere Schichten des Muschelkalks und des Keupers aufgeschlossen (Abb. 2.19 und Abb. 2.20).

Die Modellierung der Muschelkalkverbreitung beruht zu einem großen Teil auf der geologischen Karte von JACOBSHAGEN ET AL. (1993). Durch die Integration des Verbreitungspolygons und das Fehlen von strukturbildenden Elementen, wie Störungen, war die Unterkante der Muschelkalkablagerungen ausreichend definiert. Der Schichtverlauf zwischen Buntsandstein und Muschelkalk wurde als eben verlaufend interpretiert und in das Modell integriert. Die Grenze Muschelkalk-Buntsandstein war in keiner der verfügbaren Bohrungen dokumentiert. Die modellierte Maximalmächtigkeit beträgt 120,07 m bei den Koordinaten RW: 3572500 – HW: 5679960.

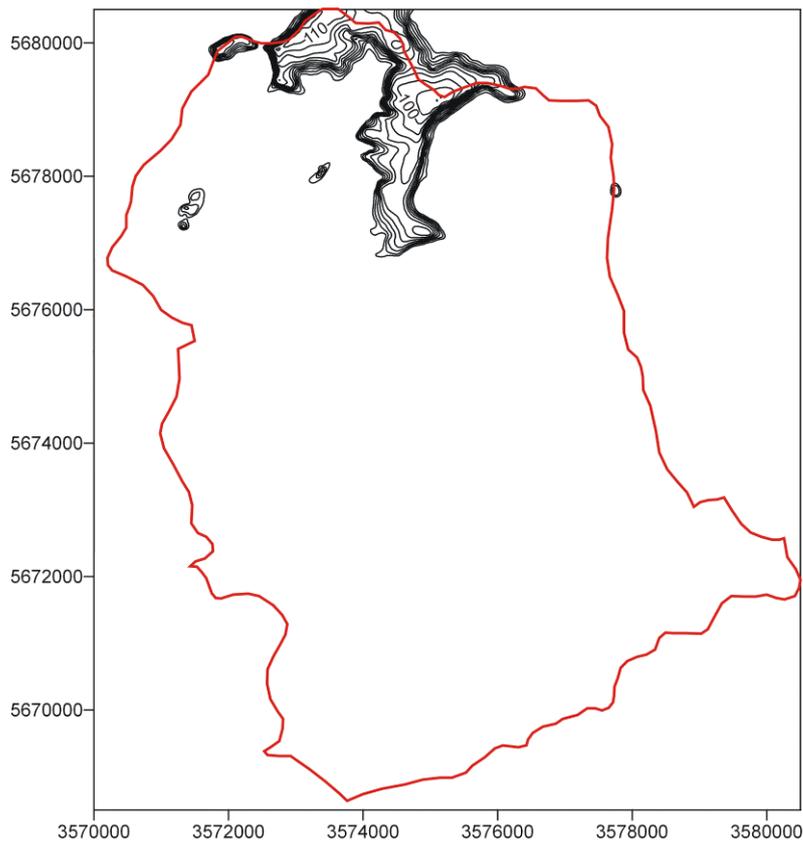


Abb. 2.19: Mächtigkeit der Schichten des Muschelkalkes im Untersuchungsgebiet, modelliert und interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.

Die Schichten des Unteren Muschelkalkes bedecken eine Fläche von 5,97 km² des Modellgebietes. Dies entspricht einem modellierten Volumen von 347.744.272 m³ bzw. 0,35 km³.

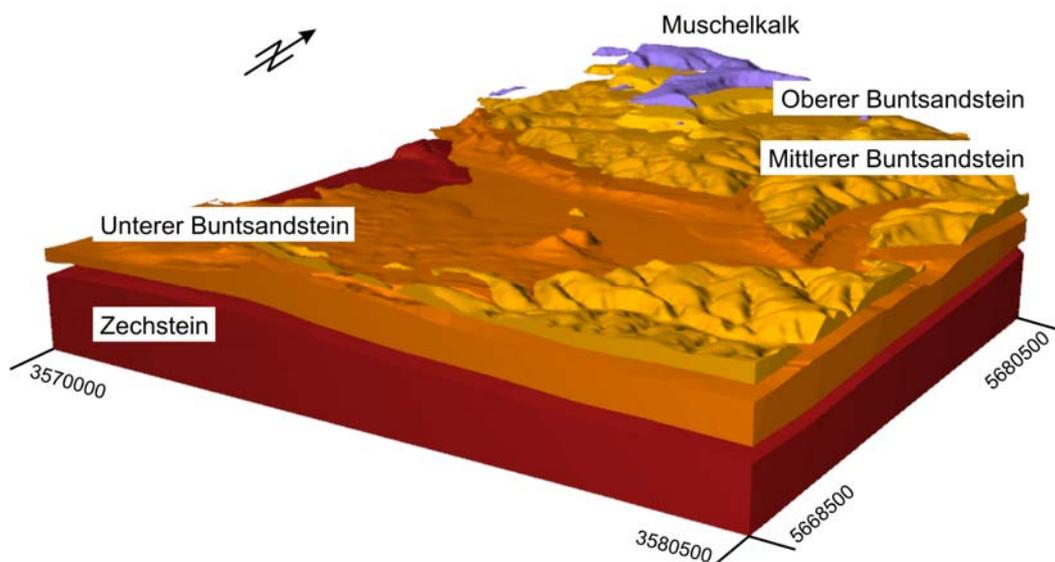


Abb. 2.20: Abgedecktes geologisches Modell von Eschwege – Räumliche Anordnung der Einheiten Muschelkalk, Buntsandstein und Zechstein im Modellgebiet (2-fach überhöht).

2.5.5. Buntsandstein

Die geologischen Formationen des Buntsandsteins stellen volumenmäßig den zweitgrößten Teil des Modellgebietes dar. Dabei wurden die Einheiten Oberer, Mittlerer und Unterer Buntsandstein geologisch getrennt modelliert. Für die anschließende, hydrogeologische Modellierung wurden der Mittlere und Untere Buntsandstein zu einer Einheit zusammengefasst.

Die Schichten des Oberen Buntsandsteins nehmen 12,6 km² der Gesamtfläche des geologischen Modells ein. Bei einer errechneten, durchschnittlichen Mächtigkeit von 50,1 m entspricht dies einem modellierten Volumen von 630.092.213 m³ bzw. 0,63 km³. Die Verbreitung dieser Schichten ist nahezu ausschließlich auf den Nordteil des Untersuchungsgebietes beschränkt (siehe Abb. 2.20 und Abb. 2.21).

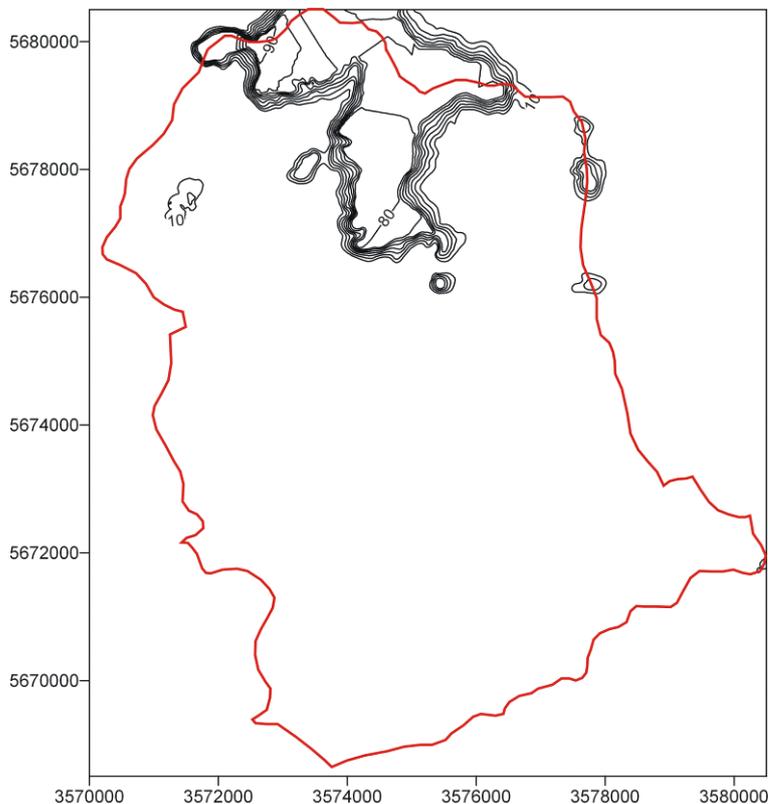


Abb. 2.21: Mächtigkeit des Oberen Buntsandsteins im Untersuchungsgebiet, modelliert und interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.

Die Gesteine des Mittleren Buntsandsteins streichen auf einer Fläche von 48,1 km² an der Geländeoberkante aus, bei einer Gesamtverbreitung im Modellgebiet von 60,7 km². Das modellierte Gesamtvolumen beträgt 5,3 km³. Die Schichten des Unterer Buntsandsteins nehmen eine Fläche von 118 km², wobei der Untere Buntsandstein ein Volumen von 18,7 km³ umfasst (siehe Tab. 2.6).

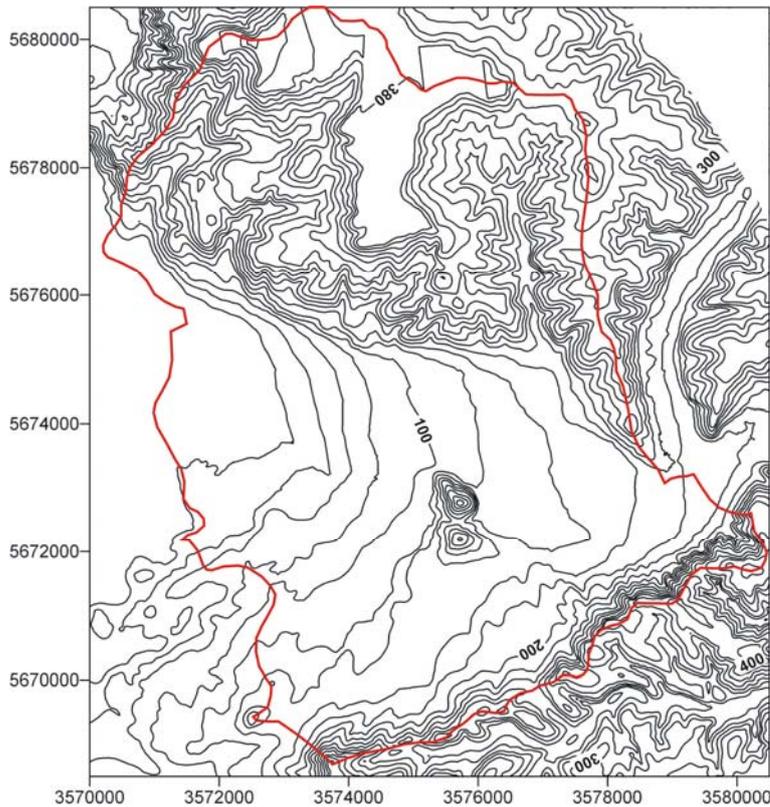


Abb. 2.22: Mächtigkeit des Buntsandsteins im Untersuchungsgebiet, modelliert und interpoliert auf Basis der verfügbaren Bohrinformationen.

2.5.6. Zechstein

Die Gesteine des Zechsteins bilden die Basis des geologischen Modells von Eschwege. Für die Zechstein-Unterkante waren keine Bohrinformationen vorhanden. Die Modellierung erfolgte durch Integration einer Pauschalmächtigkeit von 500 m. Die Oberflächenmorphologie des Zechsteins konnte nur im westlichen Bereich des Untersuchungsgebietes im Kontakt zum überliegenden Kies-Aquifer basierend auf Bohrungen detailliert modelliert werden.

Tab. 2.6: Quantifizierung der Buntsandstein- und Zechstein-Verbreitung im Modellgebiet.

	Oberer Buntsandstein	Mittlerer Buntsandstein	Unterer Buntsandstein	Zechstein
Fläche [km ²]	12,6	60,7	118,0	126,0
Volumen [km ³]	0,6	5,3	18,7	60,8

Die Einheiten des Zechsteins sind im gesamten Untersuchungsgebiet zumindest im Untergrund verbreitet (126 km²). Aufgrund der integrierten Pauschalmächtigkeit ergab sich ein modelliertes Volumen von 60,8 km³ (siehe Tab. 2.6).

2.6. *Bewertung der genutzten Verfahren und Methoden*

Im Rahmen der geologischen Modellerstellung wurden verschiedene Verfahren und Methoden getestet bzw. verwendet. Hauptsächlich wurden bislang die verwendeten Verfahren zur geologischen Modellierung beschrieben. Insbesondere die folgenden drei Punkte stellen wichtige Aspekte der durchgeführten, geologischen Modellierung dar:

- Digitales Geländemodell (DGM),
- interaktive Profilschnitte (geologische Modellierung) und
- Surfer®-Kopplung an GSI3D® (Kriging, Variogramm).

Die Erstellung des Digitalen Geländemodells durch Digitalisierung von Höhenlinien und Höhenpunkten im GIS erbrachte sehr gute Ergebnisse. Durch die Digitalisierung von über 100.000 Punkten konnte ein Digitales Geländemodell mit einer Rasterweite von 10 m generiert werden. Im Vergleich dazu weisen die zunächst in Betracht gezogenen, frei verfügbaren SRTM-Daten (Version 4) im Modellgebiet eine Auflösung von drei Bogensekunden (entspricht etwa 90 m) auf. Der vertikale Fehler wird mit kleiner als 16 m angegeben (REUTER ET AL. 2007). Diese Genauigkeit reichte für eine hoch auflösende, geologische und hydrogeologische Modellierung nicht aus. Daher wurde auf Basis von georeferenzierten Topographischen Karten das Digitale Geländemodell von Eschwege erstellt (Abb. 2.6).

Im Rahmen der geologischen Modellierung wurden interaktive Modellierungstechniken angewandt. Die Vorteile, die diese Techniken bieten, überwiegen mögliche Nachteile, die in Kapitel 2.2 beschrieben sind. Durch die zusätzlich zu den Bohrinformationen integrierten Stützstellen (digitalisierte Profilschnitte) wurde eine optimierte Abbildung der Geometrie der geologischen Strukturen erreicht. Durch diese zusätzlichen Stützstellen wird der Einfluss des Interpolationsverfahrens auf das Interpolationsergebnis reduziert. Im Vergleich dazu, dominiert das Interpolationsverfahren in Modellierungswerkzeugen wie MVS® und Rockworks® das Interpolationsergebnis maßgeblich. Die Integration von Zusatzinformationen in diese Modellierungswerkzeuge ist nur mit deutlich erhöhtem, zusätzlichem Modellierungsaufwand möglich, da diese Adaption von interaktiven Modellierungstechniken in diese Werkzeuge von Programmierseite nicht vorgesehen ist.

Eine weitere, wichtige Methode im Rahmen der Modellierung des Modellgebietes war die Kopplung des Interpolationswerkzeuges Surfer® an GSI3D®. Die ungekoppelte, stützpunktbezogene Interpolation der Schichtflächen mittels Triangulation weist bei der Modellierung komplexer Strukturen neben ihren Vorteilen auch Nachteile auf. Als wichtigster Nachteil ist die Ausbildung von unnatürlichen bzw. eckigen Strukturen durch die Triangulation zu nennen. Durch die Integration der Interpolationsmethode

Kriging (mittels Surfer®) konnten plausiblere und optisch verbesserte, quartäre Strukturen modelliert werden (siehe Kapitel 2.4).

Um das geologische Strukturmodell in ein hydrogeologisches Modell zu überführen, wurde zunächst ein Standardexport aus dem Modellierungswerkzeug GSI3D® genutzt. Das erzeugte Datenformat wurde hinsichtlich der Anforderung der hydrogeologischen Modellierung mit FEFLOW® umformatiert. Insbesondere das Nicht-Auskeilen der Schichten mit einer Mindestmächtigkeit von 30 cm und die Dreiteilung der hydrogeologischen Schichten in FEFLOW® waren von großer Bedeutung und wurden mit einem C++-Skript umgesetzt. Mit Hilfe dieses selbst programmierten Tools ist es nun möglich, die GSI3D®-Strukturdaten in ein FEFLOW®-kompatibles Datenformat zu überführen. Diese Datenformatierungsschritte sind in Kapitel 3.5 beschrieben.

Des Weiteren weist ein erstelltes, geologisches Modell verschiedene Möglichkeiten der Auswertung auf. In der vorliegenden Arbeit wird dabei vor allem auf die Nutzung hinsichtlich der hydrogeologischen Modellierung eingegangen. Aus einem modellierten, geologischen Modell können die 3D-Informationen beliebig extrahiert werden, bspw. sind auch Schnitte parallel zur GOK möglich und somit sind Prognosen über die dort anstehenden Gesteine und deren Eigenschaften (Abb. 2.23) einfach generierbar.

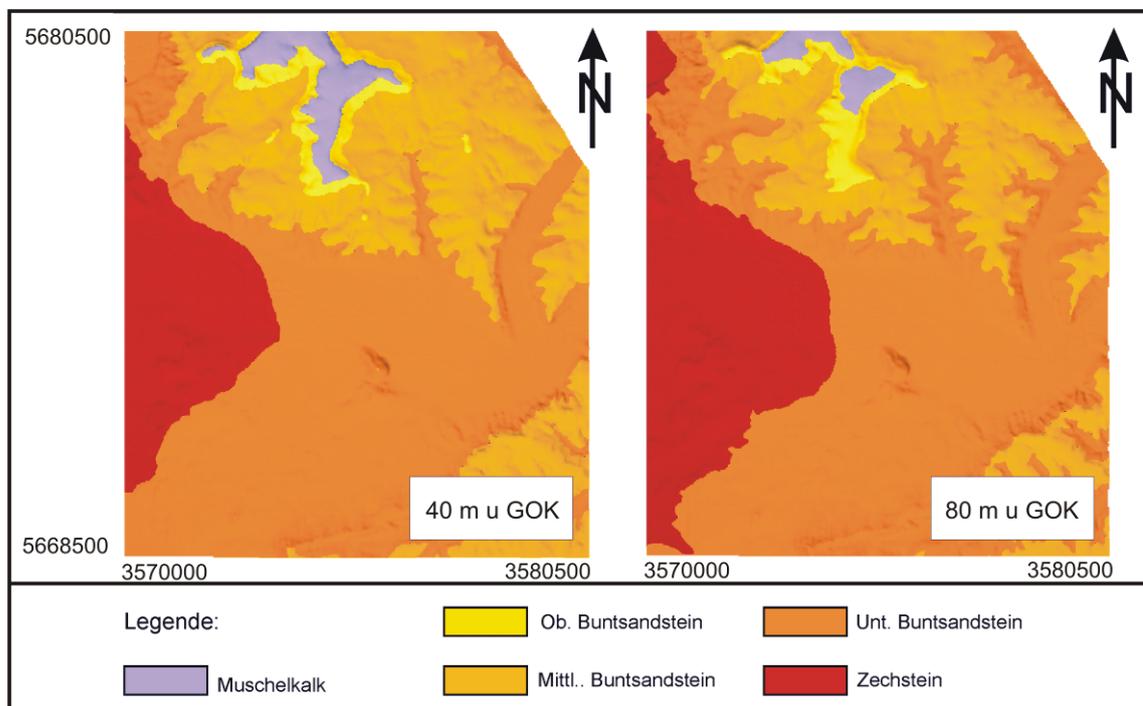


Abb. 2.23: Extrahierte Schnitte aus dem Modell parallel zur GOK (links: 40 m unterhalb der GOK, rechts: 80 m unterhalb der GOK).

3. Ermittlung hydrogeologischer Parameter

Um ein geologisches Strukturmodell in ein hydrogeologisches Modell zu überführen, müssen zunächst die hydrogeologischen Modellparameter und die Randbedingungen definiert werden. Hierbei sind vor allem die vier folgenden Punkte zu nennen:

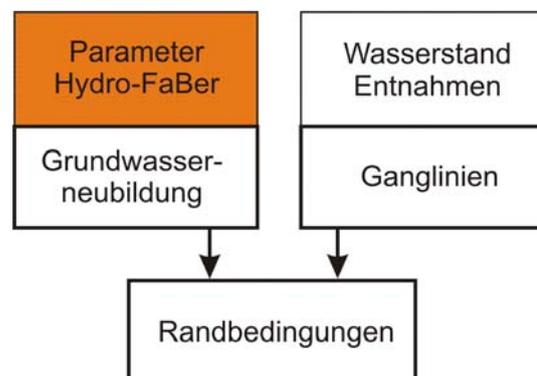
- Editierung der geologischen Strukturen als Vorstufe der hydrogeologischen Modellgeometrie (Dreiteilung der Schichten),
- Grundwasserneubildung,
- hydraulische Durchlässigkeiten und
- Ganglinien von Wasserentnahmen und Wasserständen.

Im Folgenden werden verschiedene Methoden betrachtet, um die nötigen Informationen für die hydrogeologische Modellierung zu generieren. Die Festgesteinproblematik hinsichtlich des Grundwasserflurabstandes wird dabei vor allem bei der Entwicklung des Verfahrens Hydro-FaBer in Kapitel 3.1 aufgegriffen. Des Weiteren werden im Anschluss daran weitere Verfahren für die Generierung der notwendigen Parameter für die hydrogeologische Modellierung dargestellt.

3.1. Mittlerer Grundwasserflurabstand in Festgesteinsbereichen (Hydro-FaBer)

Im Rahmen verschiedener Verfahren zur Berechnung der Grundwasserneubildung (z.B. TUB-BGR-Verfahren, WESSOLEK ET AL. 2004), der Sickerwasserprognose und der Berechnung der Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung nach HÖLTING ET AL. (1995), den AVI-Index (VAN STEMPVOORT ET AL. 1992) oder für das DRASTIC-Verfahren (ALLER ET AL. 1985,

ALLER ET AL. 1987) ist die Abschätzung des Grundwasserflurabstandes ein wichtiger Parameter, da durch diesen der kapillare Aufstieg aus dem Grundwasser in die Zone des pflanzenverfügbaren Wassers gesteuert wird. Bei einem Grundwasserflurabstand von weniger als zwei Metern wird postuliert, dass der wassergesättigten Zone durch die Pflanzenwurzeln Wasser entzogen werden kann (grundwasserbeeinflusste Standorte). Bei grundwasserfernen Standorten (Grundwasserflurabstand größer als zwei Meter) ist der kapillare Aufstieg aus dem Grundwasser $v_{\text{kap}}=0$ mm (AD-HOC-AG BODEN 2000, WESSOLEK ET AL. 2004).



Für die Berechnung des Grundwasserflurabstandes in Lockergesteinsbereichen werden der Grundwasserstand [mNN], die Höhenlage der GOK [mNN] und ggf. die Lage der darüber liegenden, stauenden Schichten benötigt. Diese drei Parameter können im Lockergestein geostatistisch interpoliert und anschließend miteinander verrechnet werden (SUN ET AL. 2009). Im Festgestein ist es nicht möglich, den für die Grundwasserneubildung benötigten Eingangparameter des Grundwasserflurabstandes auf diese Weise zu ermitteln.

Die Abschätzung des Flurabstandes im Festgestein ist ohne hydrogeologische Modellierung problematisch. In der vorliegenden Arbeit wurden die Informationen des Grundwasserflurabstandes, der nutzbaren Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes, der Landnutzung, einem Niederschlagskorrekturfaktor und der Hangneigung zu Hydrotopen zusammengefasst. Insbesondere in der methodischen Ableitung von einfachen Verfahren zur Abschätzung des Grundwasserflurabstandes in den Bereichen mit Festgesteinen besteht in der Hydrogeologie eine wissenschaftliche Lücke. Bei Modellierungs-Fragestellungen kann der Input-Parameter des Grundwasserflurabstandes oder des Grundwasserstandes z.T. nicht vorab modelliert werden und muss auf einfache Weise abgeschätzt werden.

In bisherigen Ansätzen für die Generierung des Flurabstandes wurden bspw. im Rahmen der Hydrogeologischen Erkundung (HGE)-Enztal-Pforzheim vom LGRB Freiburg im gesamten Verbreitungsbereich einer den Grundwasserleiter überdeckenden Gesteinseinheit deren halbe Gesamtmächtigkeit zugrunde gelegt (ARMBRUSTER ET AL. 2004). Im Ausstrichbereich der Grundwasserleiter wurden aufgrund zu geringer Datendichte zur Bestimmung der Grundwasserüberdeckung (unter dem Boden) pauschale, als konstant angenommene Werte postuliert.

Im Bereich des Ausstriches des Oberen Muschelkalkes bspw. wurde eine Grundwasserüberdeckung von 20 m flächendeckend festgelegt, hingegen im Ausstrich des Unteren und Mittleren Buntsandsteins wurden 40 m als Mächtigkeit der Grundwasserüberdeckung definiert. Bei der Anwendung dieses Verfahrens auf der Untersuchungsgebiet Eschwege ergab sich ein unbefriedigendes Ergebnis, welches in Abb. 3.1 dargestellt ist. Insbesondere die pauschalisierten Grundwasserflurabstände im Festgesteinsbereich führen zu einer stark limitierten und realitätsfremden Darstellung. Ein Vorteil dieses Verfahrens ist hingegen die einfache Umsetzbarkeit, welche jeweils gegen die erzielbaren Ergebnisse abgewogen werden müssen.

LEPPIG (2004) kombiniert für die Generierung des Grundwasserflurabstandes nicht-modellierte DGM-Ableitungen mit modellierenden Methoden. Der Grundansatz des Verfahrens entspricht dabei dem des in der vorliegenden Arbeit entwickelten HydroFaBer-Verfahrens. Von der Höhenlage der Vorflut ausgehend generiert LEPPIG (2004)

allerdings zunächst eine Triangulation zwischen den Vorflutern und definiert diese als eine Basisfläche, die die unterste, mögliche Grundwasseroberfläche darstellt. Die Grundwasserhöhe wird anschließend auf dieser Basis modellierend mit Hilfe der Durchlässigkeiten der realen Geologie ermittelt.

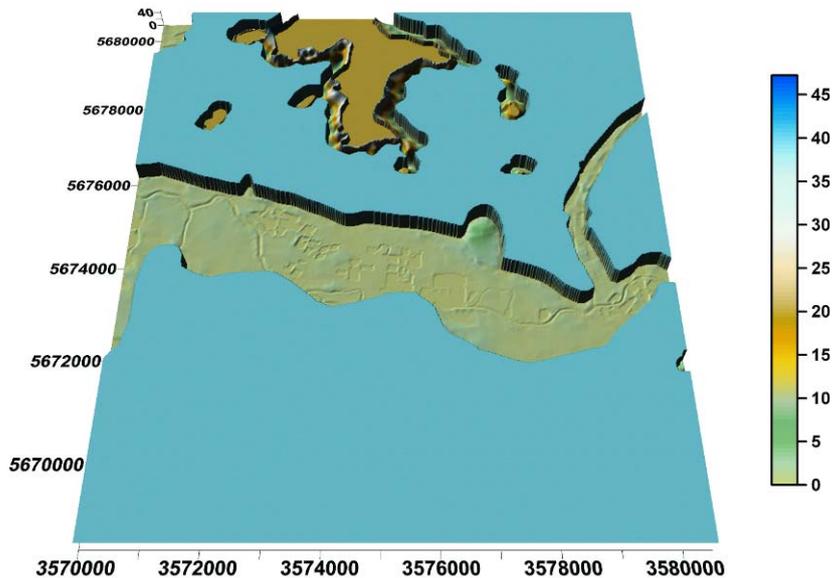


Abb. 3.1: Berechnete Flurabstandskarte für das Untersuchungsgebiet nach dem Ansatz von ARMBRUSTER ET AL. (2004) mit deutlich erkennbar unplausiblen Ergebnissen.

Ebenso werden aktuell auf der Gebietstopographie basierende Verfahren entwickelt, die die Hydraulik, die Hydrochemie (TANAKA & SUZUKI 2009, FUJIMAKI ET AL. 2008, TETZLAFF ET AL. 2009, PRICE 2011, ELMAHDY & MOHAMED 2012) und Evaporation (LI ET AL. 2008) von Einzugsgebieten beschreiben.

Weitere, in den letzten Jahren entwickelte Methoden, nutzen das Interpolationsverfahren Kriging in Kombination mit einem Digitalen Geländemodell (MARKLUND 2009, HAITJEMA & MITCHELL-BRUKER 2005, DESBARATS ET AL. 2002), um basierend vom Geländemodell die Grundwasseroberfläche zu berechnen. DESBARATS ET AL. (2002) beschreiben eine einfache und robuste Methode, mit Kriging die Grundwasseroberfläche aus Geländedaten zu berechnen. Dabei wird das KED („kriging with external drift“) als Interpolationsmethode genutzt. Diese Methode ist allerdings nur für Gebiete nutzbar, bei denen die Grundwasseroberfläche hauptsächlich durch die Geländemorphologie bestimmt wird. HAITJEMA & MITCHELL-BRUKER (2005) führen ein Berechnungsverfahren an, mit welchem berechnet werden kann, ob die Grundwasseroberfläche von der Topographie oder von der Grundwasserneubildung bestimmt wird. Für das Untersuchungsgebiet bei Eschwege ergaben sich für die Festgesteinsbereiche Werte, welche eine Beeinflussung der Grundwasseroberfläche sowohl von der Geländemorphologie als auch von der Grundwasserneubildung

indizierten. Für solche Gebiete ist das Verfahren von DESBARATS ET AL. (2002) nicht nutzbar.

Die beschriebene, methodische Lücke für Berechnung des Grundwasserflurabstandes in Festgesteinsgebieten soll durch das Verfahren Hydro-FaBer geschlossen werden. Für das in der vorliegenden Arbeit neu entwickelte Verfahren Hydro-FaBer (Hydrographisches Flurabstands-Berechnungs-Verfahren) sind nur ein Digitales Geländemodell (DGM) und der topographische Verlauf der Vorflut als Primärintput notwendig. Weitere Informationen, wie z.B. die aus den DGM abgeleitete Hangneigung (DGM-Neigung), die Neigung des DGM im Bachbett (Bach-Gradient, $-\beta$) und die Fließrichtung der Vorflut (Bach-Richtung, α) können aus dem Primärintput erzeugt werden. Aus diesen Informationen wird zunächst die Grundwasseroberfläche berechnet, welche anschließend mit dem DGM zum Grundwasserflurabstand verrechnet wird.

Für die Abschätzung des mittleren Grundwasserflurabstandes in den Festgesteinsbereichen werden nach dieser Methode verschiedene Voraussetzungen bzw. Postulate definiert:

- (1) Quellen sind als Grundwasseraustritte definiert und können für das Verfahren genutzt werden,
- (2) die Bäche und sonstige Vorfluter sind an das Grundwasser angebunden,
- (3) sie stellen somit Orte mit einem Flurabstand von 0,00 m dar,
- (4) es herrschen effluente Verhältnisse vor (Abb. 3.2),

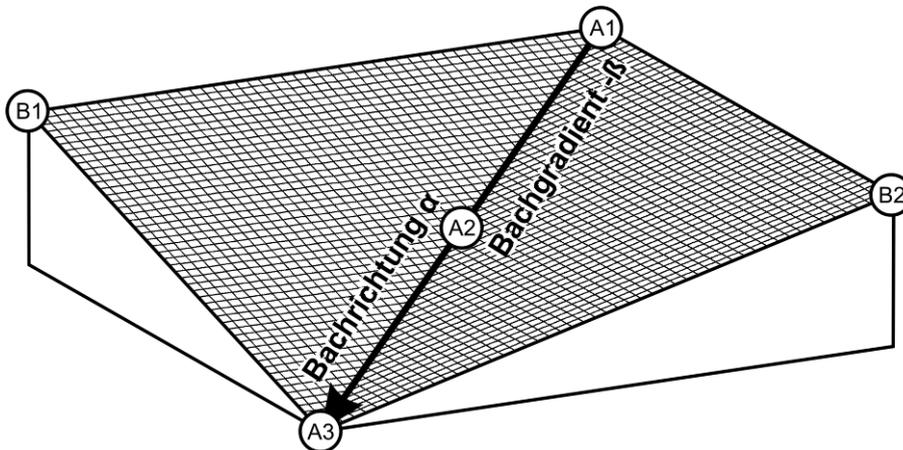


Abb. 3.2: Vereinfachte, schematische Darstellung der Postulate (1) bis (4) des Baches mit angebundener Grundwasseroberfläche und des Bach-Gradienten $-\beta$.

- (5) der Gradient des Bachlaufes ($-\beta$) ist ein Maß für die Neigung der Grundwasseroberfläche in der Umgebung des Baches und
- (6) senkrecht zum Verlauf des Baches weist die Neigung der Grundwasseroberfläche den Wert der DGM-Neigung im Bachbett auf (Abb. 3.3).

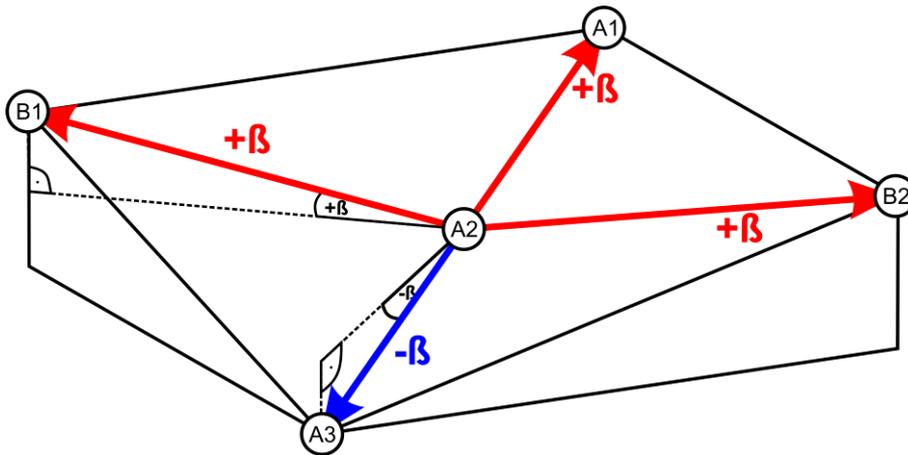


Abb. 3.3: Bachgradient $-\beta$ als Maß für die Neigung der Grundwasseroberfläche in der Umgebung des Baches (Neigung der Grundwasseroberfläche vereinfacht dargestellt).

Grundlagen zur Berechnung der Grundwasserdruckfläche (mNN)

Für die Berechnung der Grundwasserdruckfläche müssen alle benötigten Daten auf das Zielraster des Outputs übertragen werden. Bei der Übertragung des Bachverlaufes auf das DGM-Raster werden diejenigen Rasterpunkte mit der ID=1 versehen (Bachlauf=ja), die einen Maximalabstand von $\frac{1}{2}$ Rastereinheit zum eigentlichen Bachlauf aufwiesen (siehe Abb. 3.8). Dieser Wert wurde gewählt, damit die Bachverlaufs-ID mindestens einer senkrecht zum Bachverlauf angrenzenden Rasterzelle zugewiesen wird, mit der dann anschließend weiter gerechnet werden kann. Den Rasterzellen mit ID=1 werden zudem Informationen über die Bachrichtung und das Bachgefälle zugewiesen.

Senkrecht zur Vorflutrichtung α (im Bsp. Abb. 3.2 und Abb. 3.3 vom Betrachtungspunkt A2 zum Punkt B2 im Festgesteinsbereich) kann mit Hilfe der Höhenlage der Vorflut (h_1) und der DGM-Neigung im Bachbett (slope, $-\beta$) der Grundwasserflurabstand (GWFA) in einem definierten Abstand zur Vorflut berechnet werden (Abb. 3.4), z.B. von A2 nach B1 und von A2 nach B2 in Abb. 3.2 und Abb. 3.3.

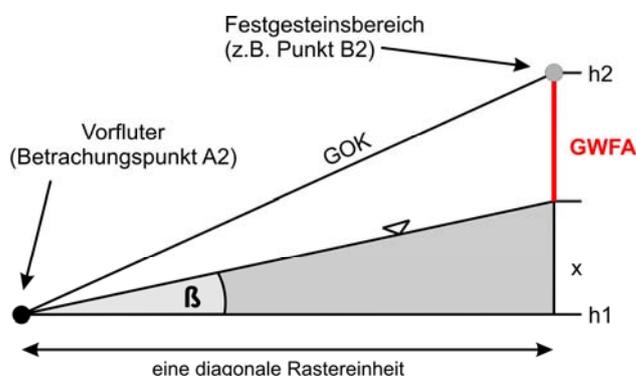


Abb. 3.4: Ermittlung des Grundwasserflurabstandes senkrecht zur Bachrichtung (h_1 =Höhenlage des Bachbettes in mNN, h_2 =Höhenlage des Zielpunktes (DGM) im Festgestein).

$$x = \text{Abstand} \cdot \tan(\beta) \quad (\text{Gl. 3.1})$$

$$\text{Grundwasserflurabstand} = h_2 - h_1 - x \quad (\text{Gl. 3.2})$$

$$\text{Grundwasserflurabstand} = h_2 - h_1 - \text{Abstand} \cdot \tan(\beta) \quad (\text{Gl. 3.3})$$

Mit diesem Ansatz könnten bei einem Bach-Gradienten $-\beta=0$ im GIS mittels Buffering die neuen Höhenlagen bestimmt werden. Dieser Vorgang ist aber nicht für eine, mit unterschiedlichen Höhenlagen und einem Puffer versehene Linie durchführbar. Aus diesem Grund mussten weitere Teilschritte in das Verfahren integriert werden.

Aufgrund der postulierten Gradienten von A2 nach B1, B2 und A1 wird für den zwischen diesen Richtungen liegenden, gesamten oberstromigen Bereich eines Zielpunktes am Bach die Neigung des Bachbettes ($-\beta$) als Neigung der Grundwasseroberfläche (β) angenommen. Im unterstromigen Bereich des Zielpunktes liegt der Wert der Neigung der Grundwasseroberfläche bezüglich der Vorflutrichtung (relative Neigung, β') zwischen $+\beta$ und $-\beta$. Vom Betrachtungspunkt A2 aus existieren auch Richtungen (nach C3 und C4), in denen die relative Neigung der Grundwasseroberfläche 0 Grad beträgt. Diese Konsequenz ergibt sich geometrisch durch die Lage zwischen einer Richtung mit einem Gradienten von $+\beta$ und einer Richtung mit dem Gradienten von $-\beta$ (Abb. 3.5 und Abb. 3.6).

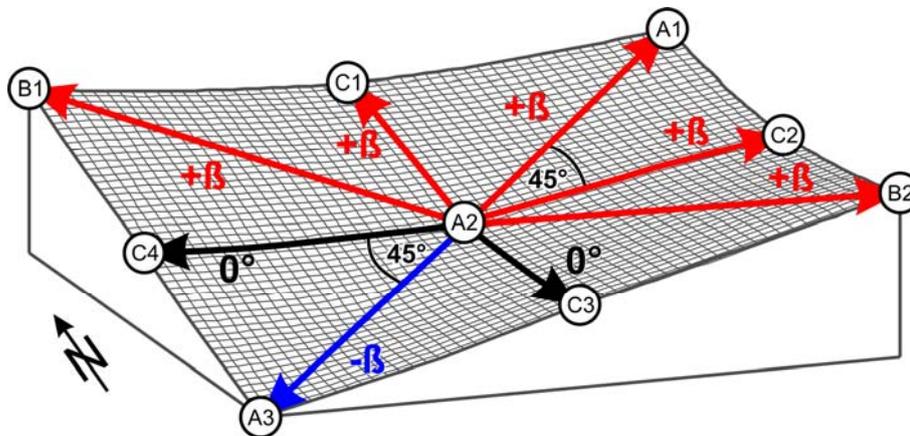


Abb. 3.5: Schema für die sich ergebenden, relativen Neigungen der Grundwasseroberfläche im Vergleich zum Betrachtungspunkt in der Mitte.

Entsprechend Abb. 3.6 wird vom Zentralpunkt A2 zwischen den Blickrichtungen 0° und 90° , bzw. 270° und 360° (entspricht dem gesamten Oberstrom) der Winkel $+\beta$ und bei 180° der Bach-Gradient $-\beta$ für die Ermittlung der Grundwasseroberfläche angesetzt. In den Zwischenbereichen (90° bis 180° und 180° bis 270°) wird eine lineare Veränderung des Winkels angenommen (Abb. 3.7).

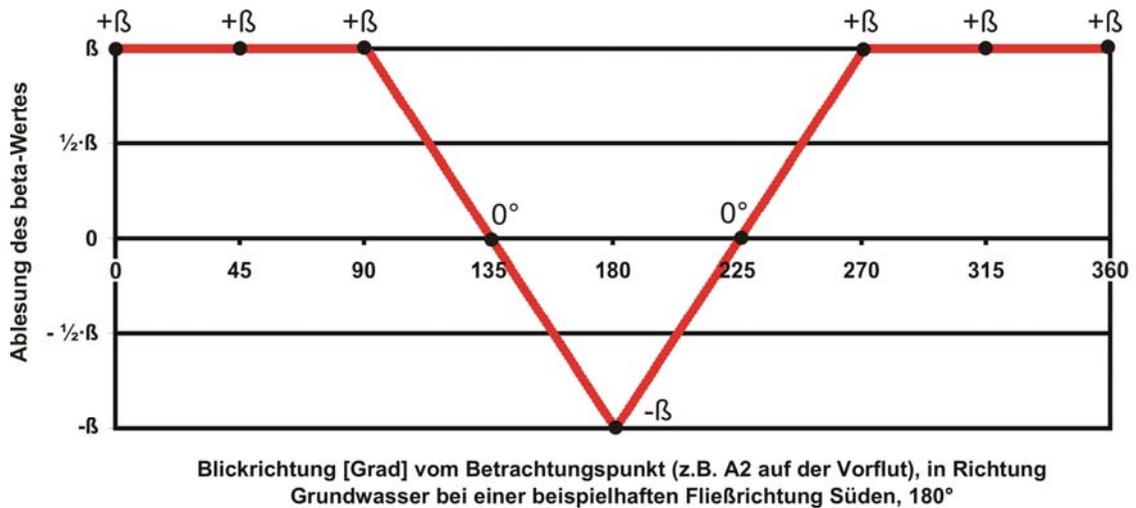


Abb. 3.6: Postulierte Gradienten der Grundwasser Oberfläche rund um den Punkt A2 (Abb. 3.5), dabei entspricht z.B. der Wert von 180° dem abstromigen Bereich des Baches in Fließrichtung.

Berechnung der Grundwasserhöhe

Bei der Berechnung der Grundwasserhöhe (mNN) erfolgt bezüglich der bisherigen Herangehensweise ein Übergang zu einem anderen Betrachtungspunkt. Während bislang der Betrachtungspunkt (z.B. A2) immer auf der Vorflut lag, erfolgt an diesem Punkt ein Wechsel zu einem Punkt neben der Vorflut (B3, D2 und F1 in Abb. 3.8), für den zunächst die Grundwasserhöhe ermittelt werden soll.

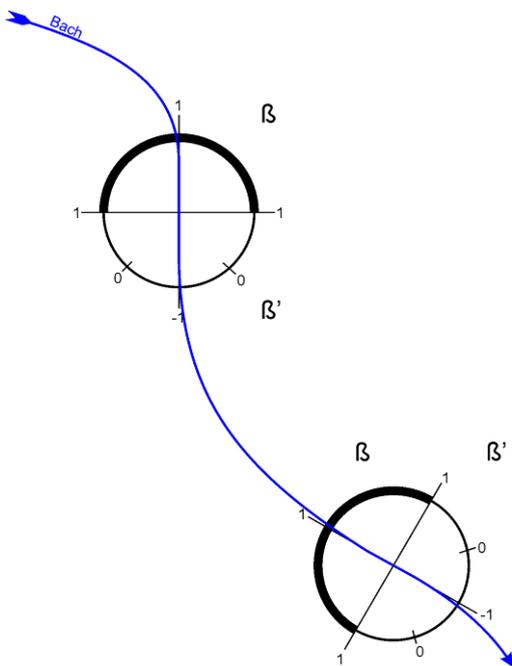


Abb. 3.7: Schema zur Berechnung der Neigung der Grundwasser Oberfläche (β) aus der Vorflutrichtung (α) und der Ermittlung der Neigung der Grundwasser Oberfläche bezüglich der Vorflutrichtung (relative Neigung, β').

Im Rahmen des Hydro-FaBer-Verfahrens werden zunächst die Punkte betrachtet, die sich nur eine Rastereinheit (vertikal, horizontal oder diagonal) entfernt zur Vorflut befinden, z.B. Punkt B3 in Abb. 3.8. Für die Berechnung der Grundwasserhöhe in Punkt B3 können die Informationen (Vorflutrichtung und Gradient) der Punkte A3, A4 und A5 herangezogen werden, da diese auf der Vorflut liegen und direkte Nachbarn zu B3 sind. Punkt D2 hingegen hat keinen direkten Vorflut-Nachbarn und wird daher erst betrachtet, nachdem alle Punkte, wie B3, mit direkten Nachbarn berechnet sind. Für den Punkt D2 werden Informationen derjenigen Punkte herangezogen, die zwei Rastereinheiten entfernt liegen. Im vorliegenden Fall sind das die Punkte A3, A4, A5, A6 und A7. Für den Punkt F1, welcher drei Rastereinheiten von der Vorflut entfernt liegt, sind ebenfalls die Punkte A3 bis A7 relevant.

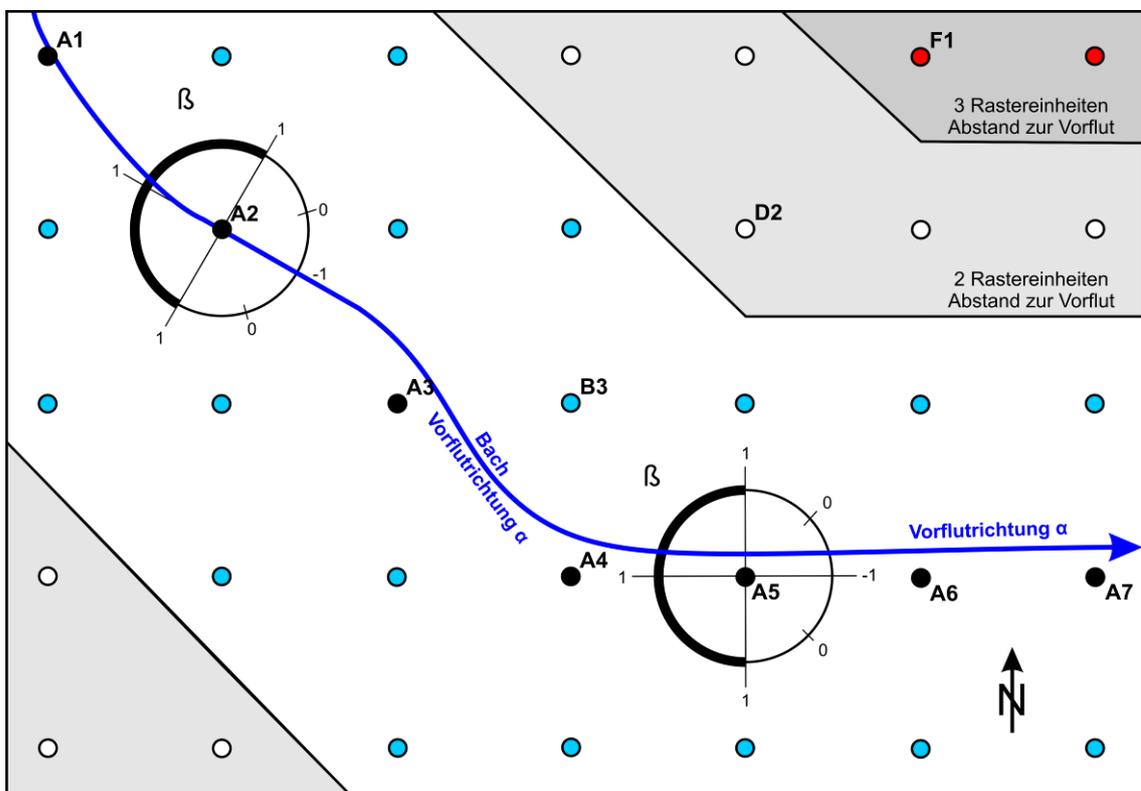


Abb. 3.8: Schema zur rasterbasierten Berechnung der Neigung der Grundwasseroberfläche (β) aus der Vorflutrichtung (α) und der Ermittlung der Neigung der Grundwasseroberfläche bezüglich der Vorflutrichtung.

Die rasterweise Berechnung der Grundwasserhöhen wird für alle Punkte durchgeführt, die einen Maximalabstand zu einem Vorfluter von fünf Rastereinheiten aufweisen. In der nächsten Phase werden für die bislang nicht belegten Rastereinheiten Werte für Grundwasserdruckfläche mittels Kriging interpoliert und diese anschließend mit der GOK zum Grundwasserflurabstand verrechnet (Abb. 3.9). Als Interpolationsverfahren wurde Kriging ausgewählt, da mit ihm Trends extrapoliert werden können. Der dabei erzeugte Gradient in der Grundwasseroberfläche kann als Input für die Bereiche mit größerer Vorflut-Entfernung verwendet werden.

Anschließend wird der Grundwasserflurabstand durch die Subtraktion der Grundwasseroberfläche vom Digitalen Geländemodell (DGM) ermittelt.

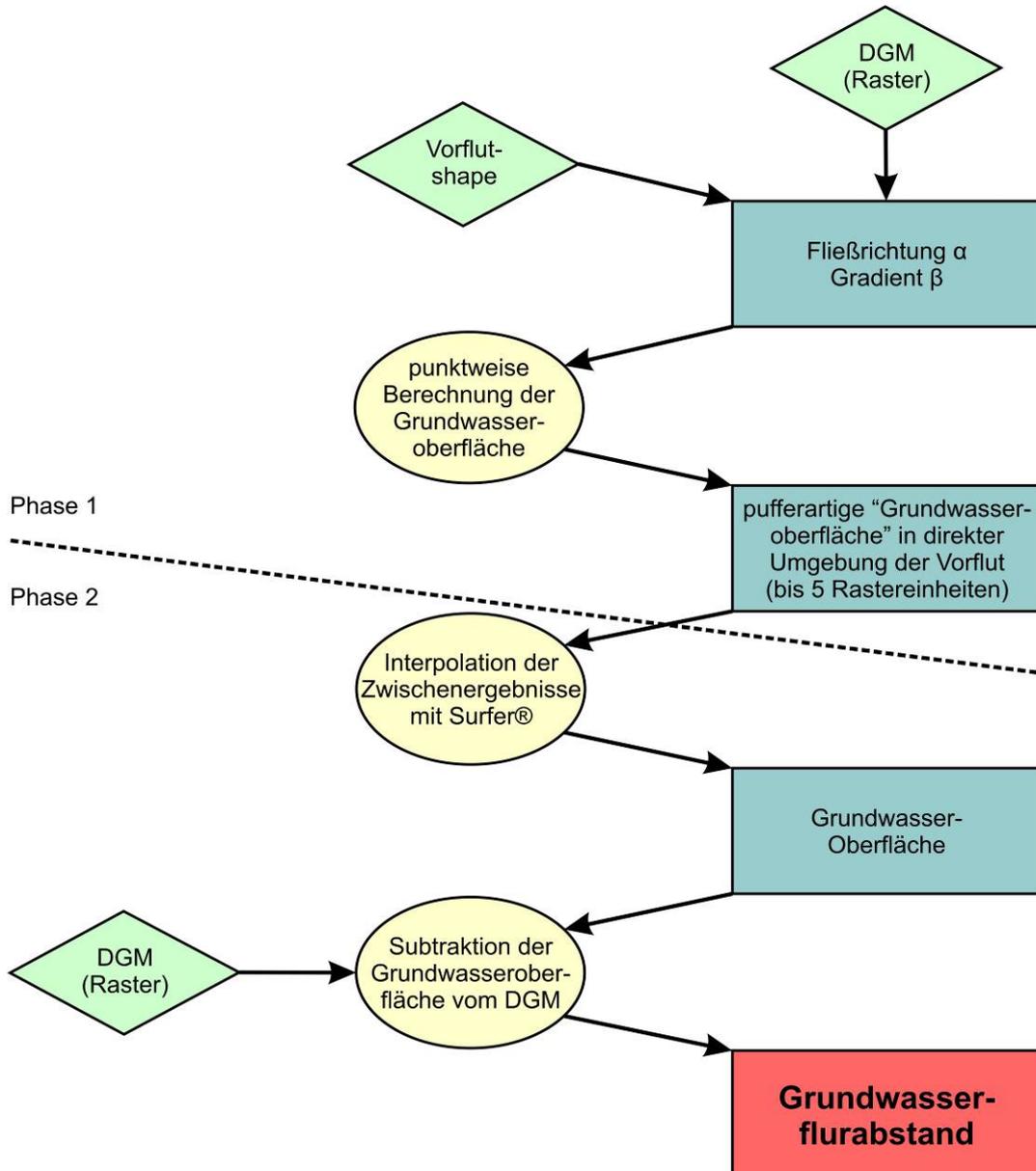


Abb. 3.9: Flow-Chart des Verfahrens zur Generierung der Informationen über den Grundwasserflurabstand im Festgestein (Hydro-FaBer).

Berechnung im Detail für Punkt B3 auf Basis von Punkt A3 in Abb. 3.8

Die beispielhafte Berechnung der Grundwasserhöhe in Punkt B3 erfolgt durch Ermittlung der jeweiligen Grundwasserhöhe aus den drei relevanten Punkten (A3, A4 und A5) mit Hilfe des Abstandes zu den Punkten und des relevanten Winkels der Grundwasseroberfläche (Abb. 3.4). Anschließend erfolgt eine Mittelwertbildung derjenigen Werte, die unterhalb der GOK liegen, sofern es sich bei der Rasterzelle in Punkt B3 um keine Grundwasserblänke handelt.

Für eine Fließrichtung (A3 in Abb. 3.8) nach Südosten (135°) ergibt sich eine Rotation von 45° aus der Normalrichtung Süden (180°). Durch die Verrechnung des Rotationswinkels (45°) mit der Blickrichtung nach Osten (90° , z.B. von A3 nach B3 in Abb. 3.8) ergibt sich ein resultierender Winkel von 135° . Für diesen Winkel kann die relative Neigung vom Betrachtungspunkt aus in Blickrichtung bestimmt werden. Für die Ermittlung der Grundwasserhöhe (mNN) ist in diesem Fall die relative Neigung (in Blickrichtung Osten) gleich Null (Tab. 3.2, Abb. 3.7). Ausgehend von dem Betrachtungspunkt ist die Grundwasseroberfläche also in Blickrichtung mit diesem Winkel geneigt.

Gleichungen zur Berechnung für den resultierenden Winkel in Tab. 3.2:

resultierender Winkel = Normalenrichtung – Fließrichtung + Blickrichtung zur Zielzelle

resultierender Winkel = $180^\circ - \alpha$ + Blickrichtung zur Zielzelle

resultierender Winkel = Rotationswinkel + Blickrichtung zur Zielzelle

Addiert man nun zur Höhenlage des Bachbettes h_1 das Produkt aus Abstand und dem Tangens der relativen Neigung ($0 \cdot \beta$) ergibt sich der erste Wert der Grundwasserhöhe des Zielrasterpunktes in der unmittelbaren Umgebung der Vorflut (Abb. 3.4). Für den Zielrasterpunkt errechnet man anschließend die weiteren Werte der Grundwasserhöhe, die sich aus den anderen Nachbarzellen mit Vorflut ergeben (von A4 nach B3 und von A5 nach B3). Der Mittelwert aus allen Grundwasserhöhen unterhalb der GOK ist die resultierende Grundwasserhöhe (mNN) am Rasterpunkt B3.

Praktische Durchführung

Für die praktische Berechnung nach dem beschriebenen Verfahren wurde MS Excel ® gewählt. Als Input-Parameter wurden der Bach-Gradient, die Bach-Richtung, das DGM und die Tab. 3.2 zugrunde liegende Datenbasis für β in den Arbeitsblättern aufbereitet. Zunächst wurden vom jeweiligen Betrachtungspunkt ausgehend die direkt angrenzenden acht Nachbarzellen betrachtet, ob dort ein Bach vorhanden ist. Für die von den acht möglichen, mit „Bach“ belegten Zellen, wurden die Höhenwerte der Grundwasseroberfläche berechnet. Anschließend wurde ein Mittelwert gebildet. Für jede Bach-Richtung ungleich Süden musste allerdings die Berechnung um den Winkel α der Bach-Richtung rotiert werden (Abb. 3.7 unten). Das Verfahren wurde mittels VBA auf eine frei wählbare, maximal zu betrachtende Rastereinheit automatisiert. Die Anzahl der zu betrachtenden Punkte lässt sich dabei einfach durch $8 \cdot$ Rasterabstand ermitteln und die Lokation der Punkte bzgl. des Zielpunktes im VBA berechnen.

Mit Hilfe der folgenden Tabelle (Tab. 3.1) soll der Berechnungsgang für einen Punkt im Grundwasser (Zelle B3) aus einem angrenzenden Bach dargestellt werden. Der Bach durchfließt die Zellen A3, A4 und A5 von Westen nach Osten mit unterschiedlichem

Gefälle. Von diesen drei Rasterzellen ausgehend, wird der Grundwasserstand (mNN) bzw. im Nachgang der Grundwasserflurabstand für Zelle B3 berechnet. Alle drei ermittelten Grundwasserstände werden zu einem Mittelwert zusammen gezogen, sofern die Einzelwerte unterhalb des DGMs liegen.

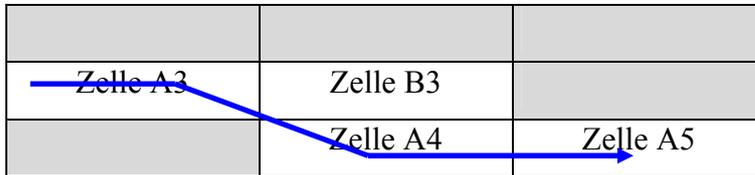


Abb. 3.10: Anordnung der Zellen bei der Beispielrechnung (100 m-Raster), um den Grundwasserflurabstand für Zelle B3 aus den angrenzenden Zellen (A3, A4 und A5) mit Vorflutbindung zu berechnen (grau: nicht relevante Zellen).

Tab. 3.1: Berechnungsvorgang des Grundwasserflurabstandes anhand Abb. 3.8 und Abb. 3.10 und angenommenen, hinsichtlich der Vorflutrichtung stark vereinfachten, Beispieldaten (Rasterabstand 100 m).

		Zelle A3	Zelle A4	Zelle A5
a	Vorflutrichtung α	135°	90°	90°
	Differenz zur Normrichtung 180°	45°	90°	90°
	Lage bzgl. Zelle B3	W	S	SE
b	Blickrichtung nach Zelle B3	90°	0°	-45°
	resultierender Winkel (a + b)	135°	90°	45°
	Korrekturfaktor nach Tab. 4.2	0	1	1
	Gefälle des Bachbettes $-\beta$	1°	1°	1°
	Höhenlage der Zelle	104 m	103 m	102 m
	Abstand zur Zelle B3	100 m	100 m	141 m
	Grundwasserstand der Zelle B3	104,00 m	104,75 m	104,47 m

Berechnung des Grundwasserstandes (mNN) in Zelle B3 aus Zelle A3:

$$\text{GW (Zelle B3)} = \text{DGM (A3)} + \text{Abstand} \cdot \tan(\text{Gefälle} \cdot \text{Korrekturfaktor für Gefälle})$$

$$\text{GW (Zelle B3)} = 104,00 \text{ m} + 100 \cdot \tan(1^\circ \cdot \pi/180 \cdot 0)$$

$$\underline{\underline{\text{GW (Zelle B3)} = 104,00 \text{ m}}}$$

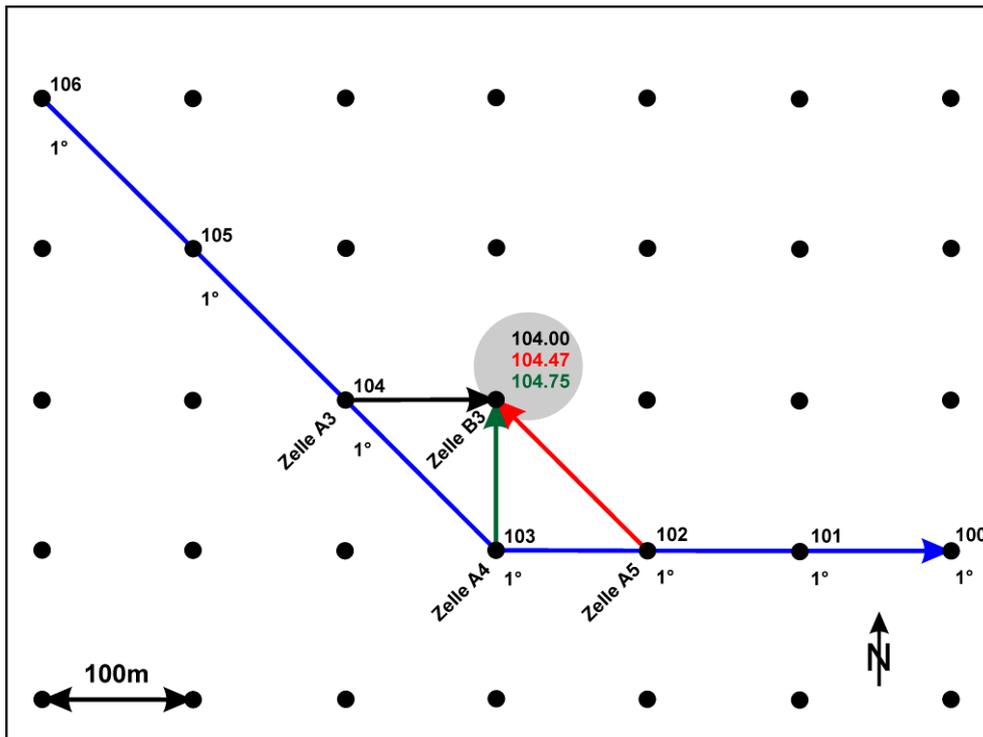


Abb. 3.11: Berechnung der drei anschließend zu mittelnden Grundwasserstände für Zelle B3 auf Basis des Hydro-FaBer-Verfahrens.

Aus den drei errechneten Grundwasserständen für die Zelle B3 wird anschließend der arithmetische Mittelwert berechnet. Für den in Tab. 3.1 berechneten Fall ergibt sich als gemittelter Grundwasserstand für Zelle B3 ein Wert von 104,41 mNN. Durch Subtraktion von der Höhenlage des DGMS (Zelle B3; 105 m) erhält man einen Grundwasserflurabstand von 0,59 m.

Tab. 3.2: Korrekturfaktoren für den Gradienten β entsprechend Abb. 3.6, die fehlenden Zwischenbereiche können durch lineare Interpolation gefüllt werden.

0°-90°	1	128°	0,156	164°	-0,644	204°	-0,467	240°	0,333
92°	0,956	132°	0,067	168°	-0,733	208°	-0,378	244°	0,422
96°	0,867	135°	0	172°	-0,822	212°	-0,289	248°	0,511
100°	0,778	136°	-0,022	176°	-0,911	216°	-0,2	252°	0,6
104°	0,689	140°	-0,111	180°	-1	220°	-0,111	256°	0,689
108°	0,6	144°	-0,2	184°	-0,911	224°	-0,022	260°	0,778
112°	0,511	148°	-0,289	188°	-0,822	225°	0	264°	0,867
116°	0,422	152°	-0,378	192°	-0,733	228°	0,067	268°	0,956
120°	0,333	156°	-0,467	196°	-0,644	232°	0,156	>= 270°	1
124°	0,244	160°	-0,556	200°	-0,556	236°	0,244		

Für die Punkte mit einer Rasterweite von 1 als Abstand zur Vorflut in Abb. 3.11 wird in den folgenden Abbildungen der Grundwassergleichenplan entwickelt.

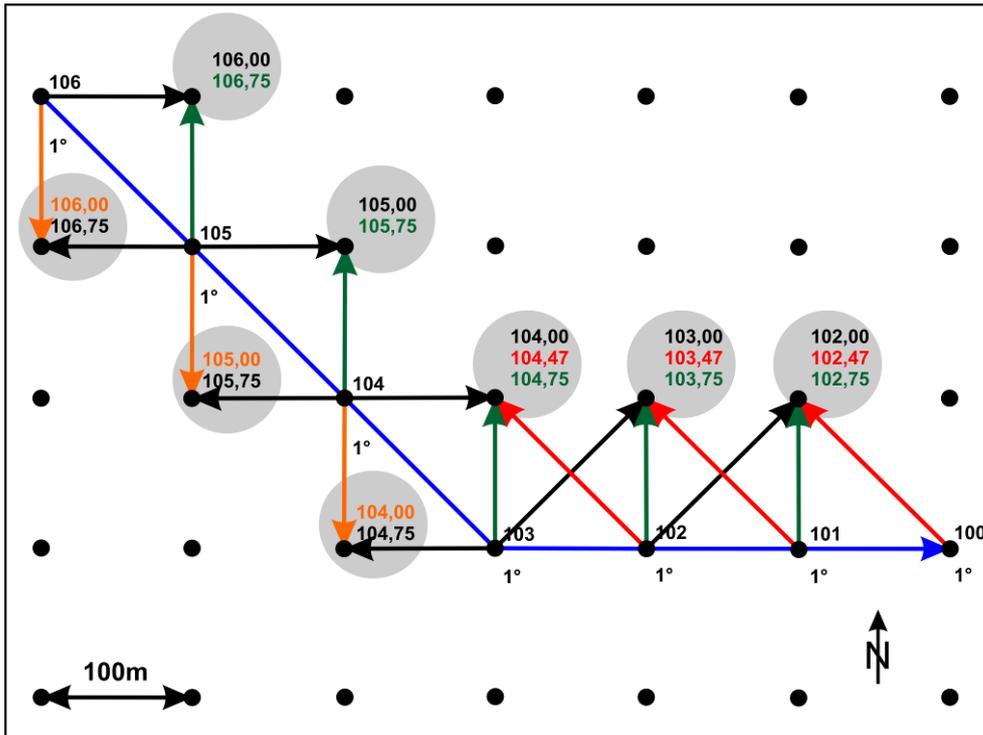


Abb. 3.12: Berechnung der anschließend zu mittelnden Grundwasserstände für die Zellen mit einem Rasterabstand von einer Rastereinheit zur Vorflut.

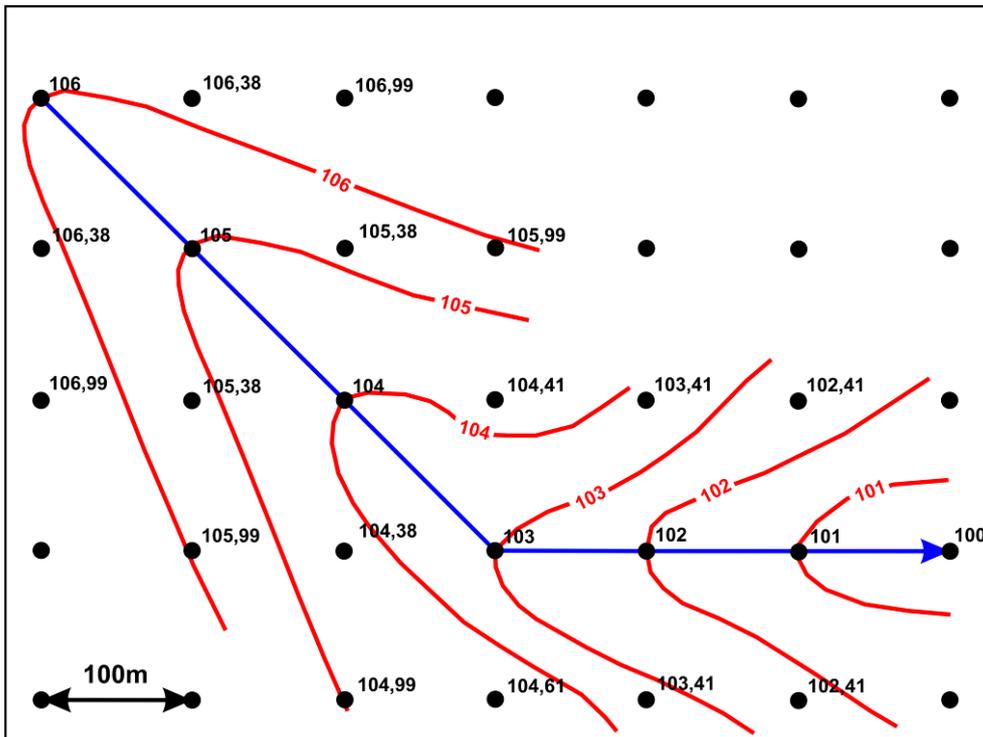


Abb. 3.13: Ermittelter Grundwassergleichenplan als Zwischenstand im Rahmen des Verfahrens Hydro-FaBer, um anschließend durch Subtraktion vom DGM den Grundwasserflurabstand zu berechnen.

Basierend auf diesem Grundwassergleichenplan (Abb. 3.13) wird zum Abschluss dieses Grid von der Geländeoberkante abgezogen und somit der Grundwasserflurabstand berechnet.

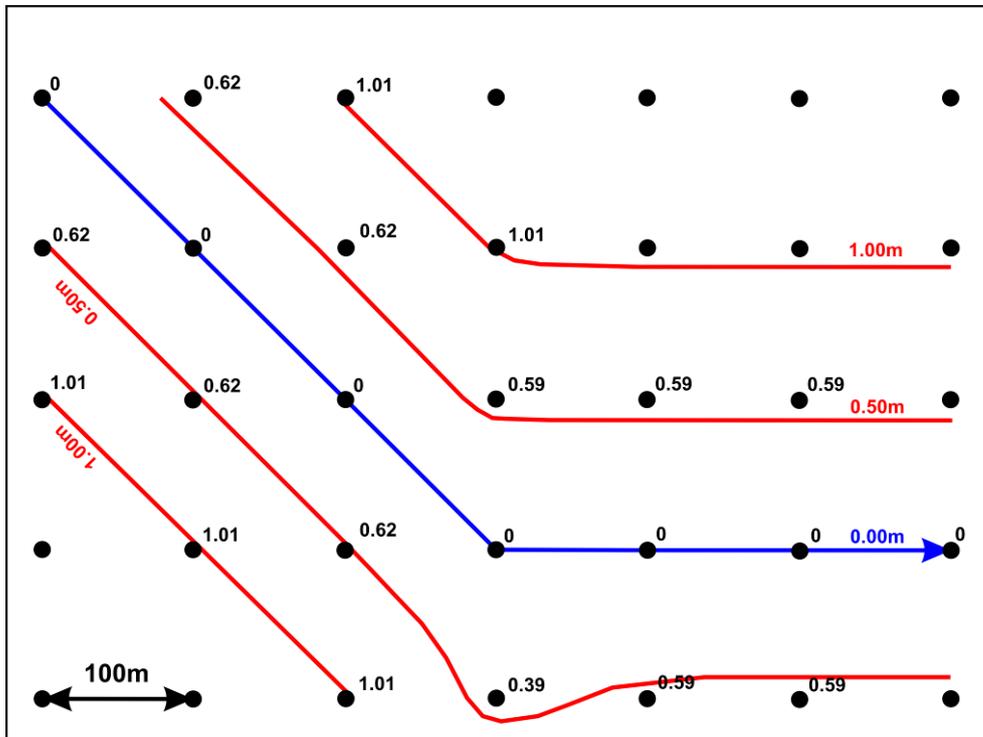


Abb. 3.14: Durch Subtraktion der Grundwasseroberfläche (Abb. 3.13) vom Digitalen Geländemodell (DGM) erzeugte Karte des Grundwasserflurabstandes.

Ergebnisse und Validierung des Verfahrens

Das Verfahren wurde für die Festgesteinsbereiche um Eschwege für eine Gesamtzahl von 560.000 Zellen durchgeführt. Die Ablage der Daten in Excel® erfolgte dabei für den Hochwert in den Zeilen und für den Rechtswert in den zugehörigen Spalten. Basierend auf der Rastergröße des DGMs (Abb. 3.15) wurde damit zunächst die Grundwasseroberfläche (Abb. 3.16) und anschließend der Grundwasserflurabstand (Abb. 3.17) für ein Festgesteinsareal von ca. 100 km² ermittelt. Als eigener Standard wurde das Verfahren jeweils bis zu einer Entfernung von fünf Rasterzellen zur Vorflut durchgeführt.

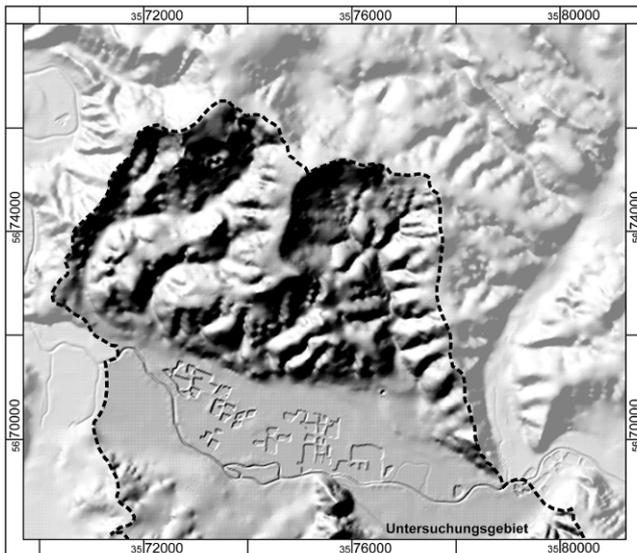


Abb. 3.15: Digitales Geländemodell (20 m-Raster) des nördlichen Bereiches des Untersuchungsgebietes (visualisiert als shaded-relief-map), welches als Basis für die Berechnung des Grundwasserflurabstandes mit Hydro-FaBer diente.

Das Verfahren erzielt insbesondere in Mittelgebirgsregionen (Buntsandstein und Muschelkalk in Nordhessen, bei Eschwege) gute Ergebnisse (Abb. 3.16 und Abb. 3.17). In flachen, weiträumigen Talbereichen sind trotz gleichzeitig geringer Vorflut-Gradienten die Ergebnisse nicht ausreichend. Dort wurden die generierten Grundwasserflurabstände aus interpolierten Stichtagsmessungen des quartären Kies-Aquifers für das TUB-BGR-Verfahren (WESSOLEK ET AL. 2004) verwendet.

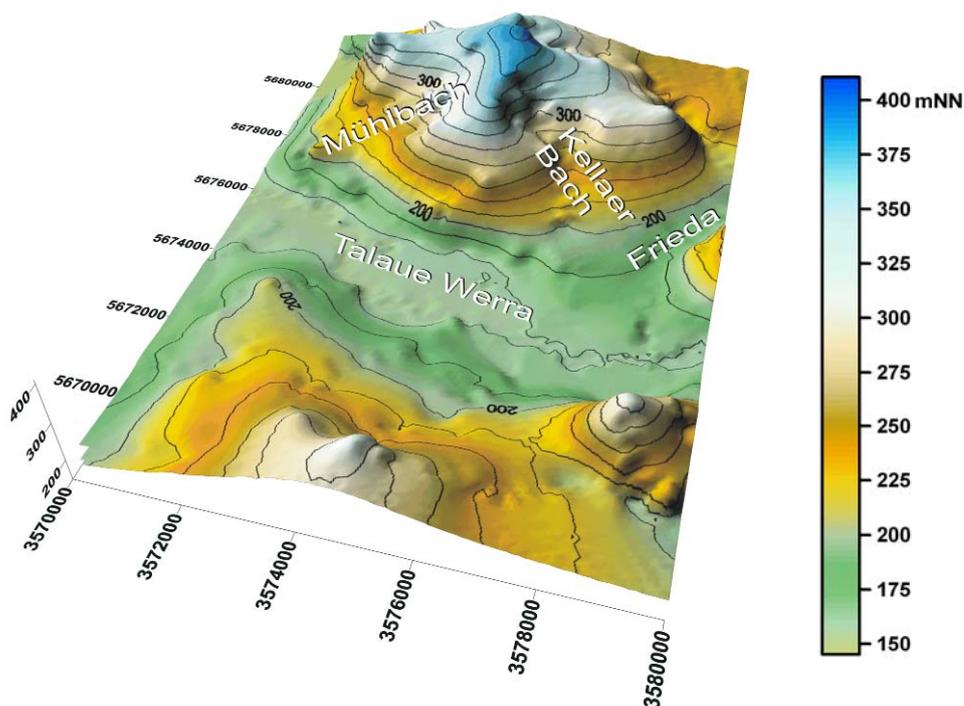


Abb. 3.16: Mit Hydro-FaBer, ausgehend von den Vorflutern, interpolierte Grundwasseroberfläche (10-fach überhöht).

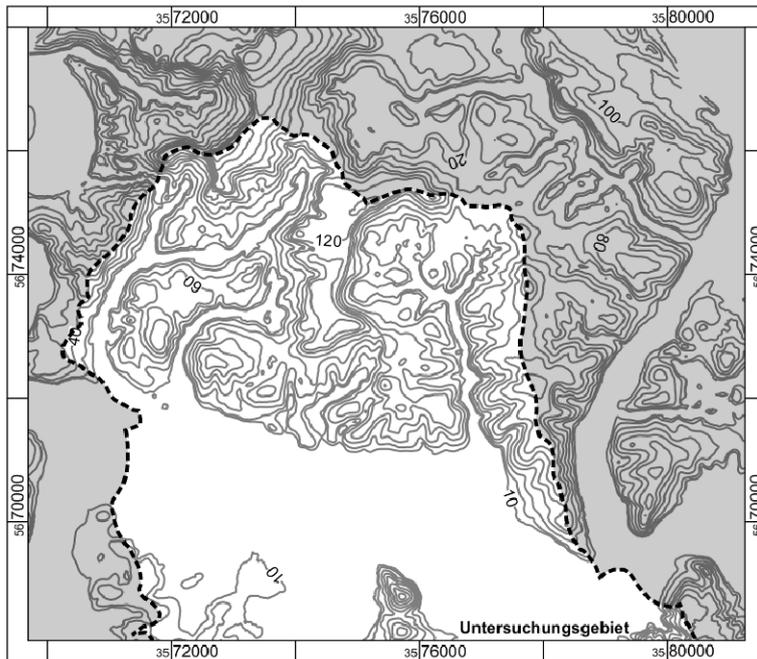


Abb. 3.17: Grundwasserflurabstand des Untersuchungsgebietes nach Verrechnung des mit Hydro-FaBer erstellten Grundwassergleichenplans mit dem Digitalen Geländemodell.

Das Ergebnis des Hydro-FaBer-Verfahrens im Untersuchungsgebiet kann nicht mit den modellierten Wasserständen des Nordbereiches des Untersuchungsgebietes verglichen werden. In diesem Bereich des Modellgebietes konnten die Ergebnisse der Modellierung aufgrund fehlender Messdaten nicht evaluiert werden. Ein Vergleich von Hydro-FaBer mit realen Messwerten im Gebiet der Rappbode-Talsperre wird in ALTENSTEIN (2013) durchgeführt.

Vergleich von Hydro-FaBer mit anderen Methoden

Da keine Informationen über die Grundwasserstände im Nordteil des Untersuchungsgebietes vorliegen, wurden ausgehend von den DGM-Informationen (Abb. 3.18) der Bäche verschiedene Interpolationsmöglichkeiten mit Hydro-FaBer verglichen. Dabei wurden vier Grundwassergleichenpläne miteinander verglichen:

- Triangulation,
- IDW, Power 2,
- Kriging und
- Hydro-Faber (Zwischenergebnis).

Dargestellt ist auf den vier Abbildungen (Abb. 3.19 bis Abb. 3.22) jeweils der Nordteil des Modellgebietes mit den Bächen Mühlbach, Schambach und Kellaer Bach. Zunächst ist festzuhalten, dass die Triangulation, wie erwartet, die schlechtesten Ergebnisse der vier Methoden liefert (Abb. 3.19).

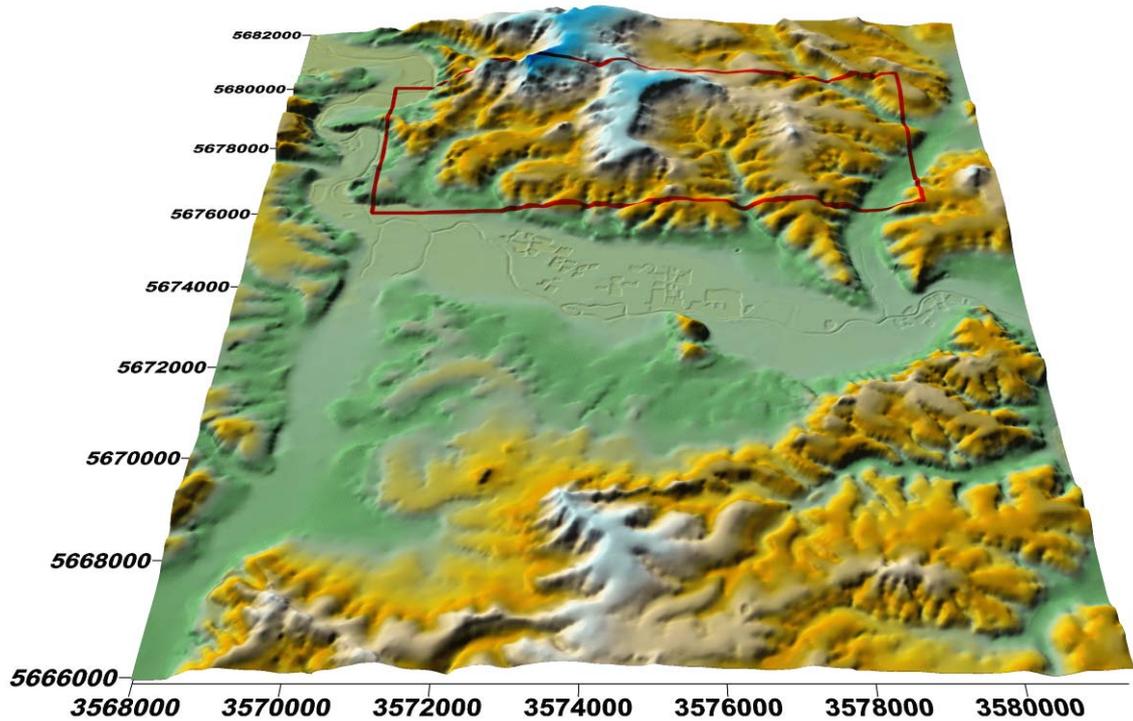


Abb. 3.18: Lage der Kartenausschnitte (rot markiert auf den DGM) der folgenden fünf Abbildungen (Darstellung 2-fach überhöht).

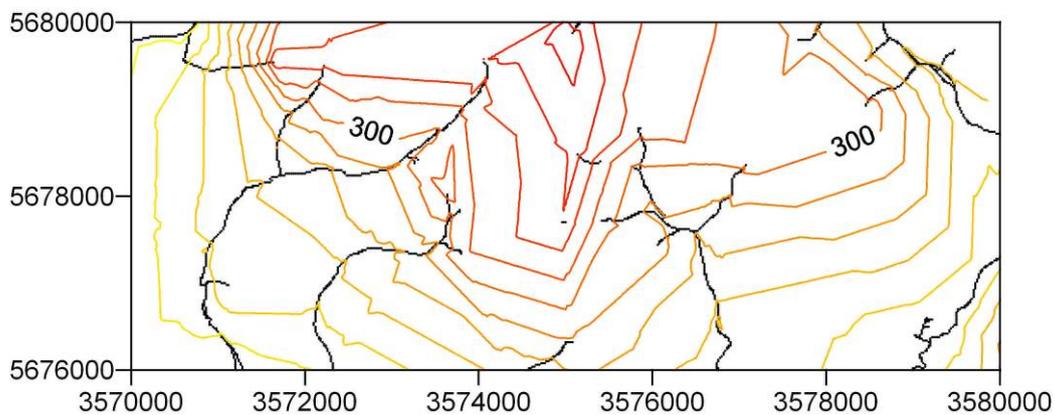


Abb. 3.19: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt auf Basis der Wasserstände der Bäche (schwarze Linien), Interpolationsverfahren: Triangulation (LÄHNE ET AL. 2013).

Beim Vergleich der Triangulation mit den Ergebnissen von IDW (Abb. 3.20) ist festzustellen, dass IDW ausgehend von der Datenbasis der Bachwasserstände (schwarze Linien) plausiblere Ergebnisse für die Grundwasseroberfläche ergibt. Insbesondere beim Vergleich mit den Ergebnissen von Hydro-FaBer (Abb. 3.22) fallen aber die kreisrunden, fehlerhaften Strukturen, die sog. „bull eyes“ an den Quellbereichen der Bäche auf.

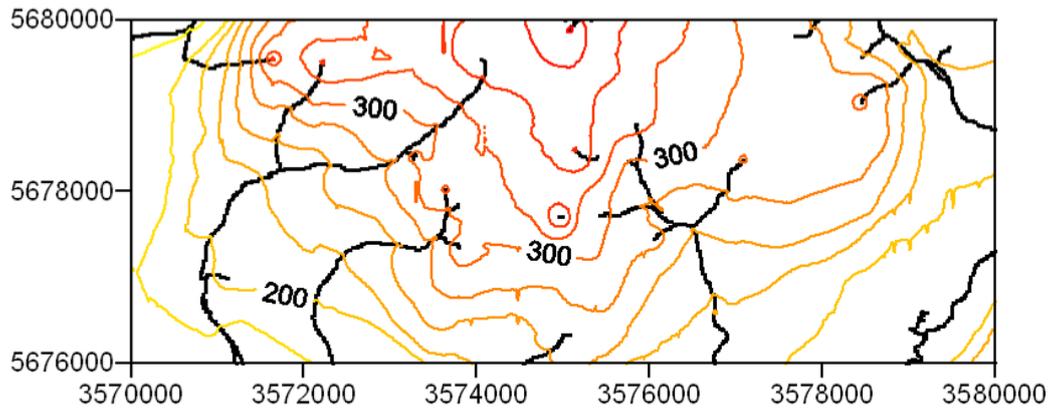


Abb. 3.20: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt auf Basis der Wasserstände der Bäche (schwarze Linien), Interpolationsverfahren: IDW, Power 2.

Bei der Gegenüberstellung der Ergebnisse der Kriging-Interpolation aus Bach-Wasserständen mit den Ergebnissen von Hydro-FaBer werden bei der Betrachtung des gesamten Bereiches, welcher in Abb. 3.21 und Abb. 3.22 dargestellt ist, große Ähnlichkeiten deutlich, die durch die Verwendung von Kriging in beiden Verfahren bedingt sind. Die Unterschiede zwischen diesen beiden Methoden liegen in den bachnahen Bereichen des Modellgebietes. In diesen Bereichen liefert Hydro-FaBer aufgrund seines methodischen Ansatzes die besseren Ergebnisse.

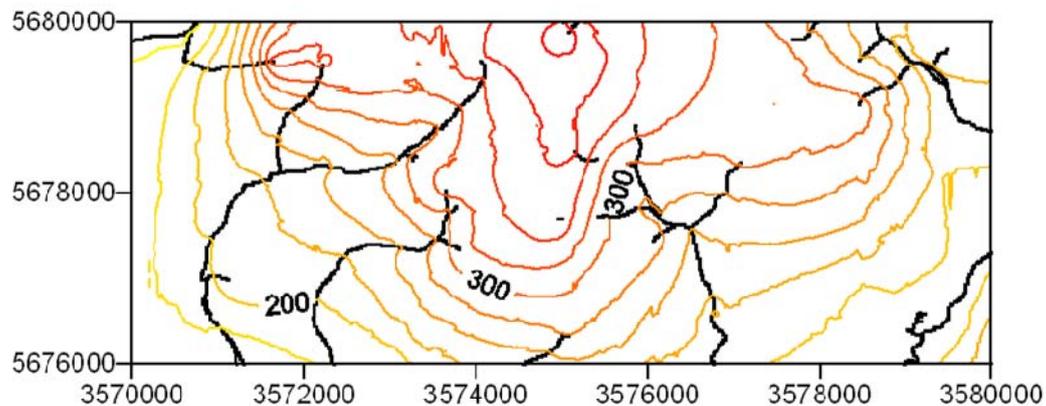


Abb. 3.21: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt auf Basis der Wasserstände der Bäche (schwarze Linien), Interpolationsverfahren: Kriging.

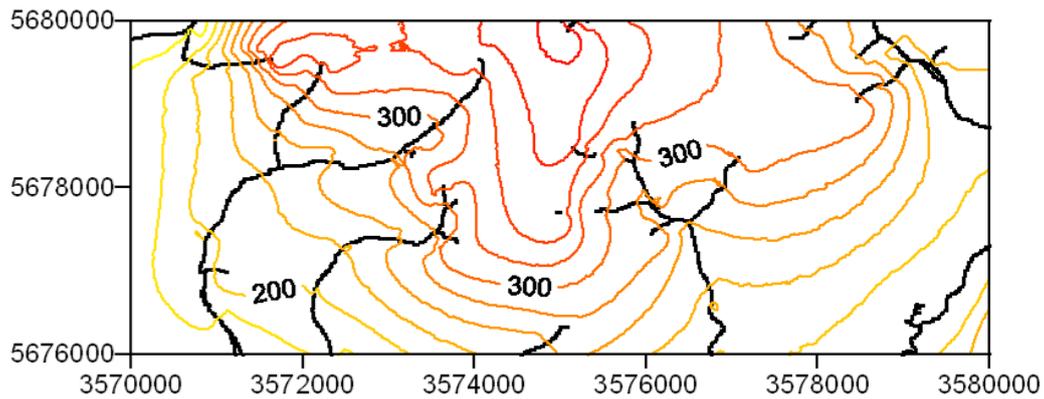


Abb. 3.22: Grundwassergleichenplan (Grundwassergleichen in mNN) des nördlichen Festgesteinsbereiches, erstellt mit Hydro-FaBer, Interpolationsverfahren: Kriging (LÄHNE ET AL. 2013).

Beim direkten Detailvergleich der Interpolationsergebnisse der reinen Kriging-Interpolation mit den Hydro-FaBer-Ergebnissen durch die Erstellung einer Differenzkarte (Abb. 3.23), fallen insbesondere die bachnahen Bereiche auf. Durch die Integration der Bachbett-Neigung in die Interpolation der Grundwasseroberfläche ergibt sich in den bachnahen Bereichen ein differenziertes und verbessertes Abbild der Realität. In den bachnahen Bereichen (rot) weist die Hydro-FaBer-Grundwasseroberfläche bis zu 20 m geringere Grundwasserhöhen auf, als bei der reinen Kriging-Interpolation. Dies bedeutet, dass durch die Anwendung von Hydro-FaBer in diesen Bereichen höhere Grundwasserflurabstände ausgewiesen werden.

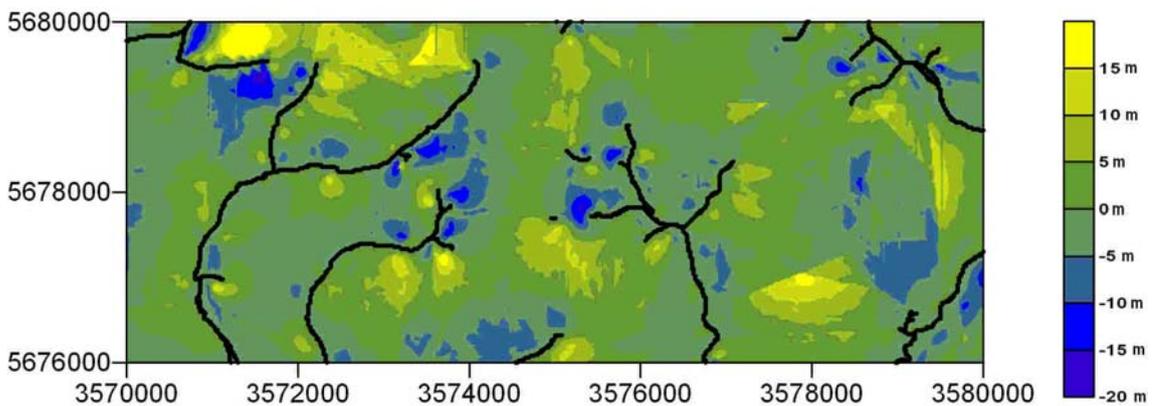


Abb. 3.23: Differenzenplan des nördlichen Festgesteinsbereiches, Differenz zwischen den Ergebnissen von Hydro-Faber und der reinen Kriging-Interpolation, ausgehend von den DGM-Informationen am Bachbett.

3.2. Wasserhaushalt

Der Wasserhaushalt eines Untersuchungsgebietes lässt sich durch die hydrologische Grundgleichung (Wasserhaushaltsgleichung) beschreiben.

$$\text{Niederschlag} = \text{Abfluss} + \text{Verdunstung} \quad (\text{Gl. 3.4})$$

Diese Gleichung ist für lange Zeiträume mit langjährigen Mittelwerten exakt gültig. Für kürzere Zeiträume wird der Summand der Vorratsänderung (Rücklage minus Aufbrauch) im Grundwasser hinzugefügt.

Niederschlag

Aus den Niederschlagsdaten der Klimastation Eschwege [gemessene Auflösung: 1/10 mm/d] wurden die monatlichen Niederschlagssummen ermittelt und in Abb. 3.24 graphisch dargestellt.

Im Betrachtungszeitraum (1996 bis 2005) fielen durchschnittlich 723 mm Niederschlag pro Jahr. Das langjährige Mittel (1951 bis 1980) beträgt 616 mm (RAHBAR 1998). Somit sind die betrachteten zehn Jahre im Durchschnitt niederschlagsreicher. Beim Vergleich der Einzelmonate mit den Monatsmittelwerten (1996 bis 2005) zeigt sich, dass 2003 ein deutliches Trockenjahr war. Insgesamt liegen die Niederschlagssummen von elf Monaten des kalendarischen Jahres 2003 unterhalb des Mittelwertes. Im Gegensatz dazu, war 2002 ein ausgeprägtes Nassjahr (kalendarisch), in dem die Niederschlagssummen von elf Monaten oberhalb des Mittelwertes von 1996 bis 2005 lagen.

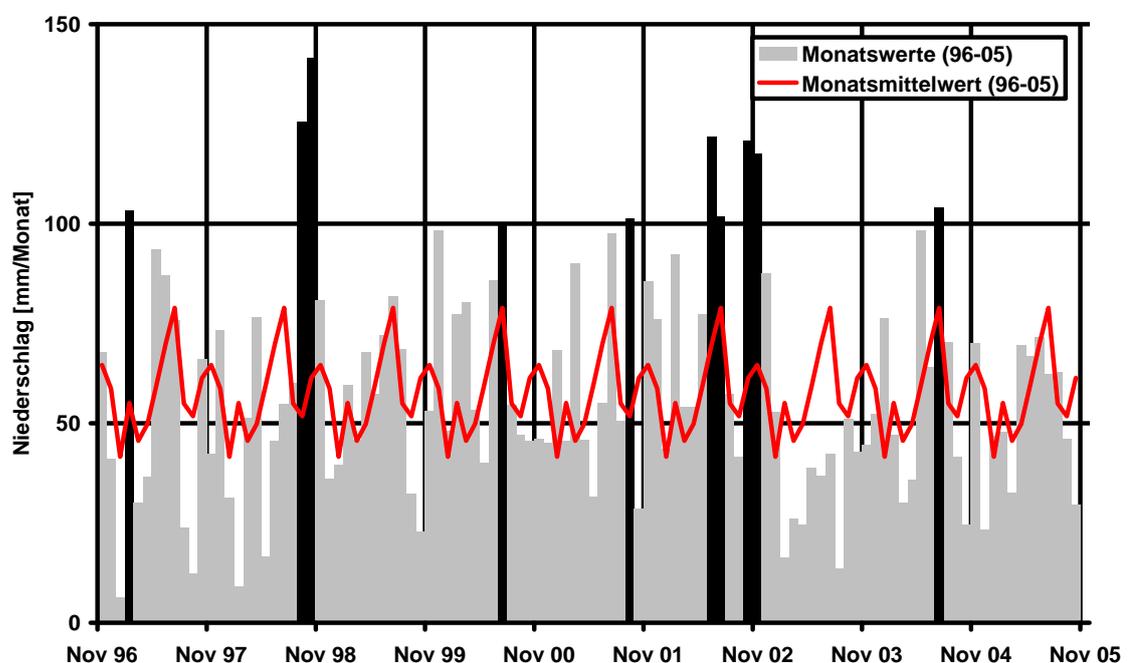


Abb. 3.24: Monatswerte des Niederschlages, Basisdaten der DWD-Messstation Eschwege (schwarz – Monatsniederschlag >100 mm).

Im Nassjahr 2002 fielen 205 mm mehr als im Durchschnitt zwischen 1996 und 2005. Dies entspricht einem Überschuss von 28 %. Hingegen fielen im anschließenden

Trockenjahr 2003 153 mm weniger als der Durchschnitt. Dies entspricht einer fehlenden Menge von 21 %.

Für die Berechnung der Grundwasserneubildung wurde der Niederschlag zunächst nach RICHTER (1995) korrigiert. Aufgrund der geographischen Lage der Messstation Eschwege wurden die Daten in Gebiet IV nach RICHTER (1995) und aufgrund der Geschütztheit in Klasse b (leicht geschützt) eingegliedert. Für diese Klassifikation konnten die Werte für den mittleren Jahresgang des prozentualen Niederschlagsmessfehlers (Summe der Benetzungs-, Verdunstungs- und Windfehler) abgeleitet werden und als Gesamtniederschlagskorrektur in die Modellierung integriert werden.

Für die Regionalisierung der Niederschlagsverteilung wurden **Regressionsanalysen** erstellt, mit denen eine Niederschlagskorrektur der DWD-Niederschlagsdaten bezüglich der Höhenlage (Abb. 3.25) und bezüglich des Rechtswertes der Rastereinheiten im Untersuchungsgebiet vorgenommen werden konnte. Die zugrunde liegenden Daten wurden durch die Auswertung von Niederschlagsmessern während der Geländeübung Eschwege 2006 der MLU Halle (Saale) erhoben. Die Betrachtung der Abhängigkeit des Niederschlags von den Hochwerten erbrachte kein statistisch signifikantes Ergebnis.

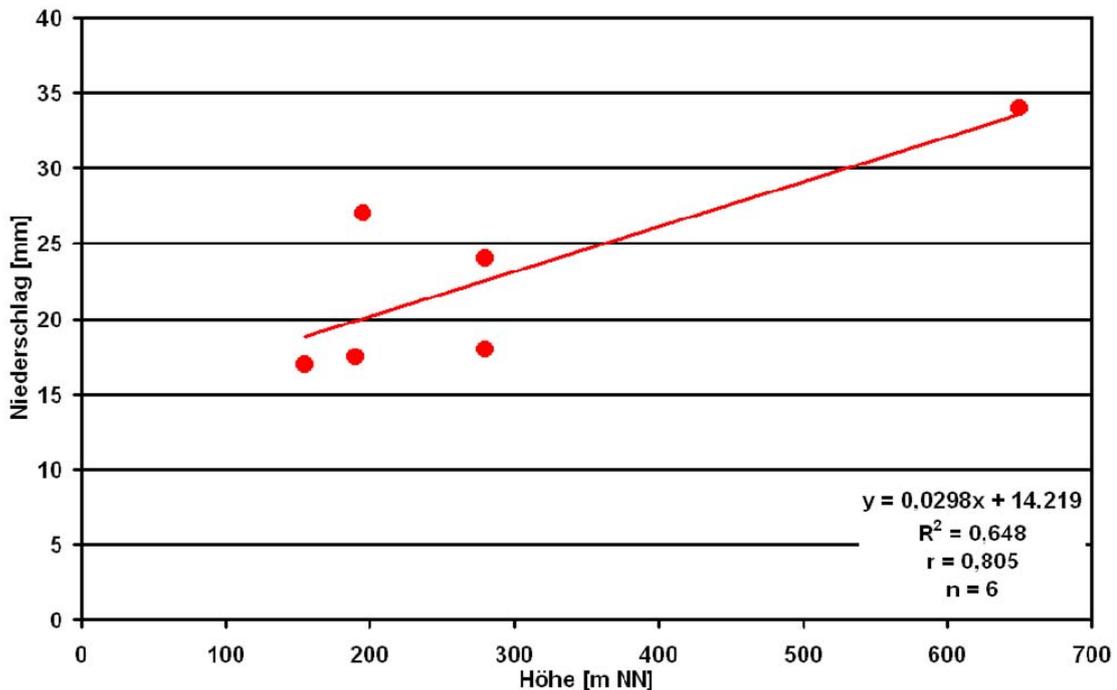


Abb. 3.25: Regressionsanalyse Höhenlage gegen Niederschlag für die sechs Messpunkte im Raum Eschwege (Zeitraum der Niederschlagsmessung: 26.03. – 02.04.2006).

Für die Auswertung der Regressionsanalyse (Abb. 3.25) ergibt sich für die vorliegenden Daten die Regressionsgerade $y=0,0298x+14,219$ und ein zugehöriges Bestimmtheitsmaß von $R^2=0,648$ bei einem Stichprobenumfang von $n=6$. Als kritischer

Wert des Korrelationskoeffizienten für eine Vertrauenswahrscheinlichkeit von 95 % wird nach dem einseitigen t-Test ein $r_{4, 5.0\%}=0,811$ benötigt. Dieser Wert wird knapp verfehlt. Dennoch wird der Wert von $r=0,805$ als ausreichend für die Weiterverarbeitung erachtet. Aus der Regressionsgeraden wurde eine Korrektur für den Niederschlag pro +10 m Höhendifferenz zur Messstation Eschwege (170mNN) von $x_{\text{kor}}=+0,298$ mm ermittelt.

Um im Untersuchungsgebiet potentiell vorhandene Abhängigkeiten der Niederschlagshöhe von der geographischen Lage der Messpunkte zu analysieren, wurde eine Beziehung zwischen der gemessenen Niederschlagshöhe und dem Rechtswert dargestellt (Abb. 3.26). Die statistische Untersuchung ergab einen signifikanten Zusammenhang zwischen der Niederschlagshöhe und der Entfernung der Messpunkte vom Hohen Meißner. Die gemessene Niederschlagsmenge der sechs Messungen im Jahr 2006 verringert sich mit der Entfernung zum Hohen Meißner. Aus dieser Beobachtung lässt sich ein lokal wirksamer Regenschatteneffekt des Meißners im Untersuchungsgebiet interpretieren.

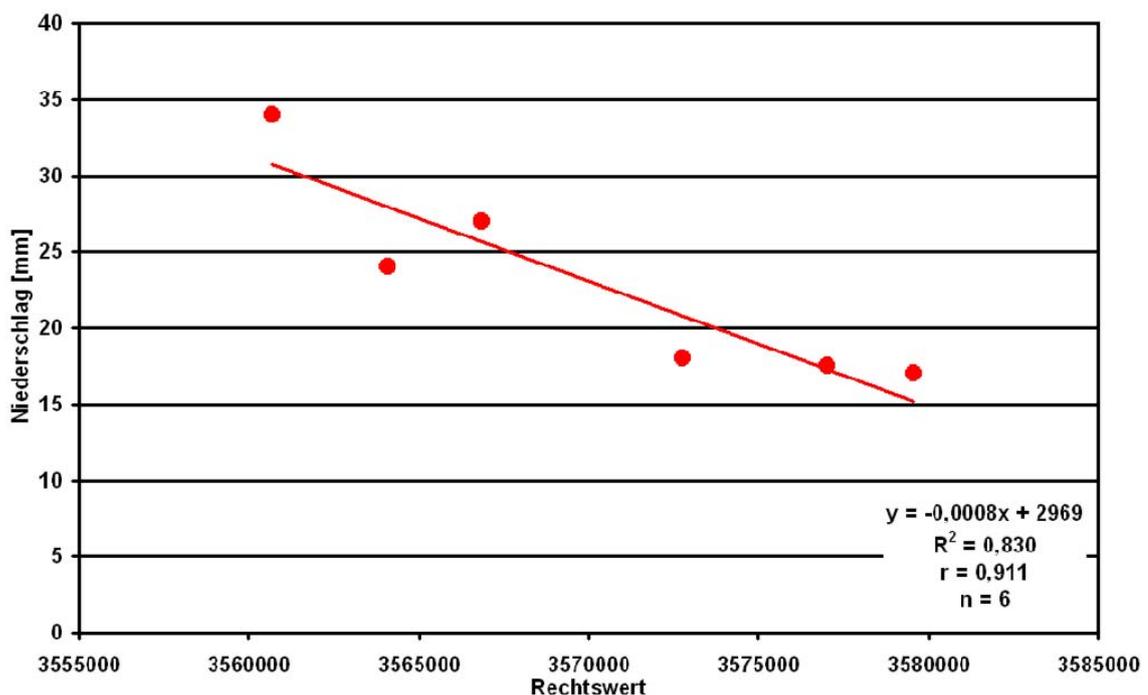


Abb. 3.26: Regressionsgerade zwischen Niederschlagshöhe und dem Rechtswert der Messpunkte (Auswirkung des Regenschattens des Hohen Meißners).

Aus den vorliegenden Daten ergibt sich eine Regressionsgerade $y=-0,0008x + 2969$ mit einem Bestimmtheitsmaß von $R^2=0,830$. Der Stichprobenumfang beträgt $n=6$. Der Korrelationskoeffizient liegt mit $r=0,911$ im 95 %-Vertrauensintervall ($r_{4, 5.0\%}=0,811$). Aus der Regressionsgeraden wurde eine prozentuale Korrektur für den Niederschlag pro 100 m z.B. in westlicher Richtung von der Messstation Eschwege (RW: 3574453) von $x=+0,0825$ mm ermittelt.

Potentielle Evapotranspiration

Für das Untersuchungsgebiet wurde die potentielle Evapotranspiration für die bessere Vergleichbarkeit und optimierte Interpretationsmöglichkeiten nach HAUDE (1954, 1955), Turc-Wendling und Turc-Ivanov (TURC 1961, WENDLING & MÜLLER 1984, WENDLING ET AL. 1991) sowie die FAO-Gras-Referenzverdunstung (DVWK 1996) berechnet. Die ermittelte FAO-Gras-Referenzverdunstung (Abb. 3.27) wurde für die Berechnung der Sickerwasserrate nach dem TUB-BGR-Verfahren (WESSOLEK ET AL. 2004) benötigt. Die Ergebnisse nach Turc-Wendling wurden zudem für die Ermittlung der klimatischen Wasserbilanz verwendet.

Die höchste, potentielle Evapotranspiration im Untersuchungszeitraum weist das Trockenjahr 2003 auf (Abb. 3.24). Für dieses Jahr ergibt sich eine FAO-Grasreferenzverdunstung von 643 mm. Die Maximalunterschiede zum monatlichen Durchschnittswert sind in den Monaten Juni und August 2003 mit einer um etwa 22 mm höheren ETp festzustellen (Abb. 3.28).

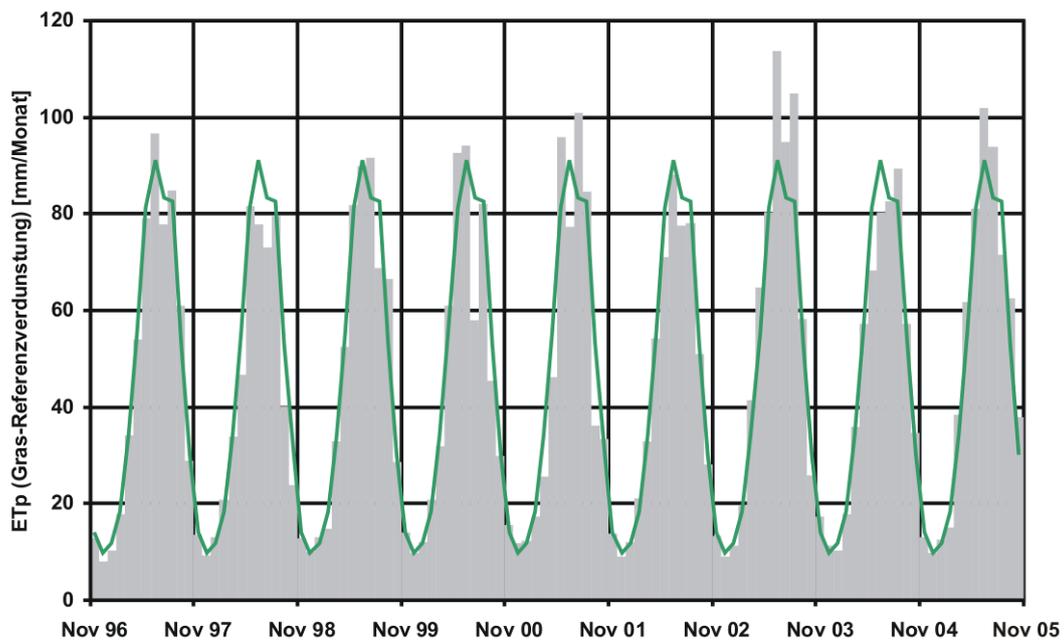


Abb. 3.27: Mittlere Monatswerte der ETp (FAO-Gras-Referenzverdunstung) von November 1996 bis Oktober 2005.

Den größten monatlichen Absolut-Wert der FAO-Gras-Referenzverdunstung weist der Juni 2003 mit 114 mm auf. Die geringste ETp weist das Jahr 1998 mit 523 mm auf. Der Wert der FAO-Grasreferenzverdunstung liegt für das Nassjahr 2002 mit 548 mm unterhalb des Mittelwertes (1996 bis 2005) von 575 mm.

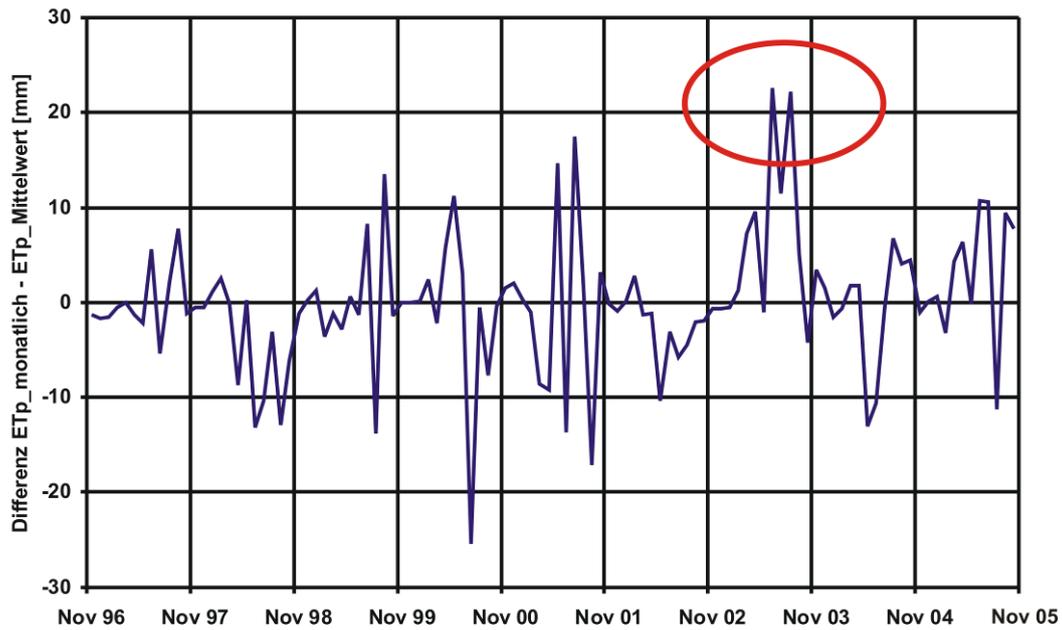


Abb. 3.28: Monatliche Differenz der ETp zum Mittelwert der ETp (1996 bis 2005) mit den Maximaldifferenzen im Trockenjahr 2003 (rot markiert).

Klimatische Wasserbilanz

In der Bodenkunde wird die Klimafeuchte durch die Klimatische Wasserbilanz (KWB) beschrieben.

$$\text{Klimatische Wasserbilanz} = \text{Niederschlag} - \text{ETp} \quad (\text{Gl. 3.5})$$

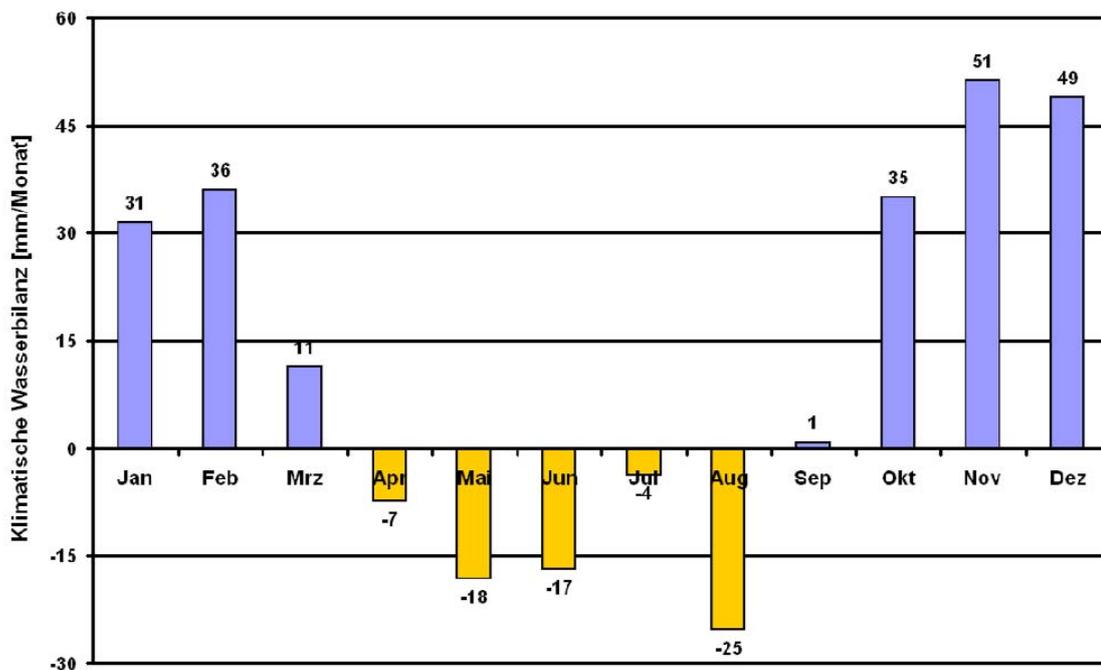


Abb. 3.29: Monatliche, Klimatische Wasserbilanz (FAO, 1996 bis 2005), Messstation Eschwege.

Positive Werte der KWB bedeuten Wasserüberschuss und negative weisen auf Wassermangel hin. Die Monate April bis August weisen durchschnittlich eine negative, Klimatische Wasserbilanz auf (Klimastation Eschwege, 1996 bis 2005, siehe Abb. 3.29). Aufgrund der starken Sommer-Niederschläge ist die Wasserbilanz im Juli aber nur relativ gering negativ. Bei positiven Werten der KWB wird durch den Überschuss zunächst der Bodenspeicherraum bis zur Feldkapazität aufgefüllt. Ein weiterer Überschuss führt anschließend zur Grundwasserneubildung. Der Hauptzeitraum der Grundwasserneubildung liegt in den Monaten Oktober bis März.

Der Mittelwert der Klimatischen Wasserbilanz beträgt +148 mm pro Jahr (Zeitraum 1996 bis 2005). Das Jahr 2003 mit der negativen KWB=-73 mm repräsentiert dabei den absolut tiefsten Wert des Betrachtungszeitraumes. Dieser Wert der KWB ist auf sehr geringe Niederschläge zurückzuführen. Das Maximum der Klimatischen Wasserbilanz weist das Jahr 2002 mit +380 mm auf (Abb. 3.30). Dieser hohe Überschuss ist die Folge des oben beschriebenen Niederschlagsmaximums und einer durchschnittlichen Evapotranspiration (Tab. 3.3).

Tab. 3.3: Vergleich der Jahressummen der Niederschläge, der FAO-Gras-Referenzverdunstung und der Klimatischen Wasserbilanz im Untersuchungszeitraum.

	Niederschlag [mm]	ETp FAO-Gras- Referenz [mm]	KWB FAO-Gras- Referenz [mm]
1997	655	575	80
1998	788	523	265
1999	689	576	113
2000	798	559	239
2001	726	566	160
2002	928	548	380
2003	570	643	-73
2004	694	573	121
2005	659	611	48
Mittelwert	723	575	148

Die grafische Darstellung der Daten aus Tab. 3.3 zeigt deutlich, dass insgesamt vier Jahre eine überdurchschnittliche Klimatische Wasserbilanz aufweisen. Die letzten drei Jahre des Untersuchungszeitraumes stellen hingegen Trockenjahre dar (Abb. 3.30).

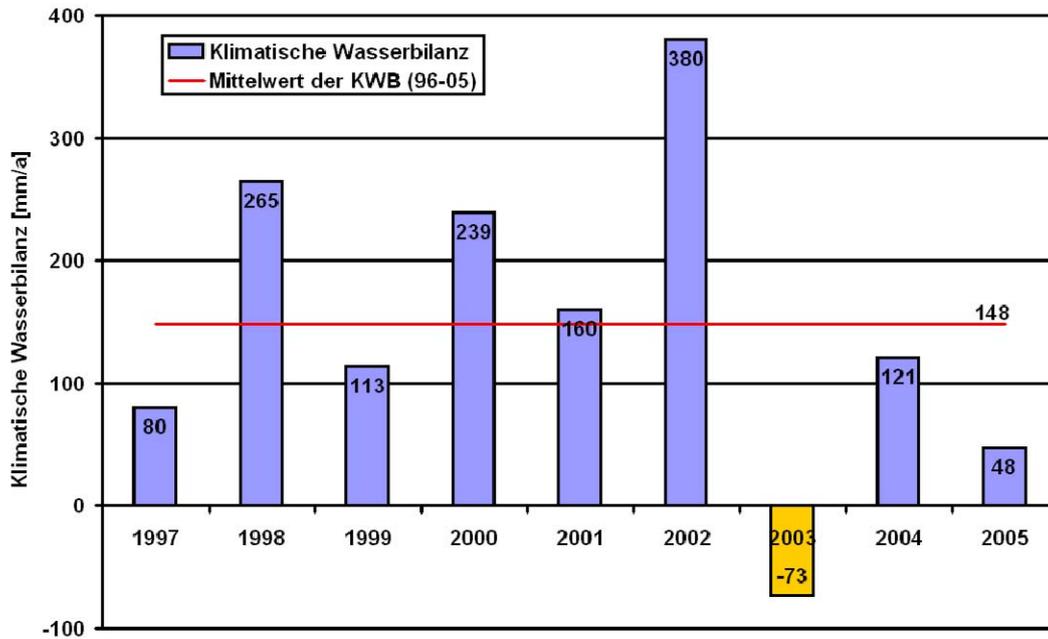


Abb. 3.30: Klimatische Wasserbilanz (FAO) der Hydrologischen Jahre 1997 bis 2005.

Abfluss

Der Abfluss stellt den dritten Teil des Wasserhaushaltes dar. Die Werra ist dabei der dominierende Vorfluter im Untersuchungsgebiet. Für den Zeitraum 1990 bis 2006 liegt der mittlere Abfluss am Pegel Heldra bei $38,4 \text{ m}^3/\text{s}$. Unterstromig zum Untersuchungsgebiet weist der Pegel Allendorf für diesen Zeitraum einen mittleren Abfluss von $43,3 \text{ m}^3/\text{s}$ auf. Die geringsten Abflüsse wurden im September 1991 mit $6,7 \text{ m}^3/\text{s}$ (Pegel Heldra) bzw. $9,8 \text{ m}^3/\text{s}$ (Pegel Allendorf) gemessen. Die maximalen Abflüsse wurden 1994 mit über $300 \text{ m}^3/\text{s}$ ermittelt (Datenquelle: <http://www.pegelonline.wsv.de>).

Des Weiteren existieren im Untersuchungsgebiet mehrere kleine Bäche, welche deutliche geringere Abflüsse aufweisen. Aufgrund eigener Messungen können folgende Angaben für die Abflüsse gemacht werden (Tab. 3.4):

Tab. 3.4: Abflussmesswerte [l/s] der Bäche (im Mündungsbereich) im Untersuchungsgebiet auf Basis von Messungen in verschiedenen Jahren.

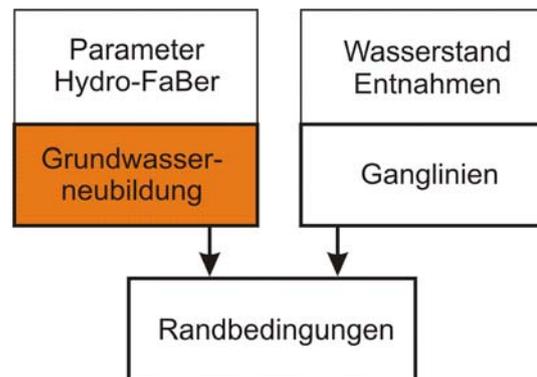
	2003	2004	2005	2006	2008	2009	2010
Wehre	310	580					
Frieda	210	420					
Mühlbach	150		110	220	160	100	120
Kellaer Bach				60	110	60	90
Schambach	15				40		
Dünzebach	1	1					

Im Vergleich zu den Abflussmengen der Werra weisen insbesondere der Schambach und der Dünzebach zu vernachlässigende Abflüsse auf. RAHBAR (1998) gibt für den Dünzebach Abflussmengen von 1,4 l/s im Bereich Niederdünzebach an. Zudem wird dieser geringe Abfluss auf eine Wasserentnahme durch örtliche Privatbrunnen und eine Kläranlage zurückgeführt.

3.3. Grundwasserneubildung

Unter Grundwasserneubildung wird der Zugang von in den Boden infiltriertem Wasser durch die ungesättigte Zone zum Grundwasser verstanden (DIN 4049-3). Gebräuchliche Begriffe sind die Grundwasserneubildungssumme [m^3/s] und Grundwasserneubildungshöhe [mm/a].

Erstere beschreibt das Volumen des auf einer bestimmten Fläche infiltrierten Wassers in einem bestimmten Zeitintervall. Die Grundwasserneubildungsrate [$\text{l}/(\text{s} \cdot \text{km}^2)$] wird auf eine definierte Fläche, das unterirdische Einzugsgebiet, bezogen.



Für die Beschreibung des Wasserhaushaltes bzw. die Berechnung der Grundwasserneubildung gibt es verschiedene Verfahren und Modellierungswerkzeuge. Als wichtigste sind hierbei u.a. zu nennen:

- ABIMO,
- SWAT,
- NASIM und
- TUB-BGR-Verfahren.

Mit Hilfe des ABIMO (AbflussBildungsMoDell) werden langjährige Mittel des Wasserhaushaltes und der Abflussbildung von Hydrotopen der Lockergesteinsbereiche ermittelt. Als Input dienen dabei Jahressummen, bspw. des Niederschlages. Der generierbare Output ist dabei zeitlich zu gering aufgelöst für eine hydrogeologische Modellierung (SCHMIDT ET AL. 2003). Das Modellierungswerkzeug SWAT (Soil and Water Assessment Tool) wurde im Wesentlichen zur Abschätzung des Einflusses von Landnutzungsveränderungen bzw. von Bewirtschaftungsmethoden auf den Wasser- und Stoffhaushalt entwickelt (NEITSCH ET AL. 2002, NEITSCH ET AL. 2005). Aufgrund der Ausrichtung dieses Werkzeuges z.B. auf Bewirtschaftungsmethoden und Bewirtschaftungstermine und des sehr differenziert benötigten Parameterumfangs wurde SWAT für die vorliegende Arbeit nicht verwendet.

Das Niederschlag-Ablfluss-SIMulations-Werkzeug NASIM der Fa. Hydrotec ist ein Niederschlags-Abfluss-Modell und benötigt ebenso zeitlich hochauflösende Werte (6-Minuten-Werte) und sehr detaillierte Kenntnis der Landnutzung mit, z.B. Wurzeltiefen und Interzeptionsspeicherungen (SCHMIDT ET AL. 2003). Aufgrund dieser hohen Anforderungen konnte dieses Werkzeug nicht im Rahmen der vorliegenden Arbeit genutzt werden.

Für die Berechnung der Grundwasserneubildungshöhe des untersuchten Talraums wurde das TUB-BGR-Verfahren nach WESSOLEK ET AL. (2005) gewählt. Mit Hilfe dieses Verfahrens kann die landnutzungs-, boden- und klimaspezifische Sickerwasserrate aus dem Boden ermittelt werden. Diese kann direkt in die jährliche Grundwasserneubildungshöhe umgerechnet werden (GROSSMANN 2006, GROSSMANN 2005, BLA-GEO 2008). Nach GOSSEL & WYCISK (2006) konnten anschließend Monatswerte der Grundwasserneubildung ermittelt werden, die für eine zeitlich hoch auflösende Modellierung notwendig sind.

Das TUB-BGR-Verfahren

Beim TUB-BGR-Verfahren handelt es sich um eine Weiterentwicklung des Ansatzes von RENGER & WESSOLEK (1990). Für die Entwicklung des Verfahrens mit Regressionsgleichungen wurden Standort-, Klima- und Nutzungsfaktoren zueinander in Beziehung gesetzt. Mit dem Input-Parameter FAO-Gras-Referenzverdunstung und der Niederschlagskorrektur nach RICHTER (1995) gilt für das Verfahren eine uneingeschränkte Übertragbarkeit auf alle Gebiete innerhalb Deutschlands (WESSOLEK ET AL. 2005).

Für die Umsetzung des TUB-BGR-Verfahrens wurden im GIS die Flächen mit gleichen Eigenschaften zu Hydrotopen (HRUs) zusammengeführt, für welche anschließend die Sickerwasserrate berechnet wurde. Für diesen Vorgang wurden die notwendigen Eigenschaften (Grundwasserflurabstand, nutzbare Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes, Landnutzung, korrigierter Niederschlag und Hangneigung) klassifiziert und jeweils mit einer ID versehen.

Als Input für die Klassifizierung des Grundwasserflurabstandes (Tab. 3.5) wurden für die Festgesteinsbereiche die Ergebnisse aus Kapitel 3.1 herangezogen. Für die Talauenbereiche wurde ein Mittelwert aus den vorhandenen Stichtagsmessungen errechnet. Die Werte für die fünf Klassen wurden in Anlehnung an die Einstufung der Grundwasserflurabstände in AD-HOC-AG-BODEN (2005) gewählt (Abb. 3.31). Der Grundwasserflurabstand wurde bei der Anwendung des TUB-BGR-Verfahrens vereinfacht als zeitlich konstant angesehen.

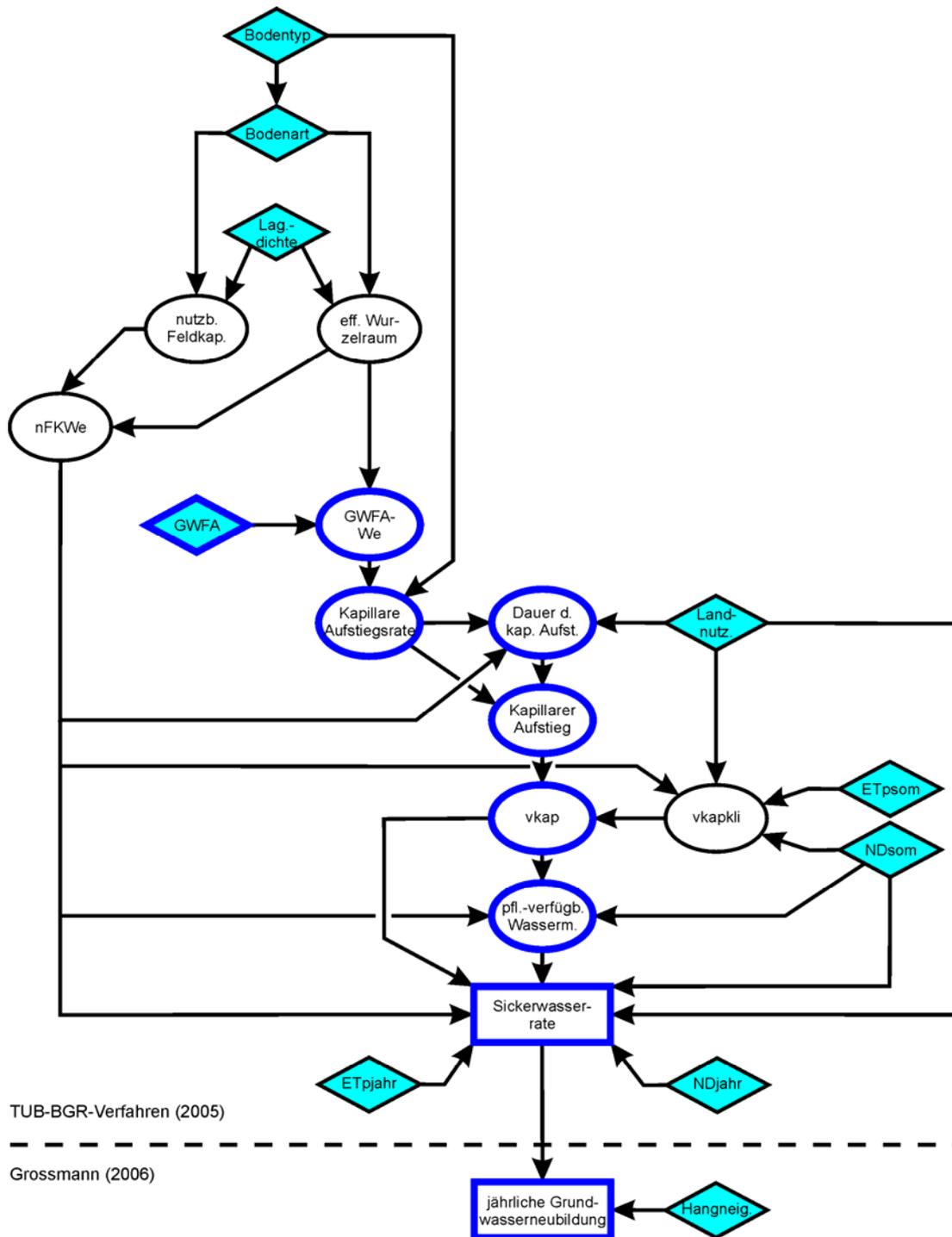


Abb. 3.31: Schema des TUB-BGR-Verfahrens mit den Bestandteilen, die erst mit Hilfe des Grundwasserflurabstandes berechnet werden können (blauer Rahmen).

Die Parameter nutzbare Feldkapazität, effektiver Wurzelraum und nutzbare Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes werden für die Berechnung der Sickerwasserrate nach WESSOLEK ET AL. (2005) benötigt und wurden aus Bodenart- (THÜRINGER LANDESAMT FÜR UMWELT UND GEOLOGIE 1996) und Bodentyp-Karten (HESSISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT UND GEOLOGIE 2002a, 2002b) abgeleitet.

Tab. 3.5: Klassifizierung des Grundwasserflurabstandes.

Klasse	GWFA [m u GOK]
1	< 0
2	0 bis 0,8
3	0,8 bis 1,5
4	1,5 bis 2,0
5	> 2,0

Nach AD-HOC-AG-BODEN (1994, 2005) können mittels Informationen über die Bodenart und die Lagerungsdichte zunächst die Parameter nutzbare Feldkapazität (nFK) und effektive Durchwurzelungstiefe (We) ermittelt werden. Durch Multiplikation dieser beiden Parameter ergibt sich die nutzbare Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes (nFKWe). Zudem wurde eine mittlere Lagerungsdichte (Ld3) angenommen. Die Ergebnisse der Klassifizierung der nFKWe für die Generierung der Hydrotope sind in Tab. 3.6 dargestellt.

Tab. 3.6: Klassifikation der nutzbaren Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes.

Klasse	nFKWe	We
1	< 50	< 4
2	50 bis 100	4 bis 8
3	100 bis 150	9 bis 10
4	150 bis 200	10 bis 11
5	200 bis 250	12
6	> 250	13

Mit dem Inputparameter der nFKWe konnte die Dauer des kapillaren Aufstieges (ta) aus dem Grundwasser ermittelt werden (Verknüpfungsregel VKR 1.17 in AD-HOC-AG-BODEN, 2000). Aus den Tabellenwerken von AD-HOC-AG-BODEN (2005) konnte zudem die mittlere kapillare Aufstiegsrate (KRWe) aus dem Grundwasser bis zur Untergrenze des effektiven Wurzelraumes (We) abgeleitet werden. Durch Multiplikation dieser beiden Parameter ergibt sich der Kapillare Aufstieg (KA) aus dem Grundwasser, welcher für die Berechnung der Sickerwasserrate nach WESSOLEK ET AL. (2005) benötigt wird.

Für die Generierung der nFKWe und des Kapillaren Aufstieges aus den Bodentyp-Karten (HESSISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT UND GEOLOGIE 2002a, 2002b) wurden durch Analyse der Bodengenese und des geologischen Untergrundes für die Bodentypen die jeweiligen Bodenarten abgeleitet. Für das TUB-BGR-Verfahren werden zudem Informationen über die Landnutzung benötigt (WESSOLEK ET AL. 2005).

Aufgrund der relativ gering differenzierten Einteilung in Acker, Grünland, Laub- und Nadelwald wurde bei der Digitalisierung der Landnutzungsinformationen vereinfachend auf die TK25 des Untersuchungsgebietes (HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT 1995a, 1995b, 1997 und THÜRINGER LANDESVERMESSUNGSAMT 1997) zurückgegriffen (Tab. 3.7).

Tab. 3.7: Klassifikation der Landnutzungen.

Klasse	Nutzung
2	Ortschaft
3	Wald
4	Gewässer
5	Landwirtschaftliche Flächen
6	Steinbruch

Aufgrund einer sich zunächst ergebenden, zu hohen Anzahl der Hydrotope wurden die Klassen der Niederschlagskorrektur und der Hangneigung auf jeweils drei Klassen reduziert. Die primär entstandenen, 730 Hydrotope hätten bei der Weiterverarbeitung im FEFLOW® einen unverhältnismäßig hohen Aufwand verursacht. Die Niederschlagsklassen 3 (Korrektur + 30 %) und 4 (+ 60 %) wurden zur neuen Klasse 5 (+ 45 %) zusammengefasst (Tab. 3.8). Bei der Hangneigungskorrektur wurden die Klassen 2 (Hangneigung 3 bis 7 %) und 3 (7 bis 10 %) zur Klasse 7 vereinigt. Die Klassen 3 bis 5 bilden nach der Reduzierung die Klasse 8 mit einer Hangneigung >10 % (Tab. 3.9).

Tab. 3.8: Klassifikation der Niederschlagskorrektur, die Korrektur erfolgte anhand der erstellten Regressionsgleichungen.

Klasse	Korrektur
1	- 20 %
2	± 0 %
5	+ 45 %

Tab. 3.9: Klassifikation der Hangneigungen und der zugehörigen Ermittlung der Grundwasserneubildung aus der Sickerwasserrate.

Klasse	Hangneigung	GWN=% Sickerwasserrate
1	< 3 %	100
7	3 bis 10 %	63
8	> 10 %	44,3

Für die einzelnen Parameter (Grundwasserflurabstand, nutzbare Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes, Landnutzung, Niederschlagskorrektur, Hangneigung) wurden im ArcGIS Polygon-Shapes angelegt und in den zugehörigen Tabellen die jeweiligen IDs eingetragen. Durch Verschneidung der fünf Themen und anschließende Eliminierung der Splitterpolygone (Fläche kleiner als eine Rastereinheit, 400 m^2) entstanden insgesamt 10.897 Elementarflächen, die sich auf 235 Hydrotope verteilen. Des Weiteren wurden alle Siedlungsflächen (versiegelt) zu einem Hydrotop zusammengefasst. Der gleiche Vorgang wurde für sämtliche Wasserflächen durchgeführt.

Die Sickerwasserrate für die versiegelten Flächen wurde nach BERLEKAMP & PRANZAS (1992) vereinfacht abgeschätzt. Zeitliche Veränderungen des Versiegelungsgrades durch Staubeintrag und Befahrungen, wie in WESSOLEK & FACKLAM (1997) beschrieben, konnten nicht integriert werden. Die hydraulischen Eigenschaften der Kleinst-Flächen, wie Straßen, Parkplätze und dergleichen waren aufgrund mangelnder Daten nicht separat erfassbar. Ebenso konnten die von BERLEKAMP & PRANZAS (1992) betrachteten Wohnnutzungen (Zeilenbebauung, Hochhausbebauung usw.) nicht ausgehalten werden. Für die versiegelten Flächen wurde nach Vorgabe der o.g. Autoren pauschal eine Grundwasserneubildung von 10 % des Jahresniederschlages in die Berechnungen integriert. Für die Modellierung des Modellgebietes genügt dieser Ansatz den Anforderungen und entspricht von der Datengüte etwa den Berechnungen der Grundwasserneubildung nach der Hydrotop-Klassifikation.

Für jedes sich ergebende Hydrotop wurde nach dem TUB-BGR-Verfahren die Sickerwasserrate berechnet. Als Flächen-Stammdaten wurden folgende, z.T. vereinfacht als konstant angesehene Parameter ermittelt:

- nutzbare Feldkapazität des effektiven Wurzelraumes ($nFKWe$),
- effektiver Wurzelraum (We),
- Abstand zwischen Grundwasseroberfläche und dem effektiven Wurzelraum,
- Kapillare Aufstiegsrate (KR),
- Dauer des Kapillaren Aufstiegs (ta) und
- mittlerer Kapillarer Aufstieg (KA).

Im Anschluss wurden für jedes Jahr der Jahresniederschlag (ND), der Sommerniederschlag (ND_{Som}), die Gras-Referenzverdunstung, die sommerliche Gras-Referenzverdunstung, der kapillare Aufstieg ($vkap$), die klima- und nutzungsspezifische Begrenzung des kapillaren Aufstieges ($vkapkli$) und die pflanzenverfügbare Wassermenge (WV) berechnet. Nach den Gleichungen von WESSOLEK ET AL. (2005) wurde die Sickerwasserrate aus dem Boden ermittelt.

Durch die vorhergehende Integration der Hangneigung in die Hydrotop-ID konnte vereinfacht nach GROSSMANN (2006) die jährliche Grundwasserneubildungshöhe berechnet werden. Bei definiertem Hangneigungswinkel wird dabei der Oberflächenabfluss prozentual bezüglich des Sickerwassers angegeben. Auf gleichem Weg kann die Grundwasserneubildung als Prozentangabe der Sickerwasserrate ermittelt werden. Die Sickerwasserrate gibt einen Maximalwert der Grundwasserneubildung an, der bei einer Hangneigung <3 % erreicht wird. Bei größeren Hangneigungen erhöht sich der prozentuale Abschlag der Sickerwasserrate.

Für die hydrogeologische Modellierung werden üblicherweise Monatswerte der zeitlich veränderlichen Parameter (Grundwasserneubildung, Wasserentnahmen, künstliche Grundwasseranreicherungen) benötigt. Um die Jahreswerte der Grundwasserneubildung in Monatswerte zu überführen, wurde auf das Verfahren von GOSSEL & WYCISK (2006) zurückgegriffen.

$$ETr_{Jahr} = ND_{Jahr} - SWR_{Jahr} \quad (\text{Gl. 3.6})$$

$$ET_{Monatsfaktor} = \frac{ETr_{Jahr}}{ETp_{Jahr}} \quad (\text{Gl. 3.7})$$

$$ETr_{Monat} = ETp_{Monat} \cdot ET_{Monatsfaktor} \quad (\text{Gl. 3.8})$$

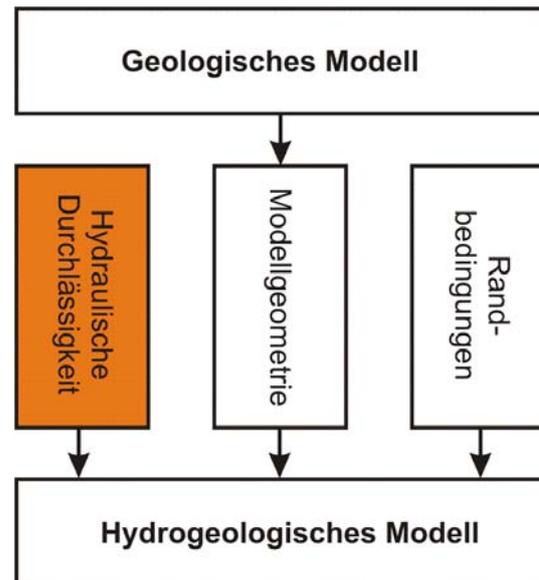
$$SWR_{Monat} = ND_{Monat} - ETr_{Monat} \quad (\text{Gl. 3.9})$$

$$GWN_{Monat} = SWR_{Monat} \cdot \text{Hangneigungskorrekturfaktor} \quad (\text{Gl. 3.10})$$

Zunächst wurde mit Gleichung 3.6 aus der mit dem TUB-BGR-Verfahren berechneten, jährlichen Sickerwasserrate SWR_{Jahr} und dem Jahresniederschlag ND_{Jahr} die reale Evapotranspiration ETr_{Jahr} des betreffenden Jahres berechnet. Mit dem in Gleichung 3.7 berechneten Monatsfaktor der potentiellen Evapotranspiration konnte mit Gleichung 3.8 die reale, monatliche Evapotranspiration ETr_{Monat} abgeschätzt werden. Diese kann mit dem Input der monatlichen Niederschlagsmenge ND_{Monat} in die monatliche Sickerwasserrate SWR_{Monat} umgerechnet werden (Gleichung 3.9). Die monatliche Grundwasserneubildung GWN_{Monat} wurde anschließend mit Gleichung 3.10 nach GROSSMANN (2006) mittels eines Korrekturfaktors für die Hangneigung ermittelt. Die Grundwasserneubildung ist somit auch von der Hangneigung abhängig (vgl. SCHILLING 2009).

3.4. *Hydraulische Durchlässigkeit*

Die hydraulischen Durchlässigkeiten der geologischen Einheiten im Modellgebiet wurden durch Anwendung verschiedener Methoden ermittelt. Die vertikalen kf-Werte des Auenlehms wurden mit Hilfe von zehn Doppelring-Infiltrationen im Gelände bestimmt. In einer weiteren Infiltration wurde die Durchlässigkeit der Buntsandstein-Deckschichten abgeschätzt. Zudem wurden Durchlässigkeitsversuche an Bohrkernen des Buntsandsteins sowie Slug- & Bail-Tests und Pumpversuche im quartären Aquifer durchgeführt.



Die ermittelten, vertikalen kf-Werte des Auenlehms liegen in einer Bandbreite zweier Zehnerpotenzen. Der Maximalwert wurde für die Infiltration bei Jestädt (RW: 3570880, HW: 5675667) mit $7,4 \cdot 10^{-5}$ m/s berechnet. Der minimale Wert ergab sich für eine Untersuchung nahe GW7 (RW: 3574310, HW: 5673880) mit $5,8 \cdot 10^{-7}$ m/s.



Abb. 3.32: Aufbau des Doppelring-Infiltrometers 100m westlich der Messstelle B6.

Nahe den Messstellen GW7, Teich 4200 (östlich von Aue) bzw. B6 wurden je zwei Infiltrationen durchgeführt, um die Repräsentativität der vorgenommenen Messungen zu überprüfen (siehe Tab. 3.10).

Tab. 3.10: Übersicht der Ergebnisse der Doppelring-Infiltrationen.

	Rechtswert	Hochwert	Vertikaler kf-Wert [m/s]
GW7 (2)	3574310	5673880	$5,8 \cdot 10^{-7}$
B6 (1)	3576578	5674192	$1,3 \cdot 10^{-6}$
B6 (2)	3576578	5674205	$6,1 \cdot 10^{-6}$
Hy ESW 02/02	3575570	5674470	$6,4 \cdot 10^{-6}$
Frieda 05	3578666	5673067	$7,3 \cdot 10^{-6}$
Schambach (Buntsandstein)	3572750	5677430	$1,2 \cdot 10^{-5}$
Teich 4200 (2)	3579800	3573342	$1,2 \cdot 10^{-5}$
Großes Wehr	3574637	5673312	$1,6 \cdot 10^{-5}$
GW7 (1)	3574310	5673880	$2,2 \cdot 10^{-5}$
Teich 4200 (1)	3579790	5673349	$5,5 \cdot 10^{-5}$
Jestädt	3570880	5675667	$7,4 \cdot 10^{-5}$

In den Jahren 2007 und 2008 wurden insbesondere nahe der Messstelle B6 weitere Infiltrationen durchgeführt. Die Ergebnisse der kf-Wert-Auswertungen schwankten dabei zwischen $1,2 \cdot 10^{-5}$ und $5,5 \cdot 10^{-6}$ m/s. Diese Werte lagen somit ebenfalls im allgemeinen Schwankungsbereich der bereits zuvor ermittelten vertikalen kf-Werte des Auenlehms. Die räumlich hohe Heterogenität der ermittelten kf-Werte und die somit einhergehende hohe Heterogenität der Durchlässigkeit des Auenlehms ließ eine flächenhafte Interpolation dieser Werte nicht zu. Stattdessen wurde im ersten Modellierungsschritt ein mittlerer, vertikaler kf-Wert von $5 \cdot 10^{-6}$ m/s in das Modell integriert.

Für die hydraulische Beschreibung des Buntsandsteins wurden zwei horizontale Bohrkerne (Solling-Formation, Volpriehausen-Formation) im Untersuchungsgebiet gewonnen und die jeweiligen kf-Werte dieser Proben im Labor bestimmt. Die Probenahme der Solling-Formation erfolgte an einem Straßenaufschluss zwischen Grebendorf und Neuerode (Rechtswert: 3573945, Hochwert: 5676495). Die Richtung der horizontalen Bohrung betrug 340/00. Die Probe der Volpriehausen-Formation wurde einem Steinbruch (Rechtswert: 3572295, Hochwert: 5677155) im Schambach-Tal entnommen. Die Bohrrichtung betrug etwa 300/00. Die laborative Bestimmung der kf-Werte erfolgte mit Hilfe der Wasserdurchlässigkeitsprüfanlage D 5310 der Fa. Wille Geotechnik. Zunächst wurde die Durchlässigkeit beider Proben mit einer konstanten Druckdifferenz von 0,6 bar (Einlass: 2,6 bar, Auslass: 2,0 bar) getestet. Aufgrund der hohen Durchlässigkeit der Solling-Probe wurde für diese die Druckdifferenz auf 0,2 bar bzw. 2,04 m Drucksäule reduziert. Für die gering durchlässige Probe der Volpriehausen-Formation wurde der Druck auf 1,5 bar bzw. 15,3 m erhöht, um die Versuchsdauer zu reduzieren.

Der Bohrkern der Volpriehausen-Formation ist ein roter Fein- bis Mittelsandstein, ohne optisch erkennbares Bindemittel. Hingegen wies der graue Sandstein der Solling-Formation sowohl große Poren als auch Porenfüllungen mit braunen Eisenoxiden auf. Für beide Bohrkern wurden je zwei Messungen mit unterschiedlichen Druckdifferenzen durchgeführt. Der ermittelte k_f -Wert der Volpriehausen-Probe lag dabei zwischen $7,4 \cdot 10^{-9}$ und $4,9 \cdot 10^{-9}$ m/s. Beide Werte sind als nicht repräsentativ für den Großteil der Volpriehausen-Formation anzusehen. Der Bohrkern der Solling-Formation wies hingegen mit k_f -Werten um $9 \cdot 10^{-5}$ m/s sehr hohe Werte auf. Aufgrund der Exposition der Solling-Sandsteine im Aufschluss wurden die Wasserwegsamkeiten sekundär erhöht und die ermittelten Werte wurden somit nicht in die hydrogeologische Modellierung einbezogen.

Durchlässigkeiten des Talraum-Aquifers

Die Durchlässigkeiten des Kies-Aquifers konnten durch Pumpversuche und Slug-&-Bail-Tests ermittelt werden. Aufgrund des guten Ausbaus und der nötigen Fördermengen wurde bei den Pumpversuchen auf drei verschiedene Messstellenketten zurückgegriffen, deren bepumpte Messstelle jeweils einen 5“-Durchmesser aufwies. Die gewählten Messstellenketten waren bei B2, B3 und B6. Die Auswertungen erfolgten nach THEIS (1935) und COOPER & JACOB (1946). An insgesamt 19 Messstellen wurden Slug-&-Bail-Tests bzw. Pumpversuche durchgeführt. Aufgrund einer Zehntel-Sekunden-Abtastung des Datenloggers konnten im Kies-Aquifer die Slug-&-Bail-Tests sinnvoll durchgeführt werden. Die Auswertung erfolgte nach HVORSLEV (1949, 1951). Dieses Verfahren wurde ursprünglich für Sande entwickelt. Vergleichsweise wurden deshalb einzelne Versuche nach BOUWER & RICE (1976) bzw. BOUWER (1989) ausgewertet. Beide Verfahren lieferten ähnliche und plausible Ergebnisse. Aufgrund der hohen insitu- k_f -Wert-Datendichte wurde auf weitere k_f -Wert-Bestimmungen z.B. nach BEYER (1964) oder HAZEN (1892) aus Kornsummenkurven verzichtet.

Eine vertikale Differenzierung der k_f -Werte des Talraum-Aquifers konnte nicht durchgeführt werden, da dies weder mit den Messstellen, noch mit den Datengewinnungs-Verfahren oder durch die Bohrdaten möglich war. Die Analyse der Bohrdaten hinsichtlich eines vertikalen Trends der Korngrößen erbrachte keine signifikanten Ergebnisse und somit konnten keine Verallgemeinerungen über das vertikale Profil innerhalb des Talraum-Aquifers abgeleitet werden.

Bei der Interpolation der k_f -Werte des Talraum-Aquifers konnte auf insgesamt 27 Werte für die hydraulische Durchlässigkeit (k_f -Werte aus Slug-&-Bail-Tests, Transmissivitäten aus Pumpversuchen) zurückgegriffen werden. Von den 27 Werten wurden insgesamt acht aus THOM (1992) und RAHBAR (1998) entnommen. Die übrigen

19 Werte für die hydraulische Durchlässigkeit (k_f , T) wurden aus eigenen Pumpversuchen und Slug-&-Bail-Tests ermittelt.

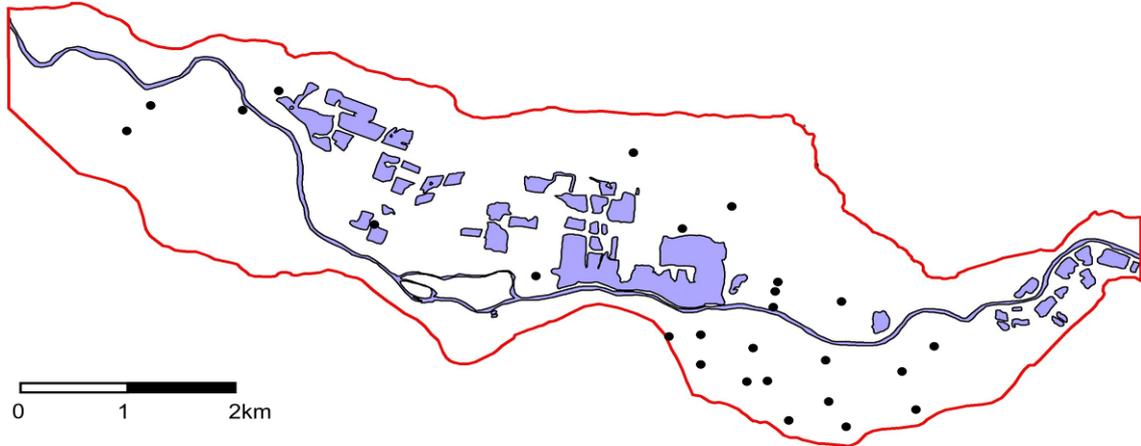


Abb. 3.33: Lage der Messpunkte (k_f -Wert) im Verbreitungsgebiet des quartären Aquifers, die zur Ableitung der zusätzlichen k_f -Wert-Stützpunkte verwendet wurden.

Für die Interpolation der k_f -Werte mittels Surfer® waren weitere Stützpunkte für den Randbereich nötig, um das Interpolationsverfahren Kriging zu unterstützen. Diese Stützpunkte wurden nach der statistischen Bestimmung des k_f -Wertes der roten Linie in Abb. 3.33 zugewiesen. Es wurde die These aufgestellt, dass der k_f -Wert des Kieses zum Rand der Talaue hin geringer wird, da dort zum Ablagerungszeitpunkt vermutlich weniger Bewegungsenergie herrschte und somit feineres Material abgelagert wurde. Diese These wurde statistisch überprüft. Der Abstand zum Rand der Talaue wurde im ArcView ermittelt und mit dem k_f -Wert exportiert.

Die Regressionsanalyse in Abb. 3.34 wurde auf eine maximale Entfernung des Messwertes zum Festgestein von 750 m begrenzt. Bei einer Gesamtbreite von etwa 2 km des Talraum-Aquifers wurde postuliert, dass im Zentrum des Ablagerungsraumes (500 m-Korridor) keine Beeinflussung der Schüttung durch das Ablagerungsmilieu vorhanden ist und die sich ergebenden k_f -Werte zufällig und nicht vom Abstand zum Auenrand abhängig sind. Als relevant verblieben vom Talauenrand betrachtet, somit jeweils 750 m Talaue für die Regressionsanalyse. Dadurch reduzierte sich die Anzahl der Messwerte auf 19. Mit Hilfe der Regressionsanalyse wurde für die im Talraum von Eschwege ermittelten 19 Werte der hydraulischen Durchlässigkeit, die sich näher als 750 m Entfernung zum Talauenrand befinden, die Beziehung zwischen ihrer Größe und der Entfernung ihres Messpunktes zum Festgestein bzw. zum Rand des Ablagerungsraumes untersucht.

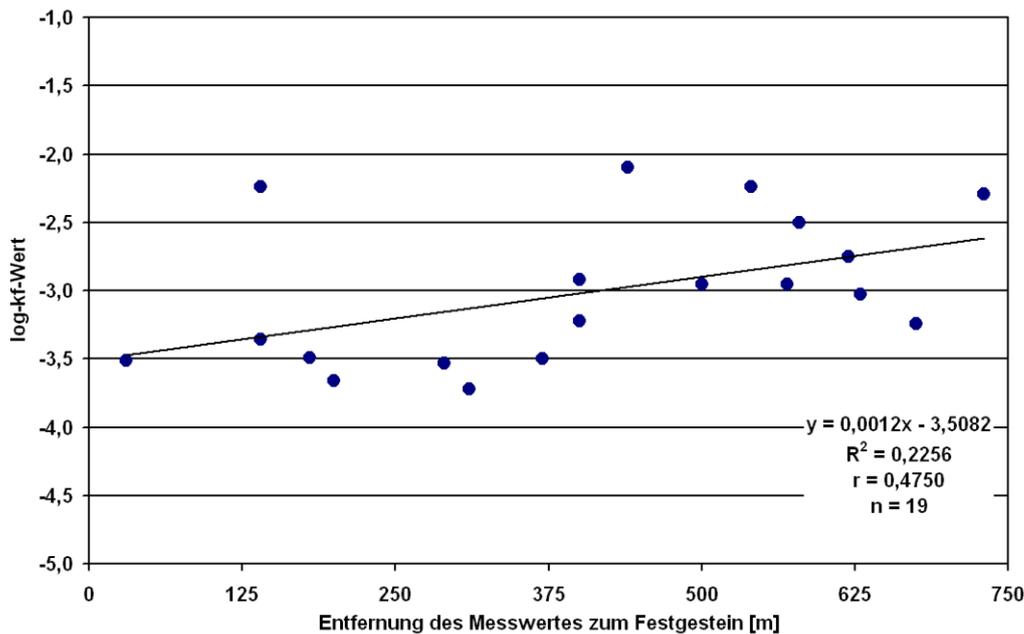


Abb. 3.34: Regressionsanalyse des Zusammenhangs zwischen den kf-Werten des Talraum-Aquifers und der Entfernung der Messwerte zum Rand der Talaue (Festgestein).

Es ergibt sich bei logarithmischem Input der kf-Werte ein Bestimmtheitsmaß von $R^2=0,2256$, was einem Korrelationskoeffizienten von $r=0,4750$ entspricht. Bei der Auswertung nach dem t-Test der Korrelation entspricht dies bei einem Stichprobenumfang von $n=19$ einer getesteten Irrtumswahrscheinlichkeit (Signifikanzniveau) von $\alpha=5\%$. Für die Ermittlung der Signifikanz wurde der einseitige Test gewählt, da die gerichtete (einseitige) Hypothese bestand, dass der kf-Wert vom Zentrum des Ablagerungsraumes zum Auenrand hin abnimmt.

Der Schnittpunkt der Regressionsgeraden mit der Ordinate liegt bei $-3,5082$ (Abb. 3.34) und repräsentiert somit den statistisch abgeleiteten, logarithmierten kf-Wert des quartären Talraum-Aquifers am Rand der Talaue (Entfernung 0 m). Mit diesem kf-Wert von $kf=10^{-3,5082}$ m/s bzw. $3,1 \cdot 10^{-4}$ m/s wurden Stützpunkte entlang der Grenze zwischen Talraum-Aquifer und Festgestein belegt, um die mit Kriging durchgeführte Interpolation der kf-Werte für das Untersuchungsgebiet zu unterstützen und zu optimieren.

Die Anwendung des Interpolationsverfahrens Kriging setzt normal verteilte Daten voraus. Der Test der primären Eingangsdaten (27 Werte für die hydraulische Durchlässigkeit) ergab nach dem Kolmogorov-Smirnov-Test eine Normalverteilung für diesen Datensatz (Tab. 3.11). Zur Unterstützung der Interpolation wurden Randstützpunkte an der Außengrenze der zu interpolierenden Fläche (Verbreitung des Kies-Aquifers im Talraum) gesetzt. Aufgrund der statistisch begründeten Erweiterung des Datensatzes weisen die erweiterten Datensätze sowohl im westlichen (3) als auch

im östlichen Talraum (4) keine Normalverteilung auf (Tab. 3.11). Da der ursprüngliche, logarithmierte Datensatz (1) normal verteilt ist und die Interpolation durch die Integration zusätzlicher Stützpunkte verbessert wird, kann man davon ausgehen, dass zur Interpolation der kf-Werte im Bereich des Talraum-Aquifers das Interpolationsverfahren Kriging genutzt werden kann. Nach HINTERDING ET AL. (2003) ergeben sich jedoch bei nicht normal verteilten Datensätzen Probleme bei der Variogrammermittlung, weil der klassische Variogrammschätzer in diesem Fall schlechte Ergebnisse liefert.

Die Interpolation der horizontalen kf-Werte des Talraum-Aquifers erfolgte im Programm Surfer® mit dem Verfahren Kriging. Als Besonderheit ist die räumlich zweigeteilte Interpolation zu nennen. Aufgrund der Biegung des Talraums im Osten des Untersuchungsgebietes war es nötig, unterschiedliche Anisotropie-Richtungen zu berücksichtigen. Deshalb wurde das Untersuchungsgebiet in einen östlichen und einen westlichen Bereich geteilt, für die getrennt interpoliert wurde. Durch die Integration von Anisotropien wurde eine Optimierung der Ergebnisse erreicht, so dass die Zonierung der kf-Wert-Verteilung nachgebildet werden konnte. Durch die geologische Interpretation des Verlaufes des Talraums konnte der Verlauf der hochdurchlässigen Kiese im Zentralbereich des Talraums abgeschätzt werden. Im westlichen Talraum wurde dieser Verlauf mit einer Anisotropie von 1:2 bei einem Winkel von 290° (WNW) und im östlichen Talraum mit einer Anisotropie von 1:2 bei einem Winkel von 60° (ENE) beschrieben. Die sich ergebenden Variogramme sind in Abb. 3.35 dargestellt.

Tab. 3.11: Test auf Normalverteilung (Kolmogorov-Smirnov-Test) der Daten, die der kf-Wert-Interpolation zugrunde liegen.

untersuchte Größe		Test auf Normalverteilung entsprechend dem K-S-Test erfüllt (asympt. Signifikanz)
(1)	kf-Werte (logarithmiert, gesamt) ohne Randstützpunkte	ja (0,779)
(2)	kf-Werte (nicht logarithmiert, gesamt) ohne Randstützpunkte	nein (0,035)
(3)	kf-Werte (logarithmiert, Westen) mit Randstützpunkten	nein (0,000)
(4)	kf-Werte (logarithmiert, Osten) mit Randstützpunkten	nein (0,000)

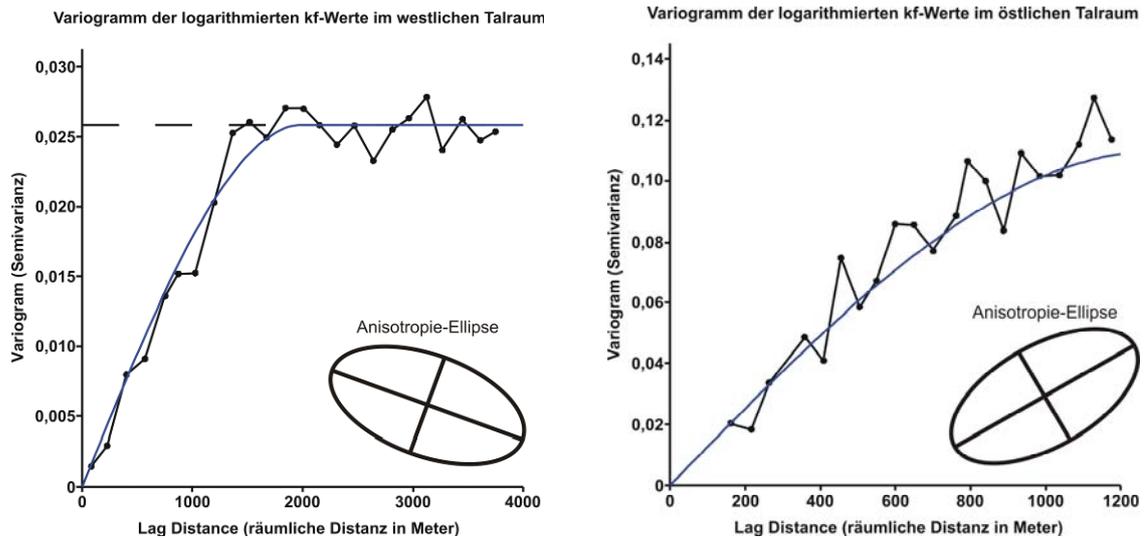


Abb. 3.35: Variogramm der logarithmierten kf-Werte im westlichen Talraum, bis Rechtswert=3578200 und rechts der logarithmierten kf-Werte im östlichen Talraum, bei Rechtswerten größer als 3578200.

Tab. 3.12: Übersicht über die Parameter zu den in Abb. 3.35 dargestellten Variogrammen.

	westl. Talraum	östl. Talraum
Anzahl der relevanten Daten (incl. der zusätzlichen Stützpunkte)	484	134
Anisotropie	1:2	1:2
Richtung Hauptachse	290° (WNW)	60° (ENE)
Toleranz	45°	45°
Maximale Lag-distance	4000 m	1300 m
Anzahl der Klassen (Lags)	25	25
Sill	0,02585	0,11
Range	2000	1300
Nugget Effect	0	0
<u>statistische Parameter zum Datensatz</u>		
Schiefe	4,761	3,092
Standardfehler der Schiefe	0,125	0,225
Kurtosis	23,897	8,165
Standardfehler der Kurtosis	0,249	0,446
Mittelwert (logarithmiert)	-3,469	-3,422
Standardabweichung	0,177	0,279
Schiefe (ohne Randstützpunkte)	-0,065	-1,310
Standardfehler der Schiefe (o. R.)	0,441	0,661
Kurtosis (ohne Randstützpunkte)	-0,511	4,341
Standardfehler der Kurtosis (o. R.)	0,858	1,279

Nach Durchführung der Interpolationen für die beiden Talbereiche wurde in deren Übergangsbereich zueinander ein Puffer von 400 m definiert, in dem der Übergang der beiden Talrichtungen ineinander stattfindet. Die interpolierten kf-Werte dieses 400 m-Puffers wurden verworfen und durch eine weitere Interpolation (Triangulation) mit den Ergebnissen der Interpolationen des westlichen und östlichen Talbereiches neu generiert. Dieser Arbeitsschritt führte zu einer Glättung und Optimierung des Interpolationsergebnisses im Knickbereich des Tales bei der Ortschaft Aue.

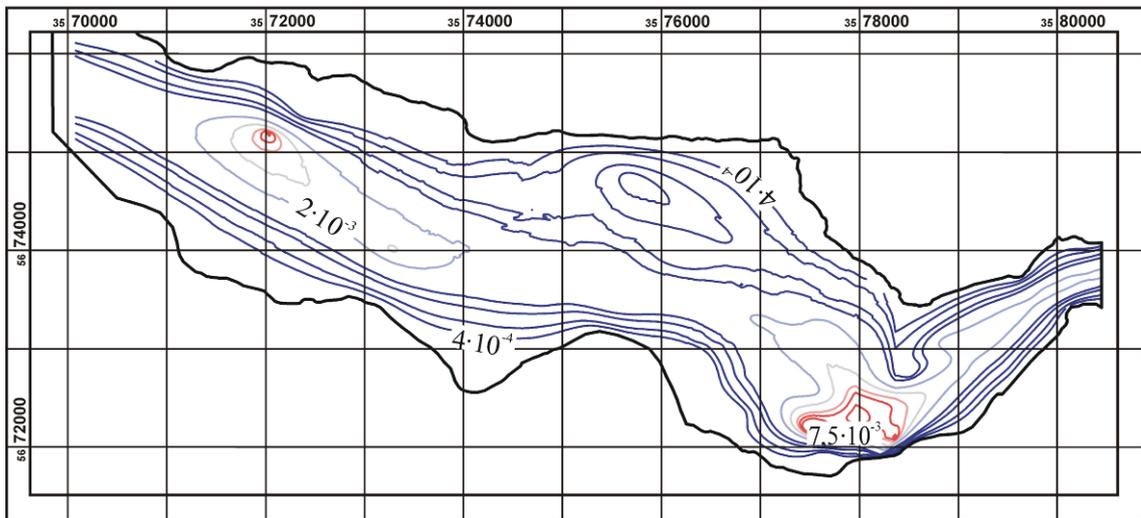


Abb. 3.36: Kf-Wert-Verteilung des Kies-Aquifers im Modellgebiet nach beschriebener Interpolationsmethodik.

Anschließend wurden die vertikalen kf-Werte aus den (interpolierten) horizontalen berechnet. Dabei wurde ein Standard-Verhältnis für geschichtete, fluviatile Sedimente von $k_{fh}:k_{fv}=10:1$ angenommen (u.a. BUSCH ET AL. 1993). Diese Werte und Pauschalannahmen der Durchlässigkeit der anderen geologischen Schichten wurden mittels eines C++-Skriptes an die Lageinformationen der Einheiten geknüpft (siehe Kap. 3.5).

3.5. *Überführung der geologischen Strukturen in ein hydrogeologisches Strukturmodell*

Die modellierten, geologischen Einheiten müssen für die hydrogeologische Modellierung umformatiert werden. Für die Integration der Einheiten müssen 3 Voraussetzungen erfüllt sein:

- die Schichten müssen durchgehend verbreitet sein,
- die einzelnen geologischen Einheiten müssen für die hydrogeologische Modellierung dreigeteilt werden und

- die hydrogeologischen Einheiten müssen eine definierte Mindestmächtigkeit aufweisen. In der vorliegenden Arbeit wurde für diese Mindestmächtigkeit 30 cm gewählt.

Im ersten Arbeitsschritt wurden die generierten Schichtdaten aus GSI3D® als ASCII-Daten exportiert. Das Exportformat umfasst dabei nur die Rasterpunkte, an denen die Schicht auch verbreitet ist. Zur Aufwands- und Rechenzeitminimierung wurde die Anzahl der Einheiten reduziert. Die hydraulisch ähnlichen Einheiten Auenlehm und Abschwemmassen wurden zu einer hydrogeologischen Schicht zusammengefasst. Der gleiche Vorgang wurde für den Mittleren und Unteren Buntsandstein durchgeführt. Aufgrund seiner geringen Ausdehnung wurde das Basaltvorkommen Blaue Kuppe bei der hydrogeologischen Modellierung nicht beachtet.

Für die hydrogeologische Modellierung in FEFLOW® müssen die sechs Haupteinheiten nochmals untergliedert werden (Abb. 3.37). Im Bereich des Übergangs zweier geologischer Einheiten müssen aufgrund der internen kf-Wert-Interpolation in FEFLOW® Hilfsschichten integriert werden.

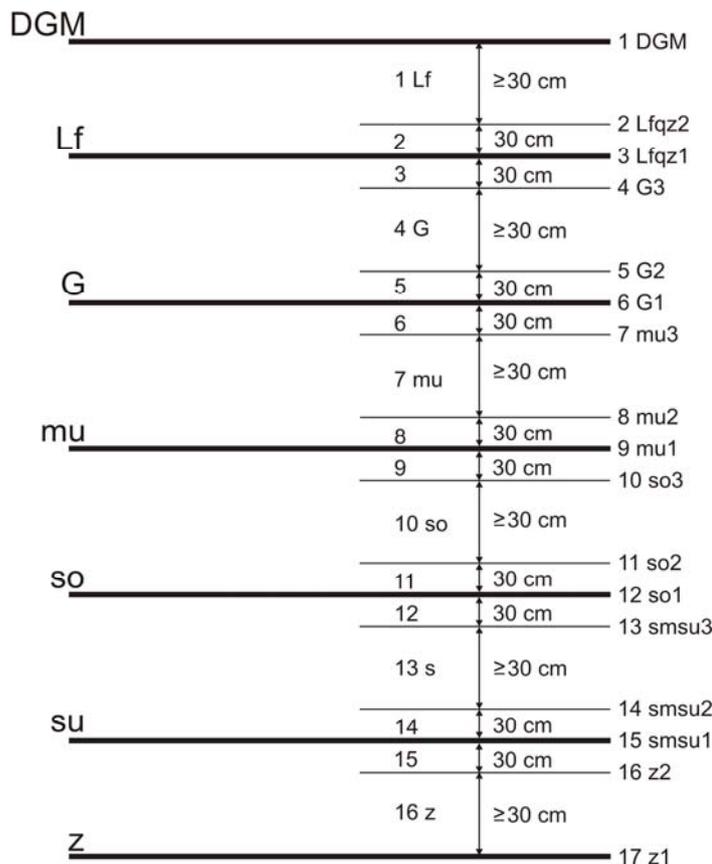


Abb. 3.37: Zielsetzung für die Generierung der hydrogeologischen Einheiten (Mindestmächtigkeit 30 cm) aus den geologischen Einheiten mittels eines C++-Programms.

Innerhalb einer hydrogeologischen Schicht wird dabei der vertikale kf-Wert graduell an die folgende Schicht angepasst. Diese programminterne Vorgabe muss bei der Modellierung beachtet werden. Mathematisch betrachtet, ermittelt FEFLOW® die vertikalen kf-Werte durch ein arithmetisches Mittel der kf-Werte der betreffenden Schichten.

$$\bar{x}_{arithm} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (\text{Gl. 3.11})$$

Im Fall von FEFLOW® wird der Mittelwert aus 2 Werten (2 Schichten) berechnet. Daher kann die Gleichung aus der allgemeinen Form für n=2 umgeformt werden.

$$\bar{x}_{arithm} = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^2 x_i = \frac{1}{2} \cdot (x_1 + x_2) \quad (\text{Gl. 3.12})$$

Für eine beispielhafte kf-Wert-Annahme mit $x_1 = kf_1 = 10^{-7}$ und $x_2 = kf_2 = 10^{-3}$ m/s ergibt sich:

$$\bar{x}_{arithm} = \frac{1}{2} \cdot (10^{-7} + 10^{-3}) = 5,0005 \cdot 10^{-4} \text{ m/s} \quad (\text{Gl. 3.13})$$

Dieser berechnete kf-Wert ist im Modellierungswerkzeug gültig, um den Wasserfluss von einer Schicht in die nächstfolgende zu ermitteln. Aufgrund der eingeführten Zwei- bzw. Dreiteilung der Einheiten im hydrogeologischen Modell werden die jeweils berechneten kf-Werte allen relevanten Teilschichten zugewiesen. Durch diesen Arbeitsschritt wird durch die kf-Wert-Mittelwertbildung nur der kf-Wert der dünnen, oben und unten an die Hauptschicht angrenzenden Randschichten verändert (Abb. 3.37). In der mächtigeren Hauptschicht der Dreiteilung bleibt der kf-Wert unverändert, da der Mittelwert aus gleichen Werten gebildet wird.

Durch Integration von Mindestmächtigkeitschichten (Erfahrungswert: 30 cm) wird dieser kf-Wert-Übergang auf diese Schichten begrenzt und die mächtigeren Hauptschichten erhalten durchgehend den zutreffenden kf-Wert. So werden z.B. zunächst den Schichten 6 bis 8, welche den Unteren Muschelkalk (mu) charakterisieren, die richtigen kf-Werte zugewiesen. Im Übergangsbereich zum unterlagernden Oberen Buntsandstein (so) wird der kf-Wert in der untersten Muschelkalk-Schicht (Schicht 8) angepasst, aber der Hauptanteil des Muschelkalkes (Schicht 7) bleibt unverfälscht, da direkt ober- und unterhalb Schichten mit identischem kf-Wert angrenzen (siehe Abb. 3.37).

Durch die Einführung der Dreiteilung und der Mindestmächtigkeit der hydrogeologischen Einheiten entspricht deren Verlauf nicht mehr der Verbreitung der modellierten, geologischen Einheiten (Abb. 3.38). Dies muss bei der Zuweisung der kf-Werte zu den hydrogeologischen Einheiten berücksichtigt werden. Für die automatisierte Zuweisung der kf-Werte wurde im C++-Skript jeder Modell-Rasterpunkt einzeln analysiert. Für jeden Mittelpunkt aller Teilschichten des hydrogeologischen Modells wurde festgestellt, in welcher Schicht des geologischen Modells sich dieser befindet.

Die drei erwähnten Umformatierungen wurden in einem Arbeitsschritt mittels eines C++-Programms automatisiert umgesetzt. Im ersten Teil des Programms erfolgten das Einlesen der einzelnen Schichten und die Ablage der Informationen ihrer Raumlage in Variablen. Als weiterer, nötiger Input wurden die digitalen Geländeinformationen eingelesen. Die weitere Verarbeitung erfolgte getrennt für jeden einzelnen Rasterpunkt. Durch eine Abfrage wurde zunächst festgestellt, ob die oberste hydrogeologische Einheit (Auenlehm und Abschwemmmassen) weniger als 60 cm mächtig ist. Für diesen Fall wurde für diese zweigeteilte Schicht die Mindestmächtigkeit von insgesamt 60 cm implementiert. An den Rasterpunkten, an denen die oberste geologische Einheit eine Mächtigkeit von größer als 60 cm aufwies, wurde entsprechend Abb. 3.38 der unteren, zweigeteilten, hydrogeologischen Schicht eine Mächtigkeit von 30 cm zugewiesen. Die restliche Mächtigkeit (> 30 cm) wurde in die oberste Schicht integriert (Abb. 3.37).

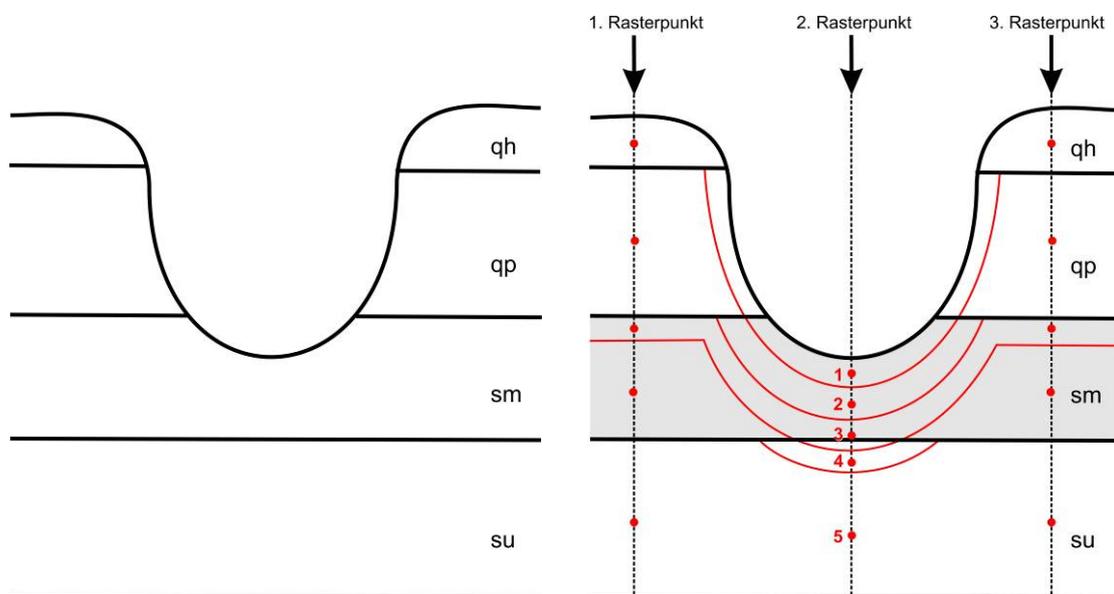


Abb. 3.38: Verlauf der geologischen Strukturen (dicke, schwarze Linien) im Vergleich zum hydrogeologischen Strukturmodell (rote Linien, rechts), welches durch die Integration der Mindestmächtigkeit einen anderen Schichtverlauf aufweist.

Für die Durchführung des C++-Skriptes ist es dabei unerheblich, ob die oberste, geologische Schicht, eine Mächtigkeit von weniger als 60 cm aufweist oder nicht verbreitet ist. In beiden Fällen erfolgt eine Anpassung an die Mindestmächtigkeit von 60cm.

Für die folgende, geologische Einheit, den Kies-Aquifer, wurde eine Dreiteilung vorgenommen, um die kf-Wert-Interpolation in FEFLOW® auf die geringmächtigen Bereiche oben und unten im Kies zu beschränken. Aufgrund der Dreiteilung wurde für das Gesamtpaket eine Mindestmächtigkeit von 90 cm integriert. Ein weiterer Unterschied zur Generierung der Einheit Auenlehm-Abschwemmmasse ist der fehlende Vergleich zum DGM. Als Bezugshorizont wurde die neu generierte Unterkante der hydrogeologischen Einheit Auenlehm-Abschwemmmasse genutzt. Basierend darauf wurden die vertikalen Lagedaten ggf. korrigiert.

Der gleiche Vorgang wurde für die folgenden Einheiten durchgeführt, wobei die unterste geologische Einheit (Zechstein, z) wiederum nur 2-geteilt ist, da keine weitere, unterlagernde Schicht geologisch modelliert wurde. Die generierten Strukturdaten für das gesamte hydrogeologische Modell wurden in einer ASCII-Datei abgelegt, um diese anschließend in FEFLOW® importieren zu können.

Für den 1. Rasterpunkt in Abb. 3.38 bspw. befindet sich der oberste rote Punkt, der Mittelpunkt der obersten hydrogeologischen Einheit, im Verbreitungsgebiet der geologischen Einheit Auenlehm (qh). Diesem Punkt wurde zunächst der für den gesamten Auenlehm geltende, horizontale kf-Wert von 10^{-5} m/s zugewiesen. Für den vertikalen kf-Wert wurde 10^{-6} m/s definiert. Die Durchlässigkeitsbeiwerte erscheinen für einen Auenlehm relativ hoch, allerdings sind diese Werte durch Infiltrationsversuche ermittelt und anschließend gemittelt worden.

Für die Zuweisung der kf-Werte des Kies-Aquifers wurde die oben beschriebene Methodik abgewandelt. Zunächst wurde ein Pauschalwert als Platzhalter für den jeweiligen kf-Wert zugewiesen. Dieser wurde im nächsten Arbeitsschritt durch die Ergebnisse der kf-Wert-Interpolation an den jeweiligen Rasterpunkten ersetzt.

Die weiteren Besonderheiten der kf-Wert-Zuweisung sollen im Folgenden am 2. Rasterpunkt in Abb. 3.38 durch eine Überlagerung der Visualisierungen des geologischen (schwarze Linien) und des hydrogeologischen Modells (rote Linien) näher erläutert werden. Die Erläuterung geht dabei von den Gesamtschichten (Auenlehm qh, Kies-Aquifer qp, Mittlerer Buntsandstein sm, Unterer Buntsandstein su) aus, ohne zunächst die oben beschriebene Zwei- bzw. Dreiteilung der Schichten zu berücksichtigen. Der Mittelpunkt (rote 1) der obersten Schicht am 2. Rasterpunkt des hydrogeologischen Modells (rot) befindet sich in der sm-Schicht (grau hinterlegt) des

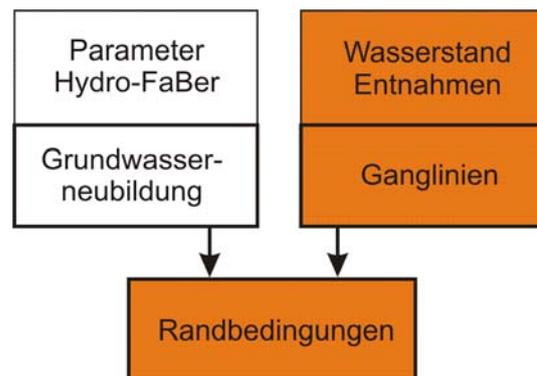
geologischen Modells. Diesem Punkt wird, obwohl er sich in der obersten Schicht des hydrogeologischen Modells befindet, der kf-Wert des Mittleren Buntsandsteins (sm) zugewiesen.

Den Schichten 2 und 3 des hydrogeologischen Modells werden am 2. Rasterpunkt ebenfalls die kf-Werte des Mittleren Buntsandsteins (sm) zugewiesen, da deren Mittelpunkt sich in dieser Schicht des geologischen Modells befindet. Die Schicht 3 stellt hierbei insofern eine Besonderheit dar, da sie im Normalprofil der Einheit des Oberen Buntsandsteins entspricht. Diese ist aber im dargestellten Profil nicht vorhanden. Daher weist die Schicht 3 im gesamten Bereich der Abb. 3.38 die Mindestmächtigkeit auf. Im Gegensatz dazu wird den Schichten 4 und 5 des hydrogeologischen Modells am 2. Rasterpunkt der Durchlässigkeitsbeiwert der geologischen Einheit des Unteren Buntsandsteins (su) zugewiesen. Durch diese Anpassung konnte die modellierte geologische Struktur mit z.T. auskeilenden Schichten in ein hydrogeologisches Modell überführt werden.

3.6. Randbedingungen

Es gibt drei **Arten von Randbedingungen** (boundary conditions), welche in ein hydrogeologisches Modell integriert werden können. Die Randbedingung erster Art (Dirichlet-Bedingung) wird im Modell durch eine Piezometerhöhe (hydraulic head) repräsentiert. Um die eindeutige Lösung der

mathematischen Gleichungen zu garantieren, muss mindestens ein Punkt im Modell mit einer Randbedingung erster Art belegt sein. Die Randbedingung zweiter Art (Neumann-Bedingung) beschreibt den Zu- oder Abstrom in der Dimension einer Geschwindigkeit. Häufig wird diese Randbedingung genutzt, um No-Flow-Boundaries, wie z.B. Grundwasserscheiden zu implementieren. Des Weiteren können Grundwasserentnahmen als Randbedingung zweiter Art integriert werden, indem um den Brunnen ein Kreis aus dem generierten FE-Netz ausgeschnitten wird und der Fluss (flux) durch den Kreis beschrieben wird.



Die Randbedingung dritter Art (Cauchy-Bedingung) legt eine Flussrate in Abhängigkeit von der Potentialdifferenz fest. Diese Bedingung wird in der Modellierung genutzt, um halbdurchlässige Grenzen (Flusslauf) abzubilden. In FEFLOW® ist zudem eine Randbedingung vierter Art (Einzelbrunnen-Bedingung) definiert (SOMMERHÄUSER

1999, DIERSCH 2002, DIERSCH 2005). Dabei wird ein definiertes Wasservolumen an den Brunnenkoordinaten zum Zeitpunkt t aus dem Aquifer entnommen.

Für die Integration der verfügbaren Wasserstandsdaten (Randbedingung erster Art, **Dirichlet-Randbedingung**) der Werra-Pegel Allendorf und Heldra in das hydrogeologische Modell wurden verschiedene statistische Verfahren angewandt. Für die Zeiträume 01.11.2006 bis 01.05.2007 (hydrologischer Winter 2007) und 01.11.2006 bis 01.01.2007 (Niedrigwasserperiode) wurden Kreuzkorrelationen durchgeführt, um den zeitlichen Versatz der Bewegung einer Wasserstandsänderung der Werra zwischen den beiden Pegeln und bezüglich des dazwischen liegenden Untersuchungsgebietes festzustellen. Diese Analyse wurde durchgeführt um festzustellen, ob die Wasserstandswerte der Pegel Allendorf und Heldra für die jeweiligen Tage im Modellgebiet direkt zu verwenden, oder ob diese Werte aufgrund der Fließgeschwindigkeit bspw. auf den nachfolgenden Tag umgerechnet werden mussten.

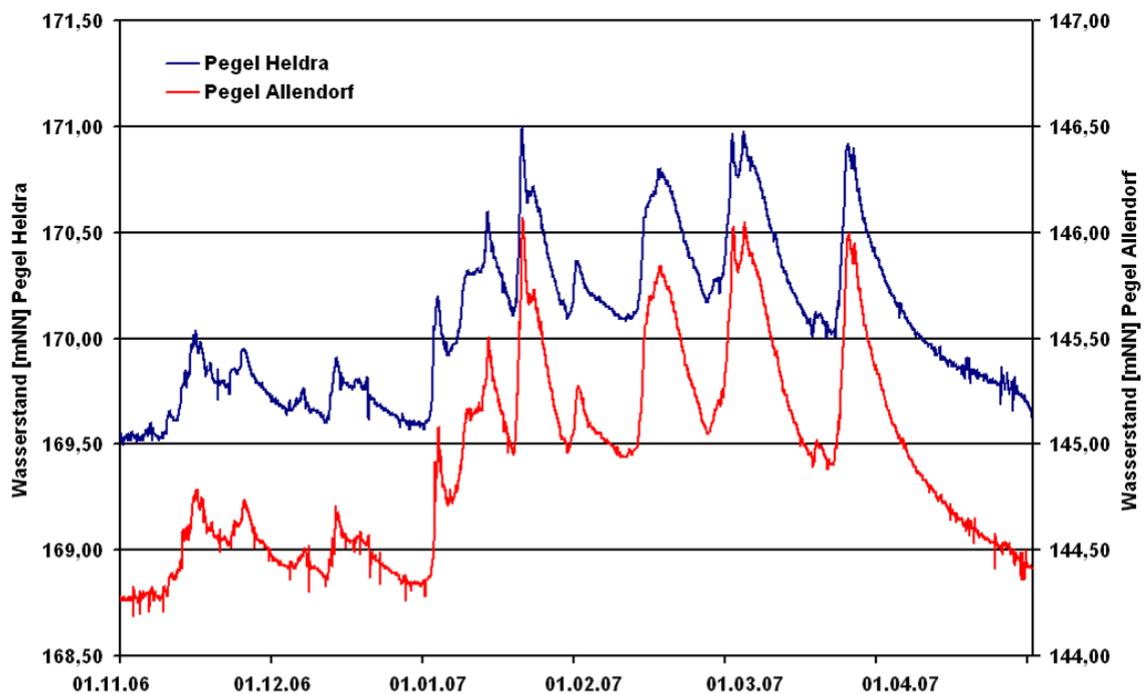


Abb. 3.39: Wasserstands-Ganglinien der Pegel Heldra und Allendorf für den hydrologischen Winter 2007 (01.11.06 bis 01.05.07).

Eine Kreuzkorrelation stellt einen Vergleich einer Zeitreihe, mit um k Zeiteinheiten verschobenen Werten einer anderen Zeitreihe dar. Die ermittelten Kreuzkorrelationskoeffizienten werden mit $r(k)$ bezeichnet (mit k = Anzahl der Verschiebungen). Die Darstellung dieser Korrelationskoeffizienten in Abhängigkeit von der Zeitverschiebung wird als Kreuzkorrelogramm bezeichnet.

Bei einer ersten Korrelation mit Tagesmittelwerten des Wasserstandes der Pegel Heldra und Allendorf wurde für einen Zeitversatz von Null Tagen der höchste Korrelationskoeffizient r ermittelt. Aus dieser Analyse konnte lediglich abgeleitet

werden, dass das analysierte Zeitintervall für die Korrelationsanalyse zu groß war. Für die Kreuzkorrelation (Abb. 3.40) wurden 15-Minuten-Werte des Gewässerkundlichen Informationssystems der Wasser- und Schifffahrtsverwaltung des Bundes genutzt. Diese sind jeweils für vier Wochen im Internet publiziert (<http://www.pegelonline.wsv.de>, Abruf in den Jahren 2006 bis 2010).

Durch die Analyse des hydrologischen Winters 2007 wurde ein Kreuzkorrelationskoeffizient $r=0,997$ (bei $n=14.496$) für eine Zeitverzögerung von 4:15 Stunden der Detektion einer Wasserstandsänderung am Pegel Heldra im Vergleich zum Pegel Allendorf ermittelt. Der ermittelte Zusammenhang liegt im geprüften 95 %-Vertrauensintervall (benötigter Korrelationskoeffizient für das 95 %-Vertrauensintervall: $r=0,0137$). Aufgrund der bei Niedrigwasser langsameren Fließgeschwindigkeit des Werrawassers ergab sich für die Analyse der Periode vom 01.11.06 bis 01.01.07 ein Kreuzkorrelationskoeffizient $r=0,992$ (bei $n=5.857$) bei einer Zeitverzögerung von 6:30 Stunden. Der Zusammenhang zwischen den Prüfgrößen ist somit statistisch gesichert und als signifikant nachgewiesen (Abb. 3.40).

Die statistische Analyse mittels Kreuzkorrelation erbrachte für die hydrogeologische Modellierung den Nachweis, dass der analysierte Zeitversatz des fließenden Wassers zwischen den Pegeln Heldra und Allendorf für eine Integration in das Modell zu gering ist.

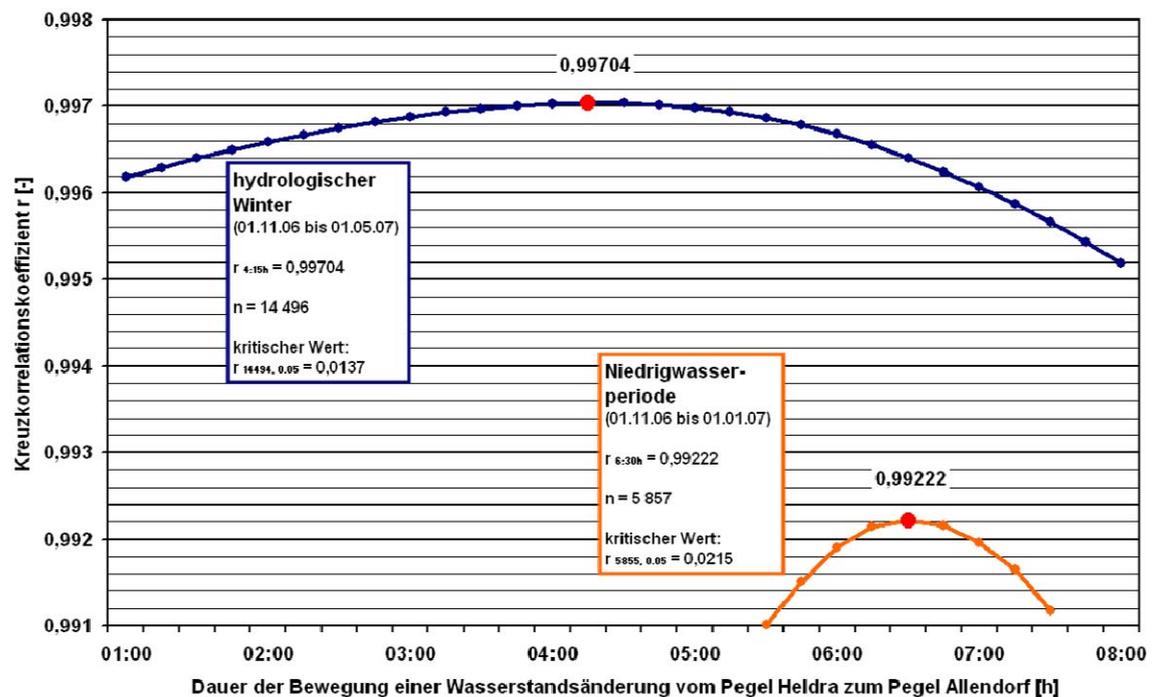


Abb. 3.40: Lage der Maxima in den Kreuzkorrelogrammen für den hydrologischen Winter und die Niedrigwasserperiode.

Für die hydrogeologische Modellierung mussten zudem die zeitlich hoch auflösenden Pegelraten des Wasserstandes (Dirichlet-Randbedingung) auf Vorflutpunkte im

Untersuchungsgebiet umgerechnet werden. Die primär vorliegenden Daten stammen von den Pegeln Heldra (10 km Oberstrom vom Untersuchungsgebiet) und Allendorf (10 km Unterstrom). Mittels Regressionsanalysen wurden die Stichtagsmessungen an der Werra (1998 bis 2000) den Tageswerten der Pegel Heldra und Allendorf gegenübergestellt. Die Messstellen WI und Großes Wehr wurden mit dem Pegel Heldra, die Messstellen WII und WIV aufgrund ihrer Lage unterhalb des Großen Wehres mit dem Pegel Allendorf korreliert (Tab. 3.13). Im Bereich des Großen Wehres existieren zudem zwei weitere Wehre, die hydraulisch weniger bedeutend sind.

Tab. 3.13: Ergebnisse der Regressionsanalysen der Stichtagsmessungen und den Tageswerten der Pegel Heldra und Allendorf (t-Test für den Korrelationskoeffizienten).

	Heldra – WI	Held. – Gr. Wehr	Allend. – WII	Allendorf – WIV
Nr.	1	2	3	4
Regressionsgleichung	$y=1,077x-22,645$	$y=0,222x-122,07$	$y=1,094x-2,751$	$y=1,072x-0,604$
R ²	0,973	0,435	0,520	0,604
r	0,986	0,659	0,721	0,777
n	15	15	14	15
kritischer Wert für 95%	0,482	0,482	0,497	0,482

Die Regressionsanalysen 1 und 4 in Tab. 3.13 sind signifikant (95% Vertrauensintervall). Die Analysen der weiter von den Bezugspegeln (Heldra und Allendorf) entfernten Messpunkte Großes Wehr (Nr. 2) und WII (Nr. 3) weisen niedrigere Korrelationskoeffizienten auf, sind aber dennoch ebenfalls signifikant. Mit Hilfe der Regressionsgeraden wurden die Tageswerte der Pegel Heldra und Allendorf in Tageswerte der im Untersuchungsgebiet befindlichen Werrapegel umgerechnet und als Dirichlet-Randbedingung integriert.

Des Weiteren wurden **Randbedingungen vierter Art** in das hydrogeologische Modell integriert. Als Randbedingungen vierter Art werden in FEFLOW® punktuelle Grundwasserentnahmen (Brunnen) definiert.

Die Qualität der vorliegenden Entnahmedaten von den Wasserwerken ist sehr heterogen. Die Daten von den Stadtwerken Eschwege weisen eine gute Qualität hinsichtlich der Anforderungen der hydrogeologischen Modellierung auf (Tab. 3.14). Es sind monatliche Entnahme- und Wasserstandsdaten für den gesamten Modellierungszeitraum vorhanden. Im Gegensatz dazu weisen die Daten des nördlichen Talraums (Wasserentnahmen der Gemeinde Meinhard) eine deutlich schlechtere Qualität auf. Aufgrund der nicht digitalen Aufzeichnung der Daten und der ausschließlichen Aufzeichnung von Verkaufsmengen und Pumpvolumina durch die

Wasserleitungen ist die Ableitung der Entnahmemengen aus dem Grundwasser erschwert. Zudem existieren Datenlücken im Datensatz, die durch die im Folgenden beschriebenen, statistischen Methoden analysiert und geschlossen wurden.

Tab. 3.14: Datenqualität von den der Stadtwerke Eschwege zugehörigen Wasserentnahmen.

Kl.	Beschreibung	Aue 1		Aue 2		Aue 4		Höllgraben		Eschwege I	
		Jahre	Proz.	Jahre	Proz.	Jahre	Proz.	Jahre	Proz.	Jahre	Proz.
1	Entnahmemengen, monatlich	19	100	19	100	19	100	19	100	19	100

Nach BENDER (2007) und GOSSEL (2008) müssen Datenlücken in einem Datensatz für die Grundwassermodellierung geschlossen werden. BENDER (2007) führt dafür vier statistische Bearbeitungen an, die die nachfolgende Auswertung jedoch möglichst wenig verfälschen:

- arithmetisches Mittel bzw. Median der Gesamtpopulation,
- arithmetisches Mittel bzw. Median eines Subclusters,
- arithmetisches Mittel bzw. Median der Variablen in der Nähe der Fehlstelle und
- Anwendung eines Näherungsverfahrens (Regressionsanalyse).

Die Generierung der monatlichen Entnahmemengen aus der Datengüte-Klasse 2 (Tab. 3.15) wird im Folgenden anhand des Tiefbrunnens Neuerode (Neuer. TB) beschrieben. Im Jahr 1999 wurde an dem Tiefbrunnen eine Gesamtmenge von 22.809 m³ Grundwasser entnommen. Im Vergleich dazu wurden in den Jahren 1996 bis 1998 und 2000 jeweils zwischen 22.384 m³ und 24.899 m³ gewonnen. Zudem liegen die monatlichen Entnahmemengen vor. Für diese vier Jahre wurden die monatlichen Entnahmemengen in prozentuale Angaben bezüglich des Gesamtjahres umgerechnet und gemittelt. Mit Hilfe dieser monatlichen Prozentangaben wurden aus der Gesamtjahresmenge die monatlichen Entnahmen am Tiefbrunnen Neuerode abgeschätzt. Aufgrund der geringen Sicherheit können diese Daten im Folgenden zwar für den Aufbau des hydrogeologischen Modells, nicht aber für die Kalibrierung des Modells genutzt werden.

Die Ermittlung der Entnahmemengen der Datengüte-Klassen 3 bis 5 der Tab. 3.15 ist nur mit Nutzung von weiterführenden, statistischen Methoden möglich. Dabei korreliert die Güte der Ausgangsdaten direkt mit der Richtigkeit der daraus generierten Daten und der zugehörigen Aussagesicherheit. Für die Erstellung des hydrogeologischen Modells sind auch diese Daten nutzbar. Für die Kalibrierung des Modells sollten diese Datenqualitäten jedoch nicht genutzt werden.

Die Auswertung der Datengüte-Klasse 3 folgte durch die Analyse der Pumpmengen durch die Leitungen zum Endverbraucher. Für die Erstintegration der so ermittelten

Entnahmemengen aus dem Grundwasser für die hydrogeologische Modellierung wurden Durchleitungsverluste zunächst vernachlässigt. Ein weiterer Fehler liegt in der Messgenauigkeit der Wasseruhren von $\pm 4\%$ begründet.

Tab. 3.15: Datenqualität der Wasserentnahmen, welche von der Gemeinde Meinhard zur Verfügung gestellt werden konnten.

Kl.	Beschreibung	Jestädt Qu.		Motz. Qu.		Neuer. TB		Motz. TB		Hitzel. Qu.	
		Jahre	Proz.	Jahre	Proz.	Jahre	Proz.	Jahre	Proz.	Jahre	Proz.
1	Entnahmemengen, monatlich	10	100	10	100	6	60	6	60	-	-
2	Entnahmemengen, Jahressumme	-	-	-	-	3	30	2	20	5	50
3	Leitungspumpmengen, Verbrauch	-	-	-	-	-	-	-	-	2	20
4	ohne Daten; Summen und Verhältnisse aus Nachbarjahren	-	-	-	-	1	10	2	20	1	10
5	ohne Daten	-	-	-	-	-	-	-	-	2	20

Im Gesamtdatensatz existieren zudem vier Jahre, für welche keine direkten Daten in der Gemeinde Meinhard vorliegen, allerdings Daten zu angrenzenden Jahren vorhanden sind (Datengüte-Klasse 4, Tab. 3.15). Die Gesamtentnahmemenge für die betreffenden Jahre wurde mittels einfacher Regression aus den Vorgänger- und Nachfolgerjahren ermittelt. Die Ableitung der Gesamtentnahmemenge für die Datengüte-Klasse 5 erfolgte mittels einer Regression über die Gesamtheit der vorhandenen Jahre im Datensatz. Die Berechnung der monatlichen Entnahmemengen erfolgte nach der für Datengüte-Klasse 2 oben beschriebenen Methodik.

3.7. *Bewertung der genutzten Verfahren und Methoden*

Im Rahmen der Erstellung des hydrogeologischen Modells wurden verschiedene Verfahren und Methoden getestet bzw. verwendet. Insbesondere die folgenden vier Punkte stellen wichtige Aspekte der durchgeführten Arbeitsschritte dar:

- Berechnung des Flurabstandes im Festgestein,
- Berechnung der Grundwasserneubildung nach dem TUB-BGR-Verfahren,
- Interpolation der hydraulischen Durchlässigkeiten und
- Kopplung der Eingangsdaten an das Modellierungswerkzeug FEFLOW®.

Für die Ermittlung des Grundwasserflurabstandes in den Festgesteinsbereichen des Modellgebietes wurden bestehende Verfahren analysiert. Die verbale Bewertung dieser

Analyse ist in Kapitel 3.1 nachzulesen. Aufgrund der dort beschriebenen Methodenlücke wurde ein neues Verfahren zur Ermittlung des Grundwasserflurabstandes (Hydro-FaBer) entwickelt. Dabei wird ausgehend von effluent an den Grundwasserleiter angebundenen Bächen und Flüssen zunächst eine mittlere Grundwasseroberfläche berechnet. Als Inputparameter zur Berechnung der Grundwasseroberfläche gehen dabei Parameter wie Hangneigung, Neigung des Bachbettes und Abstand zum Fließgewässer ein. Durch Subtraktion der Grundwasseroberfläche von der Geländeoberkante wird abschließend der Grundwasserflurabstand ermittelt.

Bei der Entwicklung des Verfahrens Hydro-Faber wurde bewusst auf die Integration geologischer und zeitlich hoch auflösender Daten verzichtet. Dieses Verfahren stellt eine Vorstufe der hydrogeologischen Modellierung dar, in welcher zunächst Angaben des Grundwasserflurabstandes als Inputparameter benötigt werden. Ein optimierter Grundwasserflurabstand wird während der eigentlichen hydrogeologischen Modellierung ermittelt, aber dieser wird mit einem deutlich erhöhten Aufwand gewonnen. Das Verfahren Hydro-FaBer stellt somit eine einfache Möglichkeit dar, den mittleren Grundwasserflurabstand abzuschätzen und als Input für die hydrogeologische Modellierung zu nutzen.

Im Rahmen der Vorarbeiten zur hydrogeologischen Modellierung wurde das TUB-BGR-Verfahren genutzt, um zunächst die hydrotopbezogene Sickerwasserrate und anschließend die Grundwasserneubildung zu berechnen. Anschließend wurde diese Grundwasserneubildung als Randbedingung an FEFLOW® gekoppelt. Die komplexe, aber relativ einfach strukturierte Ermittlung der Sickerwasserrate des TUB-BGR-Verfahrens (WESSOLEK ET AL. 2004) eignet sich gut, um hydrotopbezogene Inputparameter für die hydrogeologische Modellierung zu ermitteln. Mittels einfacher Umformungen kann die Sickerwasserrate bzw. die Grundwasserneubildung für die hydrogeologische Modellierung genutzt werden.

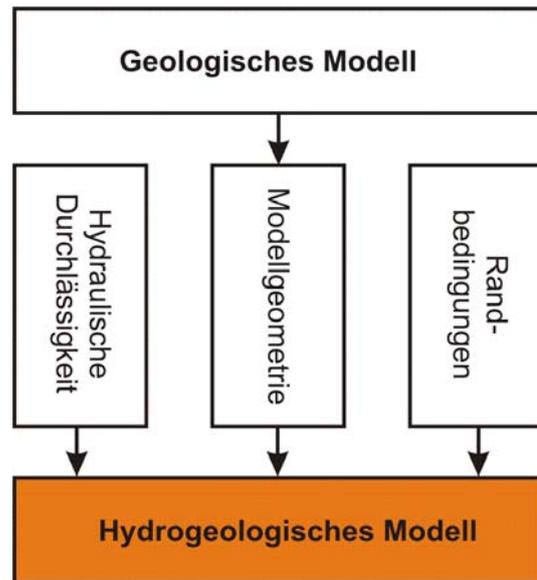
Um den Aufwand der hydrogeologischen Modellkalibrierung zu minimieren, ist es notwendig, die Parameter des hydrogeologischen Modells möglichst gut abzuschätzen und festzulegen. Aufgrund der Vielzahl der verfügbaren, im Kies-Aquifer verfilterten, Grundwassermessstellen konnten die hydraulischen Durchlässigkeiten besonders gut durch Slug-and-Bail-Tests und Pumpversuche untersucht werden. Es wurde aus 19 selbst ermittelten und acht aus der Literatur entnommenen k_f -Werten statistisch der k_f -Wert des Kies-Aquifers am Talauenrand ermittelt (siehe Abb. 3.34). Anschließend wurde die horizontale Verteilung der k_f -Werte interpoliert und als Input für die hydrogeologische Modellierung genutzt. Durch die automatisierte Anbindung an FEFLOW® konnte zudem der Modellieraufwand weiter reduziert werden.

Um die modellierte Geometrie des geologischen Modells in das Modellierungswerkzeug FEFLOW® zu überführen, mussten die generierten Schichtunterkanten umformatiert werden. Es ist notwendig, dass die Schichtflächen über das gesamte Modellgebiet verbreitet sind, sie müssen eine Mindestmächtigkeit von 30 cm aufweisen und zudem sind die geologischen Schichten in drei hydrogeologische Teilschichten zu untergliedern. Diese Methodik ist in Kapitel 3.5 beschrieben. Die Umsetzung dieser Anforderungen kann aufgrund des hohen Aufwandes nur automatisiert erfolgen. Insbesondere durch die Integration der Dreiteilung der Schichten konnten die Modellierungsergebnisse optimiert werden. Im Vergleich zu Modellierungswerkzeugen mit dem Finite-Differenzen-Verfahren bestehen die Vorteile von FEFLOW® vor allem in der variableren Netzverfeinerung und den verschiedenen Netzgeneratoren. Dadurch kann das erstellte Netz optimal an die Aufgabenstellungen der hydrogeologischen Modellierung angepasst werden. Des Weiteren besteht bei Visual Modflow® ein Problem beim *Rewetting* trocken gefallener Zellen. Dieses Problem kann bei Modflow® nur durch eine (vertikale) Vergrößerung der Zellen behoben bzw. unterdrückt werden. Durch diese Problemlösung wird allerdings eine optimierte Abbildung der geologischen Strukturen im hydrogeologischen Modell unterbunden. Diese Probleme bestehen bei der Anwendung des Modellierungswerkzeuges FEFLOW® nicht.

4. Hydrogeologische Modellierung

Im Folgenden werden die Methoden der hydrogeologischen Modellierung und deren Umsetzung im Rahmen der Modellierung des Modellraums beschrieben.

Es werden die Standardmethoden dargestellt und darüber hinausgehende Aspekte, wie z.B. die Quantifizierung der Kalibrierungsergebnisse und die derzeit dort bestehenden, methodischen Unzulänglichkeiten dokumentiert.



4.1. Methoden der hydrogeologischen Modellierung

Die Aufgaben bei einer hydrogeologischen Modellierung gliedern sich nach MIDDLEMIS ET AL. (2000) in drei Arbeitsschritte (Konzeptualisierung, Kalibrierung und Vorhersage). Im ersten Schritt, der Konzeptualisierung, werden dabei die Studienobjekte definiert und die Modell-Komplexität festgelegt (u.a. SEPPELT 2003). Zudem erfolgt eine erste Interpretation verfügbarer, hydrologischer, hydrogeologischer und geologischer Daten. Das konzeptionelle Modell wird entwickelt. Des Weiteren werden der Zeitaufwand sowie die Möglichkeiten und die Grenzen der Modellierung abgeschätzt (u.a. LESER 1997). Nach dieser Nomenklatur zählt eine arbeits- und zeitintensive geologische Modellierung ebenfalls in diesem ersten Arbeitsschritt.

Die Erstellung und Weiterverarbeitung des hydrogeologischen Modells erfolgt im zweiten Arbeitsabschnitt, der Kalibrierung (nach MIDDLEMIS ET AL. 2000). Diese Phase umfasst etwa 50 % des Arbeitsaufwandes und umfasst zudem die Kalibrierung durch Parameteranpassung bis die Simulation den gemessenen Daten entspricht, nebst einer Sensitivitätsanalyse, in der festgestellt wird, welche Auswirkungen durch Parameteränderungen im Modell hervorgerufen werden. In der dritten Phase werden Szenarien für die Vorhersage verschiedener Ereignisse im Modellgebiet entwickelt.

Bei der Erstellung eines Modells ist dabei das „Paradoxon der Modellierung“ allgegenwärtig. Nach HILL (2006) bilden einerseits die Komplexität und andererseits Transparenz und Übersichtlichkeit zwei beinahe unvereinbare Ziele der Modellierung. Die Vorhersagemöglichkeiten sinken dabei mit der Anzahl der variablen Parameter und die jeweilige Komplexität richtet sich nach der im ersten Arbeitsschritt festgelegten

Zielsetzung bzw. Zielgruppe. Nach BAIR (2001) sind die Vorhersagen (Prognosen) einer hydrologischen Modellierung akzeptabel, wenn die Modellierungsergebnisse zu über 75 % mit den Messwerten übereinstimmen.

Bei der Entwicklung und Anwendung hydrogeologischer Modelle spielen die räumliche und zeitliche **Betrachtungsskala** eine wichtige Rolle (Abb. 4.1). Beim Prozess der Modellierung wird dabei häufig die Skala gewechselt (BECKER 1992, BRONSTERT ET AL. 2005). BECKER (1992) unterscheidet bei der Regionalisierung drei Typen, von denen zwei einen Skalenübergang beinhalten (Typ B und C). Bei Typ A wird die flächenmäßige Verteilung einer Größe durch Interpolation, Extrapolation oder einfache Zuordnung bestimmt. In der vorliegenden Arbeit stellt die Niederschlagsinterpolation den Regionalisierungstyp A dar.

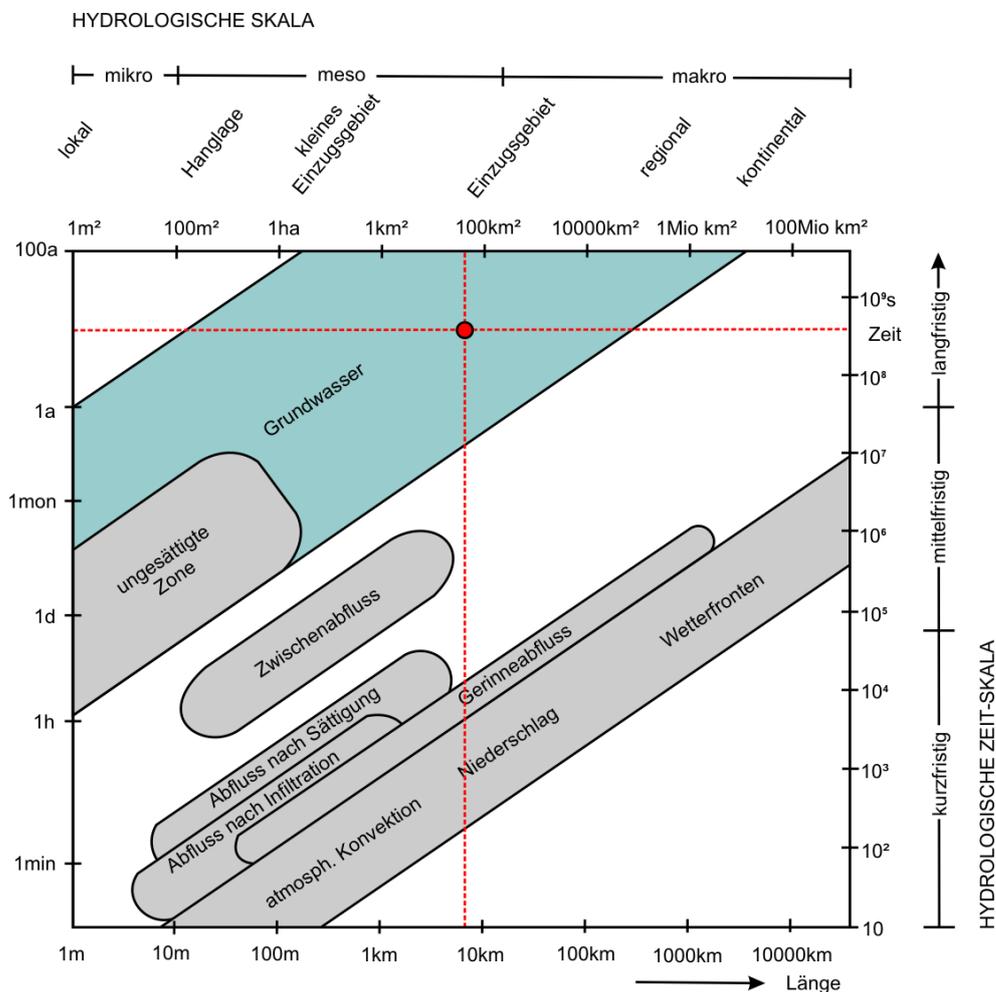


Abb. 4.1: Skalen in der Hydrogeologie (nach BLÖSCHL 1999, BRONSTERT ET AL. 2005), der rote Punkt entspricht der Skala der Modellierung der vorliegenden Arbeit.

Bei Typ B nach BECKER (1992) wird eine flächenmäßige Aggregation bzw. eine Integration von lokalen, elementarflächenbezogenen Informationen durchgeführt. Dabei werden Flächensummen gebildet. Es erfolgte ein Skalenwechsel von einem niedrigeren zu einem höheren Bereich. In der vorliegenden Arbeit repräsentiert die Reduktion der

Klassen bei der Niederschlagskorrektur den Regionalisierungstyp B. Bei der flächenmäßigen Disaggregation von größerflächig vorliegenden Informationen auf Teilflächen erfolgte ein Übergang von einem höheren zu einem niedrigeren Skalenbereich (Typ C). In der vorliegenden Arbeit führte eine Disaggregation von Informationen (Verschneidung von nFKWe, Grundwasserflurabstand, Landnutzung) zur Generierung der Hydrotope.

4.2. Mathematische Grundlagen der hydrogeologischen Modellierung

In der Simulation natürlicher Prozesse muss häufig auf nicht-lineare Gleichungssysteme zurückgegriffen werden, für die keine analytische Lösung existiert. Für die Lösung dieser Gleichungssysteme sind **numerische Methoden**, wie die Finite-Differenzen-Methode (FDM) oder die Finite-Elemente-Methode (FEM) notwendig (RAPPAZ ET AL. 2003). Die FDM ist die einfachere der Methoden hinsichtlich der mathematischen Formalismen und der Implementierung in eine Programmiersprache. Diese Einfachheit ist bei der Betrachtung von komplexen Phänomenen von Vorteil. Im Gegensatz zur FDM kann die FEM komplexe Geometrien des Untersuchungsobjektes besser abbilden. Zudem ist bei der Integration von Randbedingungen eine größere Einflussnahme möglich.

Basierend auf den physikalischen Prozessen im Untergrund, können diese mit mathematischen Gleichungen beschrieben werden. Die Darcy-Gleichung (Gl. 4.1) und die Kontinuitätsgleichung liegen den mathematischen Modellierungsansätzen zugrunde.

$$Q = k_f \cdot I \cdot A \quad (\text{Gl. 4.1})$$

Dabei entspricht Q der strömenden Wassermenge [m^3/s], k_f dem Durchlässigkeitsbeiwert [m/s], I ist das hydraulische Gefälle [m/m] und A repräsentiert die durchströmte Fläche [m^2]. Durch Division mit der Fläche A lässt sich die Filtergeschwindigkeit v_f [m/s] berechnen (Gl. 4.2).

$$v_f = k_f \cdot I \quad (\text{Gl. 4.2})$$

Ein zeitunabhängiges steady-state-Szenario kann im Rahmen der hydrogeologischen Modellierung mit Hilfe der folgenden, dreidimensionalen Differentialgleichung beschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0 \quad (\text{Gl. 4.3})$$

Die Variablen x , y und z stehen hierbei für die drei Raumrichtungen im kartesischen Koordinatensystem und h der Standrohrspiegelhöhe [m]. Die unterschiedlichen, hydraulischen Durchlässigkeiten im dreidimensionalen Raum werden durch die Variablen K_x , K_y und K_z mathematisch wiedergegeben.

Wird das Medium als homogen und isotrop angenommen, kann o.g. Gleichung (Gl. 4.3) wie folgt vereinfacht und als Laplace-Gleichung ausgedrückt werden:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{Gl. 4.4})$$

oder kurz geschrieben:

$$\nabla^2 h = 0 \quad (\text{Gl. 4.5})$$

Bei instationären Szenarien müssen zeitabhängige Speichervariablen, wie der Speicherkoeffizient, mit in die Betrachtung einbezogen werden. Für diese Szenarien ergibt sich folgende Gleichung, um das Fließverhalten im gesättigten, porösen Medium zu beschreiben:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (\text{Gl. 4.6})$$

Die Variable S_s repräsentiert dabei den spezifischen Speicherkoeffizienten [m^{-1}] und t die Zeit [s]. Der spezifische Speicherkoeffizient bezeichnet dabei das Volumen Wasser, das pro Meter Absenkung oder Anstieg des Druckspiegels aus dem Vorrat eines Aquifer-Einheitsvolumens vom 1 m^3 entnommen bzw. in dieses eingespeichert wird.

Integriert man den spezifischen Speicherkoeffizienten über die wassererfüllte Mächtigkeit, so erhält man als Ergebnis den Speicherkoeffizienten:

$$S = \int_0^m S_s \cdot dm \quad (\text{Gl. 4.7})$$

In einem Grundwasserleiter mit ungespannten Verhältnissen lässt sich der Speicherkoeffizient wie folgt berechnen:

$$S = n_0 + m \cdot n \cdot \beta \cdot \gamma \cdot \left(1 + \frac{\alpha}{n \cdot \beta} \right) \quad (\text{Gl. 4.8})$$

Dabei entspricht n_0 dem nutzbaren Porenraum. Die weiteren Variablen sind wie folgt definiert:

m	wassererfüllte Mächtigkeit des Aquifers	[m]
n	Gesamtporenraum	[dimensionslos]
α	vertikale Kompressibilität des Aquifer-Korngerüsts	[kg ⁻¹ ·m·s ⁻²]
β	Kompressibilität des Wassers	[kg ⁻¹ ·m·s ⁻²]
γ	Wichte des Wassers	[kg·m ⁻² ·s ⁻²]

Der Anteil des zweiten Summanden in Gleichung 4.8 ist im Vergleich zu n_0 sehr gering. Der Speicherkoeffizient kann demnach bei praktischen Fragestellungen mit dem nutzbaren Porenraum gleichgesetzt werden:

$$S \cong n_0 \quad (\text{Gl. 4.9})$$

MARSAL (1989) beschreibt die Stabilität von mathematischen Systemen. Viele Differenzgleichungen sind rundungsempfindlich (= instabil), d.h. kleinste Anfangs- oder Rundungsfehler pflanzen sich mit wachsendem Betrag im Laufe der Rechnung fort. Wenn der Fehler im Laufe der Rechnung abklingt, wird das System als stabil bezeichnet. Explizite Differenzgleichungen sind stets nur bedingt stabil, d.h. sie sind nur bei bestimmten Schrittweiten stabil. Durch kleine Zeitschritte und eine hohe Flächendiskretisierung bei der Modellierung nähert sich die explizite, numerische Lösung an die exakte analytische Lösung der Transport- und Strömungsgleichung an (EISERMANN 2005). Bei zu groß gewählten Zeitschritten und Flächenelementen entstehen Oszillationen, die in jedem Zeitschritt verstärkt werden und zu falschen Lösungen, z.B. negativen Konzentrationen, führen. Der gewählte Zeitschritt muss dem **Courant-Kriterium** genügen, damit das System stabil ist. Die Courant-Zahl c_0 fordert, dass der Transport eines Teilchens innerhalb einer Zelle während eines Zeitschrittes Δt berechnet wird. Der advective Transportweg innerhalb eines Zeitschrittes ergibt sich aus der Multiplikation der Wassergeschwindigkeit u_x mit der Zeitschrittweite Δt . Das Courant-Kriterium wird i.A. durch sehr kleine Zeitschritte eingehalten. Für die expliziten Differenzgleichungen muss die Courant-Zahl kleiner als 1 sein (nach PINDER & GRAY 1977).

$$c_0 = \left| \frac{u_x \cdot \Delta t}{\Delta x} \right| < 1 \quad (\text{Gl. 4.10})$$

Die Ortsdiskretisierung in einem hydrogeologischen Modell unterliegt dem **Peclet-Kriterium**. Dieses beschreibt das Verhältnis zwischen advektivem ($u_x \cdot \Delta x$) und dispersivem Transport (D_x).

$$P_e = \frac{u_x \cdot \Delta x}{D_x} \quad (\text{Gl. 4.11})$$

Nach PINDER & GRAY (1977) sollte die Peclet-Zahl für die Modellierung kleiner als 2 sein. Je näher die Peclet-Zahl der Zahl Eins kommt, desto genauer entspricht die errechnete Lösung der analytischen Lösung der Transportgleichung. Overshoots werden reduziert und das Rechensystem läuft stabiler.

Aufgrund der mathematischen Grundlagen der hydrogeologischen Modellierung dürfen die modellierten, geologischen Einheiten im hydrogeologischen Modell nicht auskeilen. Jeder Modelllayer muss demnach mit einer Mächtigkeit >0 m über das gesamte Modellgebiet verbreitet sein. Die technische Umsetzung dieser Voraussetzung und die Integration einer Mindestmächtigkeit von 30 cm wurden bereits in Kap. 3.5 beschrieben.

4.3. Modellerstellung

Die Abgrenzung des hydrogeologischen Modellgebietes erfolgte durch die Analyse der oberirdischen Einzugsgebiete der Bäche um Eschwege. Diese wurden bereits vor der geologischen Modellierung festgelegt. Die Einzugsgebiete der Bäche Mühlbach, Schambach, Kellaer Bach und Dünzebach wurden integriert. Aufgrund ihres großen, für die Aufgabenstellung nicht relevanten Einzugsgebietes, wurde die Frieda nicht erfasst. Des Weiteren wurde davon ausgegangen, dass die unterirdischen Einzugsgebiete den oberirdisch festgelegten entsprechen.

Für die **Netzgenerierung** des hydrogeologischen Modells wurden in FEFLOW® 13 Superelemente digitalisiert, die im Folgenden als Basis für den Netzgenerator *Advancing Front* genutzt wurden. Den flächenmäßig größten Anteil machen die Superelemente 9 und 13 aus (Abb. 4.2), die die Festgesteinsbereiche im Untersuchungsgebiet umfassen. Die Werra umfasst insgesamt drei Superelemente (Nr. 1, 3 und 5). Diese Aufteilung war aufgrund des Flusslaufes im Stadtgebiet von Eschwege notwendig. Der Werratalsee wurde durch ein eigenes Superelement (Nr. 10)

digitalisiert. Die Lage und Größe der sieben Superelemente im Auenbereich ergaben sich z.T. geometrisch (Nr. 2 und 4) durch die Werra und zum anderen durch eine Dreiteilung des Auenbereichs im Norden bzw. durch eine Zweiteilung im Süden.

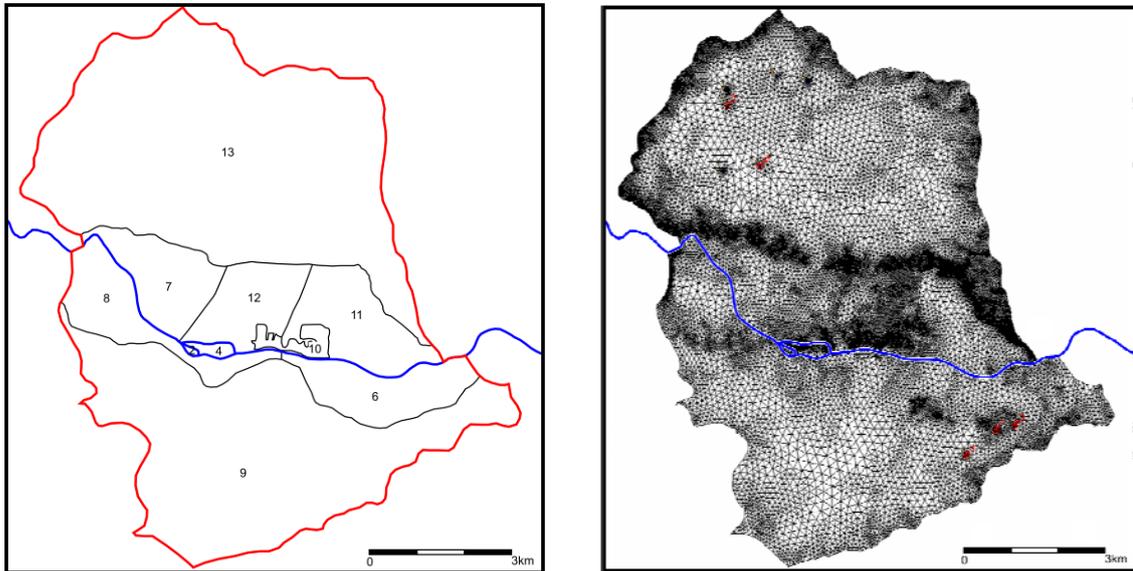


Abb. 4.2: Lage der Superelemente im Untersuchungsgebiet und das generierte Netz mit den Wassergewinnungen (rot markiert) im Buntsandstein.

Durch die Netzgenerator-Option *generate gradually* konnte die Diskretisierung der Randbereiche variabel gestaltet werden. Pro digitalisiertem Superelement-Linienabschnitt (arc) wurde die Anzahl der Netzelemente auf diesem Linienabschnitt festgelegt. Im Bereich des Werra-Talausgangs im Westen und im Osten wurden fünf Elemente pro arc deklariert.

Des Weiteren wurden im Bereich der Wasserentnahmen (Buntsandstein-Brunnen, rot markiert in Abb. 4.2) Verfeinerungen des generierten Netzes (Mesh Enrichment, Single) vorgenommen. Insgesamt wurden 399.806 Knoten und 734.864 Mesh-Elemente vom Typ 6-knotiges Dreiecks-Prisma generiert. Im Bereich der Wasserentnahmen weisen die Dreiecke eine Kantenlänge von etwa 6 m auf, als Maximal-Kantenlänge der Dreiecke wird in den nördlichen und südlichen Festgesteinsbereichen 200 m erreicht.

Nach der Netzgenerierung wurde die Anzahl der Slices in FEFLOW® auf 17 festgelegt (siehe Kapitel 3.5). Die generierten Informationen über die Höhenlage der hydrogeologischen Schichten wurden als zeitkonstante Daten importiert und mittels einer IDW-Interpolation mit einem Nachbarn auf die Mesh-Punkte interpoliert. Dieser Interpolationsansatz entspricht der Nearest-Neighbour-Interpolation und überträgt die importierten Daten ohne Veränderung auf die nächstgelegenen Netzknoten.

Um den Talraum hydrogeologisch besser abzubilden und das hydrogeologische Modell zu generieren, wurden weitere, **zeitlich variable Parameter** an FEFLOW® gekoppelt. Zu diesen Parametern sind die Grundwasserneubildung, die Entnahmen aus dem Grundwasserleiter für die Trinkwassergewinnung und die Ganglinien des Vorfluters Werra zu zählen. Die Kopplung an FEFLOW® erfolgte über sog. Power-Functions.

Bei der Modellerstellung wurden die Wasserstände der Werra als Randbedingung erster Art (Head) integriert. Hingegen waren die Grundwasserentnahmen in FEFLOW® als Randbedingung vierter Art (Well) definiert. Insgesamt wurden zehn Entnahmestellen im Festgestein in das hydrogeologische Modell implementiert. Die Grundwasserneubildung wurde nicht als klassische Randbedingung integriert. Im Menüpunkt Flow Materials wird die Grundwasserneubildung als ein „Inflow on top“ an der Oberkante der ersten Schicht definiert.

Tab. 4.1: Primärinput (kf-Werte) für die Kalibrierung des hydrogeologischen Modells, festgelegt aufgrund der lithologischen Eigenschaften der Einheiten.

Einheit	horizontaler kf-Wert [m/s]	vertikaler kf-Wert [m/s]
Auenlehm	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$
Kies	interpol. Verteilung	interpol. Verteilung / 10
Muschelkalk	$3 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$
Oberer Buntsandstein	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$
Mittlerer Buntsandstein	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$
Unterer Buntsandstein	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$
Zechstein	$1 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-6}$

4.4. Kalibrierung

Die hydrogeologische Kalibrierung besteht aus einer iterativen Parameteranpassung, die solange durchgeführt wird, bis die Simulationsergebnisse den gemessenen Daten entsprechen. Dabei kann die Überprüfung der Anpassung durch verschiedene Gütekriterien durchgeführt werden (u.a. LEGATES & MCCABE 1999). Die Überprüfung der Korrelation bzgl. der gemessenen Datenreihe mit der in FEFLOW® simulierten Datenreihe erfolgt z.B. durch eine Analyse der Regressionsgerade und des Korrelationskoeffizienten. Durch eine Vielzahl von Simulationsdurchgängen und einer einhergehenden, statistischen Auswertung wird die Simulation mit dem best-fit gefunden. Die Anpassung der simulierten Datenreihe an die Messergebnisse kann zudem in einem Histogramm der Differenzen dargestellt werden. Des Weiteren ist es möglich, die Güte der Modellkalibrierung durch sog. Anpassungsfehler bzw. Modellfehler zu quantifizieren.

Die Analyse des Anpassungsfehlers wird durch die Vielzahl der Fehlerquellen bei einer Modellerstellung und im Modellierungsprozess erschwert. Dabei werden Modellfehler bzw. Modellierungsfehler und Parameterfehler unterschieden (vgl. RUBIN 2003, GAGANIS & SMITH 2001, DAGAN 1989, CARRERA & NEUMANN 1986). Der Modellfehler begründet sich in der Vereinfachung des Modells, in dem z.B. kleinräumige Prozesse nicht mit modelliert werden oder Randbedingungen inkorrekt definiert wurden. Die Parameterfehler beinhalten Messfehler, nicht abbildbare Heterogenitäten und Skaleneffekte.

Die Berechnung des Modell-Anpassungsfehlers (u.a. KOBRAVI & ERFANIAN 2009, VANROLLEGHEM 2010) erfolgt mit Hilfe der folgenden Formel:

$$NRMS = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}}{O_{\max} - O_{\min}} = \frac{RSME}{O_{\max} - O_{\min}} \quad (\text{Gl. 4.12})$$

und in anderer Schreibweise u.a. in KOBRAVI & ERFANIAN (2009):

$$NRMS = \frac{1}{(h_{\max,gen} - h_{\min,gen})} \cdot \sqrt{\frac{1}{T} \cdot \sum_{i=1}^T (h_{i,gen} - h_{i,ber})^2} \cdot 100 \quad (\text{Gl. 4.13})$$

mit NRMS als Normalized Root Mean Square Error.

Dabei repräsentiert dieser Fehler die mittlere Abweichung der modellierten Werte von den Messwerten, dividiert durch die Spannweite der gemessenen Werte. Die Zielsetzung bei den verschiedenen Modellkalibrierungen war ein Anpassungsfehler mit einem Wert von kleiner als 5 %. I.A. wird ein Modell als ausreichend kalibriert angesehen, wenn der zugehörige Anpassungsfehler bei 5 % liegt. Nach der Kalibrierung wird im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse festgestellt, welche Auswirkungen Parameteränderungen im Modell hervorrufen (MIDDLEMIS ET AL. 2000). Bei den eigenen Kalibrierungen wurde ein Modell als kalibriert angesehen, wenn dieser Anpassungsfehler unter den 5 % lag. Bei einem Anpassungsfehler von größer als 5 % wurde der nächste Kalibrierdurchgang mit veränderten Parametern gestartet.

Als weitere Möglichkeit, die Qualität der Kalibrierung zu testen, ist der RMSE (Root Mean Square Error) zu nennen. Dabei handelt es sich um eine Möglichkeit, verschiedene Modellszenarien untereinander bzgl. der Güte ihrer Anpassung an die Messwerte zu vergleichen (vergl. KRAGH & CHRISTIE 2002, LUA & JIA 2007, JIA & LUA 2008, KOBRAVI & ERFANIAN 2009). Allerdings ist mit der Methode RMSE keine

allgemeingültige Aussage über die Qualität einer Kalibrierung möglich (MORIASI ET AL. 2007):

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2} = \sqrt{MSE} \quad (\text{Gl. 4.14})$$

Die Optimierung eines hydrogeologischen Modells erfolgt durch eine stationäre und eine instationäre Kalibrierung. Zunächst werden stationäre Parameter wie z.B. der kf-Wert solange geändert, bis die modellierten Werte weitgehend den gemessenen Werten entsprechen. Anschließend werden im Rahmen der instationären Kalibrierung instationäre Parameter wie die Grundwasserneubildung sowie die Porosität kalibriert. Der Bereich der Talaue von Eschwege wurde anhand von Grundwassergleichen zunächst stationär kalibriert und anschließend wurde die instationäre Kalibrierung durchgeführt. Da im Bereich der südlichen Buntsandsteinareale kein Grundwassergleichenplan vorlag, konnte in diesem Gebiet nur instationär anhand der Brunnen kalibriert werden.

Eine optimale Anpassung der modellierten Werte (predicted values) und gemessenen Werte (observed values) wird durch eine Regressionsgerade mit einem Anstieg=1 und einen Korrelationskoeffizienten r nahe bei 1 repräsentiert. Zudem muss der Korrelationskoeffizient hinsichtlich seines Signifikanzniveaus untersucht werden. Für hydrogeologische Kalibrierungen ist ein Signifikanzniveau von 99 % als erstrebenswert anzusehen. Aufgrund der erhöhten Anforderungen an die Kalibrierung wurde dieses erhöhte Signifikanzniveau gewählt. Als weiteres, wichtiges Kriterium ist wiederum der NRMS-Fehler anzuführen, welcher nach der Kalibrierung maximal 5 % betragen sollte.

Die stationäre Kalibrierung des Modells in der Talaue erfolgte anhand von 16 Grundwassergleichenplänen aus dem Zeitraum 1998 bis 2003, welche von LÄHNE (2003) im Rahmen einer Diplomarbeit erstellt wurden. Insbesondere das hydrologische Jahr 1999 wird durch elf Stichtagsmessungen abgebildet. Die Kalibrierungsgüte wird im Folgenden exemplarisch dargestellt.

Die statistische Anpassung der simulierten Werte an die gemessenen Werte des Stichtages 28.04.1999 erreicht einen Korrelationskoeffizienten von $r=0,9371$ (rote Messwerte in Abb. 4.3). Dies entspricht nach dem einseitigen t-Test und bei einem Stichprobenumfang von 32 dem geprüften Vertrauensintervall von 99 %. Der Zusammenhang zwischen den gemessenen und den simulierten Werten ist somit als hoch signifikant anzusehen. Beim Vergleich zwischen der Gesamtheit des Grundwassergleichenplans (7.575 relevante Rasterpunkte) mit der Simulation wird ein Korrelationskoeffizient von $r=0,9248$ erreicht. Dieser ist ebenfalls hoch signifikant. Allerdings muss bei der Betrachtung dieses Zusammenhangs erwähnt werden, dass

dieser Vergleich nur bedingt aussagekräftig ist, da eine Gegenüberstellung von interpolierten und simulierten Werten erfolgt. Die Vergleichbarkeit dieser beiden Datensätze wird durch die Verschiedenheit der Verfahren zur Datengenerierung (Interpolation und Simulation) herabgesetzt.

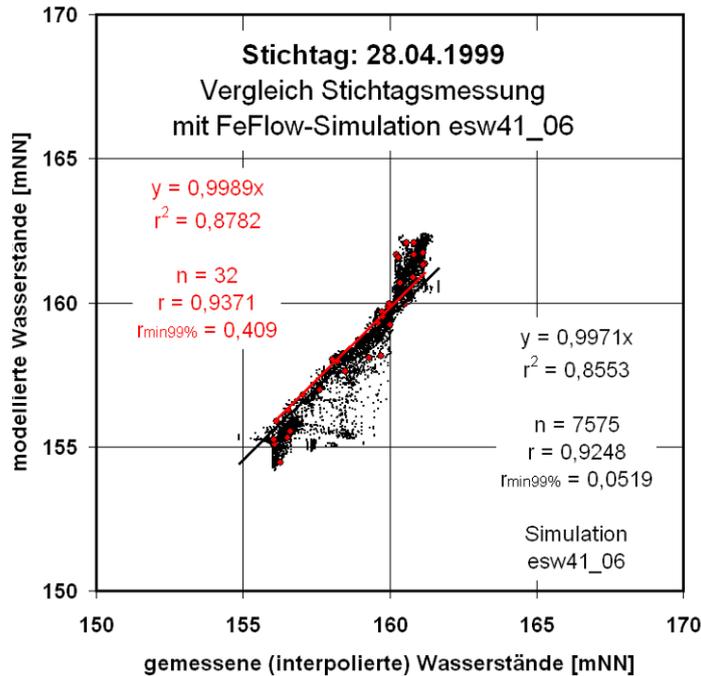


Abb. 4.3: Kalibrierergebnisse der Simulation esw41_06 für den Stichtag 28.04.1999.

Zwischen den gemessenen (Stichtagsmessung 28.04.1999, Surfer®-Interpolation) und den modellierten Werten (Grundwassergleichenplan, FEFLOW®-Simulation) ist eine Verschiebung der Verteilung ($n = 7575$) um einen halben Meter festzustellen (siehe Abb. 4.4), d.h. die FEFLOW®-Simulation überschätzt die gemessenen Werte um etwa diesen halben Meter. Die berechnete, mittlere Abweichung beträgt $+0,46$ m. Somit ist die Kalibrierung als qualitativ gut anzusehen.

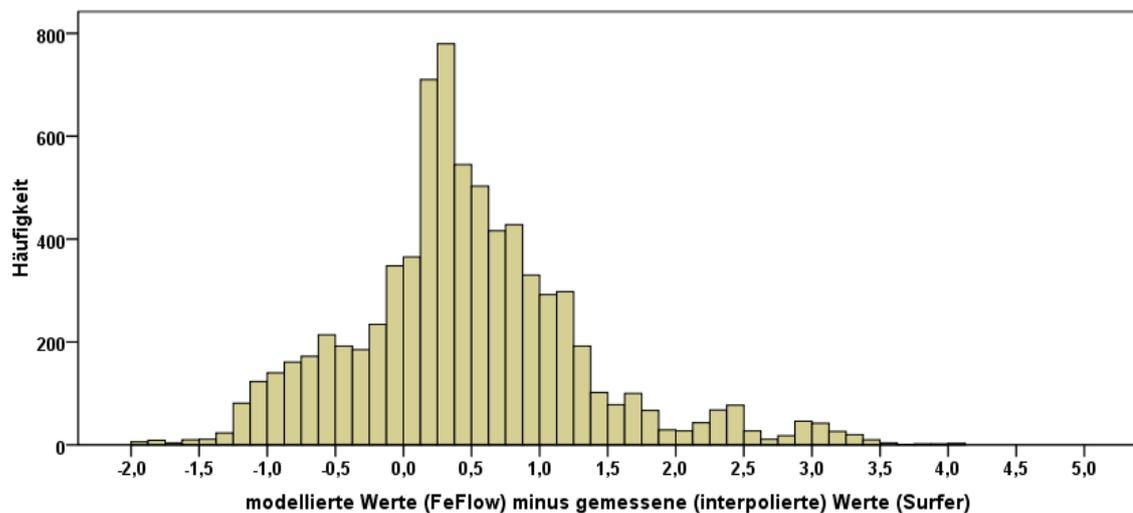


Abb. 4.4: Histogramm der Messwertedifferenz [m] zwischen den gemessenen und den modellierten Werten der Simulation esw41_06 für den Stichtag 28.04.1999.

Als horizontaler kf-Wert der Simulation esw41_06 für die x- und die y-Richtung wurde $2 \cdot 10^{-5}$ m/s verwendet, bei einem vertikalen kf-Wert von $2 \cdot 10^{-6}$ m/s für die Buntsandstein-Schichten. Die kf-Werte des quartären Kiesgrundwasserleiters entsprechen einer angepassten, horizontalen Verteilung, wie in Abb. 3.36 dargestellt.

Für die **instationäre Kalibrierung** der drei Auebrunnen Aue 1, Aue 2 und Aue 4 wurde auf die hydrologischen Jahre 1998 bis 2003 zurückgegriffen. Aus der vorliegenden Gesamtdatenreihe wurden diese fünf Jahre ausgewählt, da diese keine unplausiblen oder falschen Werte aufwiesen. Die Lage der drei Auebrunnen ist in Abb. 4.5 dargestellt.

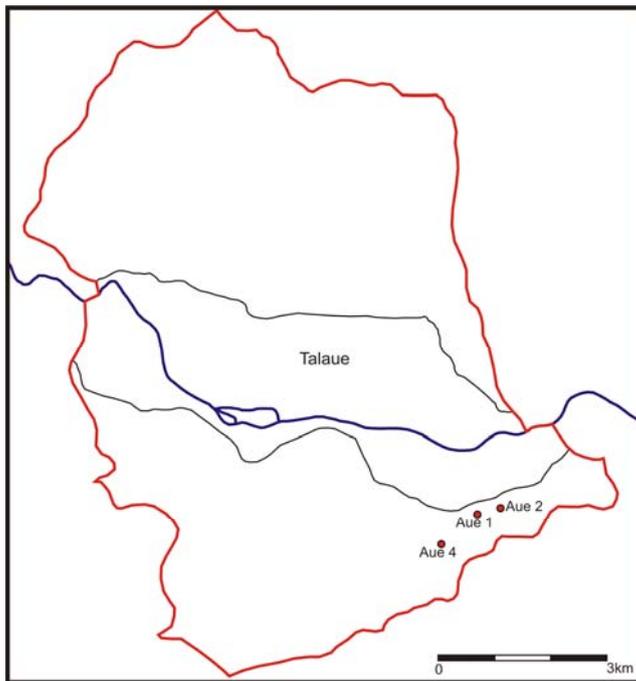


Abb. 4.5: Lage der kalibrierten Brunnen Aue 1, Aue 2 und Aue 4 im Buntsandstein südlich der Talaue.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden in diesem Arbeitsschritt die Porositäten in verschiedenen Modelldurchläufen kalibriert. Die Veränderung der jeweiligen Modellergebnisse aus den verschiedenen Werten für die Porosität wurde ausgewertet. Die Auswertung kann sowohl graphisch als auch mit beschreibenden Maßzahlen, wie z.B. der Standardabweichung erfolgen. Die Standardabweichung wurde gewählt, um die Schwankungsbreite der Datenreihe im zeitlichen Verlauf zu analysieren.

Für die hydrologischen Jahre 1998 bis 2003 wurden die Grundwasserstände des Brunnens Aue1 bei verschiedenen, angenommenen Porositäten simuliert (siehe Abb. 4.6).

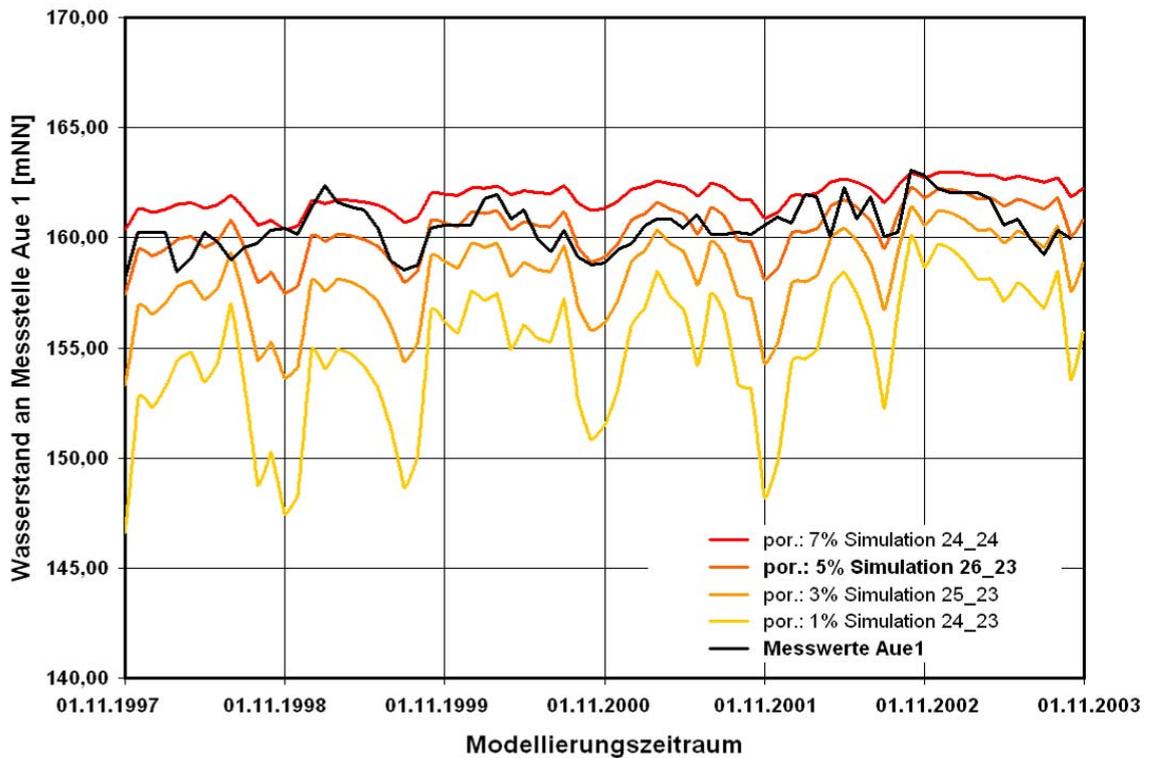


Abb. 4.6: Schwankungsbreite verschiedener Simulationsergebnisse für den Brunnen Aue1 mit veränderten Porositäten für die hydrologischen Jahre 1998 bis 2003.

Bei der Gegenüberstellung der Simulationsergebnisse bzgl. der Porosität des Buntsandsteins (Abb. 4.6) wird ersichtlich, dass die Porosität von 5 % die beste Anpassung liefert. Insbesondere bei der Reduzierung der Porosität auf 1 % bzw. 3 % erhöht sich die Schwankungsbreite der simulierten Wasserstände an Brunnen Aue1 deutlich. Bei der Betrachtung der Standardabweichung dieser modellierten Zeitreihen, wird dieses visuelle Ergebnis bestätigt. Die Standardabweichung der Zeitreihe der Simulation esw26_23 mit der Porosität von 5 % weist einen Wert von 1,137 m auf. Der Unterschied zu der Standardabweichung zu den Messwerten der Datenreihe an Brunnen Aue1 ist relativ gering ($x=-0,120$ m). Die Anpassung mit der Porosität von 5 % weist somit die beste, statistische Maßzahl auf und ist dementsprechend als am besten kalibriert anzusehen (siehe Tab. 4.2). RAHBAR (1998) gibt die nutzbare Porosität des Brunnens Aue1 mit 8,3 % an. Diese Angabe wurde nach der Formel von MAROTZ (1968) abgeleitet.

Tab. 4.2: Statistische Auswertung der oben dargestellten Simulationsergebnisse hinsichtlich der Standardabweichung innerhalb der Zeitreihen.

Simulation	Standardabw.	Differenz	Porosität
esw24_24	0,637	0,379	7%
Messwerte	1,092	-	-
esw26_23	1,137	-0,120	5%
esw25_23	1,823	-0,806	3%
esw24_23	2,939	-1,922	1%

Bei der Kalibrierung der Brunnen Aue 1 und Aue 2 konnte eine gute Anpassung der modellierten Wasserstände an die gemessenen Wasserstände der hydrologischen Jahre 1998 bis 2003 erreicht werden. Der durch die Anpassung erzielte Korrelationskoeffizient r lag für den Brunnen Aue 1 bei $r=0,3555$ und für den Brunnen Aue 2 bei $r=0,3082$. Nach dem einseitigen t-Test für den Korrelationskoeffizienten liegt dieser Wert innerhalb des 99 %-Vertrauensintervall für einen Stichprobenumfang $n=72$. Der betrachtete statistische Zusammenhang ist somit hoch signifikant (siehe Abb. 4.7).

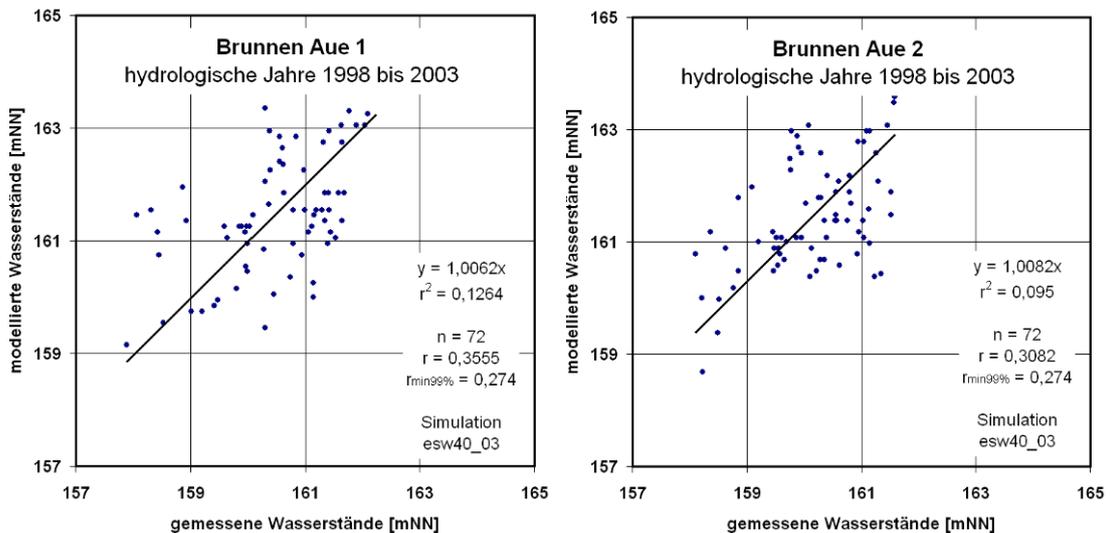


Abb. 4.7: Kalibrierergebnisse der Simulation esw40_03 für die Brunnen Aue 1 und Aue 2.

Der einseitige t-Test konnte genutzt werden, da bei einer Kalibrierung von einer positiven Korrelation der gemessenen mit den modellierten Daten ausgegangen werden kann. Die Tests auf Normalverteilung für die Datenanalysen, welche in Abb. 4.7 und Abb. 4.8 dargestellt sind, wurden mit SPSS® und dem Kolmogorov-Smirnov-Test durchgeführt. Alle analysierten Datenreihen weisen eine Normalverteilung auf.

Tab. 4.3: Übersicht der Testergebnisse der Normalverteilungstests (Kolmogorov-Smirnov-Test).

kalibrierte Brunnen / Messstellen	Test auf Normalverteilung entsprechend dem Kolmogorov-Smirnov-Test erfüllt (asmp. Signifikanz)	
	Messwerte	modellierte Werte
Aue 1	ja (0,222)	ja (0,535)
Aue 2	ja (0,177)	ja (0,579)
Aue 4	ja (0,882)	ja (0,798)
Aue 1, Aue 2 und Aue 4	ja (0,645)	ja (0,158)

Bei der Gegenüberstellung der modellierten Werte mit den gemessenen Werten für Brunnen Aue 4 konnte ein Korrelationskoeffizient von $r=0,4993$ erreicht werden. Dies entspricht nach dem t-Test (einseitig) ebenfalls dem Vertrauensintervall von 99 %, dass ein statistischer Zusammenhang zwischen den gemessenen und den modellierten Werten besteht (siehe Abb. 4.8).

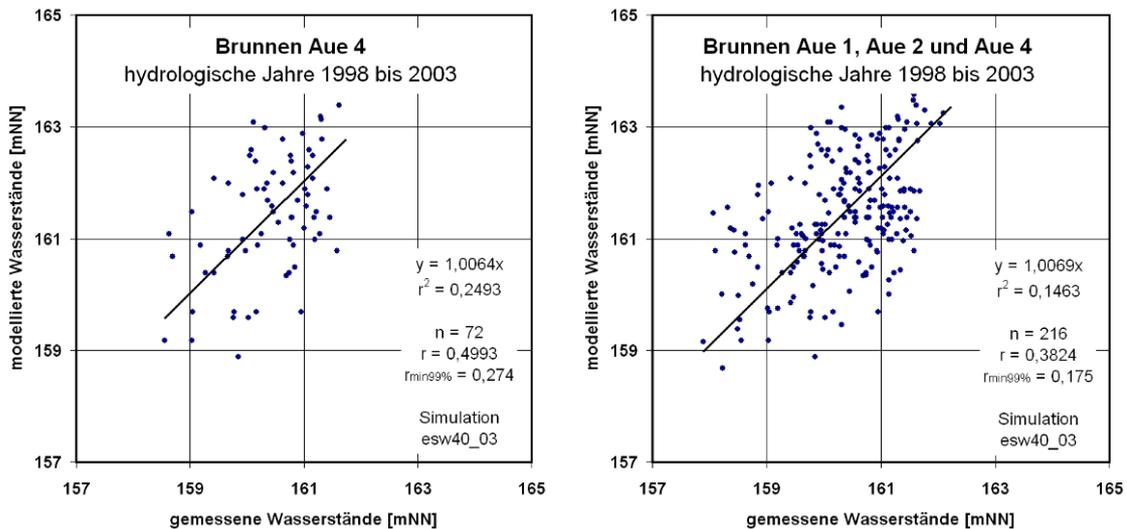


Abb. 4.8: Kalibrierergebnisse der Simulation esw40_03 für den Brunnen Aue 4 und die Gesamtkalibrierergebnisse der drei Aue-Brunnen.

Bei der Zusammenfassung der Kalibrierergebnisse der drei Aue-Brunnen in eine Korrelationsanalyse ergab sich für einen Stichprobenumfang von $n=216$ ein Korrelationskoeffizient von $r=0,3824$. Dieser entspricht nach dem einseitigen t-Test einem Signifikanzniveau von 99 %. Der statistische Zusammenhang zwischen den beiden korrelierten Messreihen ist somit hoch signifikant. Bei allen vier Diagrammen liegt der Anstieg der Regressionsgerade zwischen 1,0062 und 1,0082. Eine optimale Anpassung würde eine Regressionsgerade mit der Gleichung $y=x$ ergeben. Die berechneten Anstiege kommen diesem Idealergebnis sehr nahe.

Die Simulation esw40_03 wurde mit einem horizontalen k_f -Wert von $2 \cdot 10^{-5}$ m/s und einem vertikalen k_f -Wert von $2 \cdot 10^{-6}$ m/s für die Buntsandstein-Schichten durchgeführt. Im Vergleich zu anderen Simulationen konnten mit dieser Simulation die gemessenen Werte am besten nachgebildet werden (vergl. Abb. 4.6). Als Randbedingungen wurde neben den Entnahmemengen der Aue-Brunnen und dem Höllgraben der Wasserstand der Werra implementiert. Als Durchlässigkeit des angrenzenden Kies-Aquifers wurde die initial interpolierte Verteilung der k_f -Werte integriert.

4.5. Einfluss der Werra auf den Brunnen Aue 1

Ausgehend von dem kalibrierten Modell wurde der Einfluss der Werra auf die Wasserstände der Aue-Brunnen untersucht (Simulationszeitraum November 1997 bis Oktober 2003).

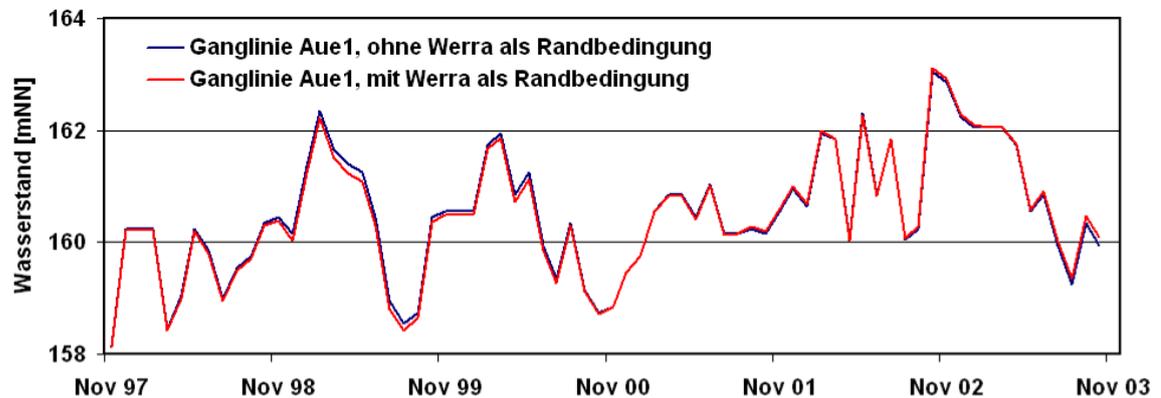


Abb. 4.9: Wasserstände an Brunnen Aue 1 nach verschiedenen Simulationen, mit und ohne der Werra als Randbedingung (November 1997 bis Oktober 2003; Simulationen esw40_03a und esw40_03b).

Der Einfluss der Werra-Ganglinie auf die exemplarisch gewählte Ganglinie des Brunnens Aue 1 ist als gering zu bezeichnen. Bei dem Vergleich der Simulationen (Abb. 4.9) ist eine Änderung des simulierten Wasserstandes von maximal 13 cm zu beobachten. In Phasen der hohen Werra-Wasserstände ist immer ein Anstieg in der Differenzenbetrachtung festzustellen, da in diesen Phasen das Werrawasser in den quartären und in den Buntsandstein-Grundwasserleiter infiltriert. Diese hydraulischen Ereignisse sind in geringem Maße in den Simulationen nachweisbar (Abb. 4.10).

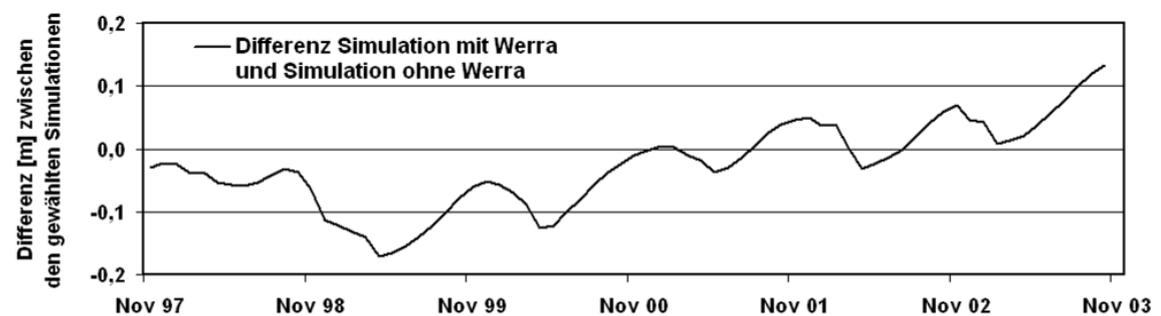


Abb. 4.10: Differenz zwischen der Simulation ohne Werra-Randbedingung und der Simulation mit Werra-Randbedingung (November 1997 bis Oktober 2003; Simulationen esw40_03a und esw40_03b).

4.6. *Bewertung der genutzten Verfahren und Methoden*

Im Rahmen der Kalibrierung des hydrogeologischen Modells wurden verschiedene Parameter genutzt, um das Modell zu kalibrieren. Ein besonderes Augenmerk lag auf der Quantifizierung der Kalibrierergebnisse. Zur Güteabschätzung der Kalibrierung werden i.A. zwei statistische Analysen genutzt:

- Anpassungsfehler (u.a. RMSE, NRMS) und
- Regressionsanalysen.

Beide Methoden liefern eine Güte-Einschätzung der Kalibrierung. Je kleiner der Anpassungsfehler bei verschiedenen Simulationen eines Untersuchungsgebietes ist, umso besser ist die Anpassung der modellierten Werte an die gemessenen Werte. Des Weiteren ist die Anpassung umso besser, je höher das Bestimmtheitsmaß ist. Zudem muss der Anstieg der Regressionsgeraden nahe bei 1,0 liegen, damit die modellierten Werte optimal an die gemessenen Werte angepasst sind. Das Bestimmtheitsmaß wird anschließend mittels t-Test auf das gewählte Vertrauensintervall geprüft. Im Folgenden soll anhand von zwei Beispielen die Aussagequalität dieser Verfahren dargestellt werden.

Beide Methoden sind Stand der Technik, weisen aber Schwächen auf, so dass die Ergebnisse verschiedener Modellgebiete nur bedingt vergleichbar sind. Insbesondere die Anwendung der Regressionsgeraden hängt neben der Güte der Anpassung auch von der Differenz des minimalen und des maximalen gemessenen Wertes ab. In Abb. 4.11 ist eine schlechte, generische Anpassung von modellierten Wasserständen an die gemessenen Wasserstände dargestellt. Das Bestimmtheitsmaß dieser Anpassung liegt bei $R^2=0,0139$. Um die Aussagegüte dieser Analyse zu prüfen, wurde der Datensatz dupliziert und um 2m im Höhengniveau verändert. Dieser verdoppelte Datensatz wurde ebenfalls statistisch mit einer Regressionsgerade und dem Bestimmtheitsmaß analysiert. Durch die einfache Verdopplung der Messwerte und die 2 m-Verschiebung wurde ein Bestimmtheitsmaß von $R^2=0,3816$ erreicht. Diese Veränderung des Datensatzes entspricht bspw. einer zweiten, ebenfalls schlechten Anpassung eines weiteren Brunnens, dessen Wasserspiegel immer zwei Meter tiefer liegt, als der Wasserspiegel des ersten Brunnens. Ebenso sind ein Grundwassergleichenplan mit zwei voneinander unabhängigen Bereichen oder eine längere Ganglinie mit einer größeren Schwankungsbreite im Wasserstand vorstellbar. Die Generierung des Datensatzes wurde bewusst durch eine 2m-Verschiebung umgesetzt, um potentielle Unterschiede gut deutlich zu machen.

Durch diese Analyse soll gezeigt werden, dass durch die Analyse der Kalibrierung mittels einer Regressionsgerade zwar die Simulationen eines Modellgebietes untereinander vergleichbar sind, aber dass die statistischen Maßzahlen nicht zum

Vergleich oder zur Einschätzung verschiedener Modellgebiete und zugehöriger Modellierungen dienen können.

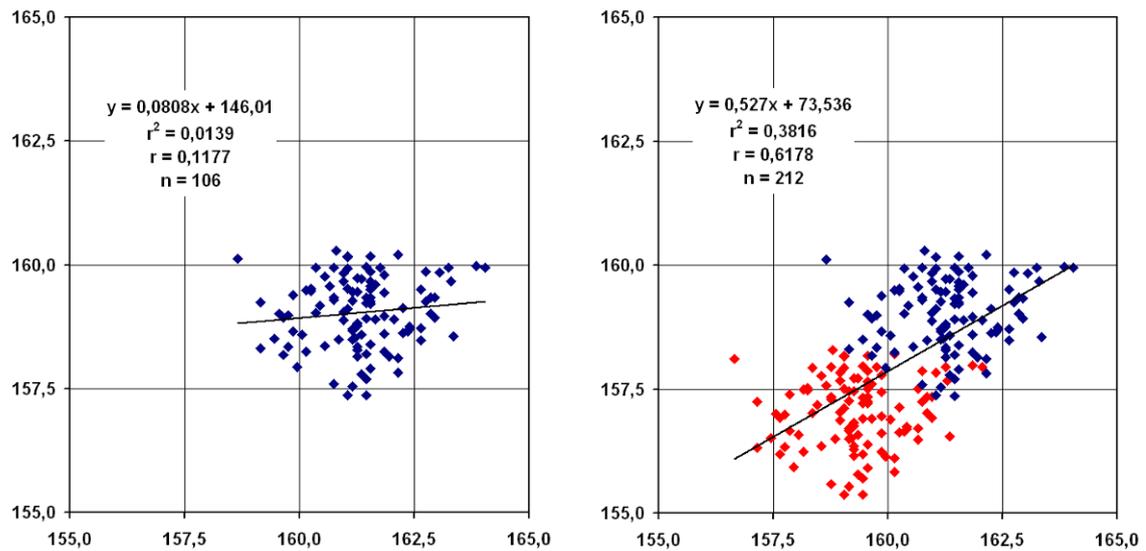


Abb. 4.11: Darstellung einer schlechten Kalibrierung (links) mit $R^2=0,0139$ und diese schlechte Kalibrierung mit einer zusätzlichen, hypothetischen, ebenfalls schlechten Anpassung (rechts, rot) mit $R^2=0,3816$.

Bei der Anwendung des in Gleichung (Gl. 4.12) beschriebenen Anpassungsfehlers (RMSE, siehe Kap. 4.4) bestehen ähnliche Unzulänglichkeiten in der Aussage zur Kalibrierungsqualität. Für die Abb. 4.12 wurden verschiedene Szenarien mit einem RMSE von 0,5 generisch erzeugt. Der Unterschied dieser Analysen liegt im Stichprobenumfang (siehe Tab. 4.4).

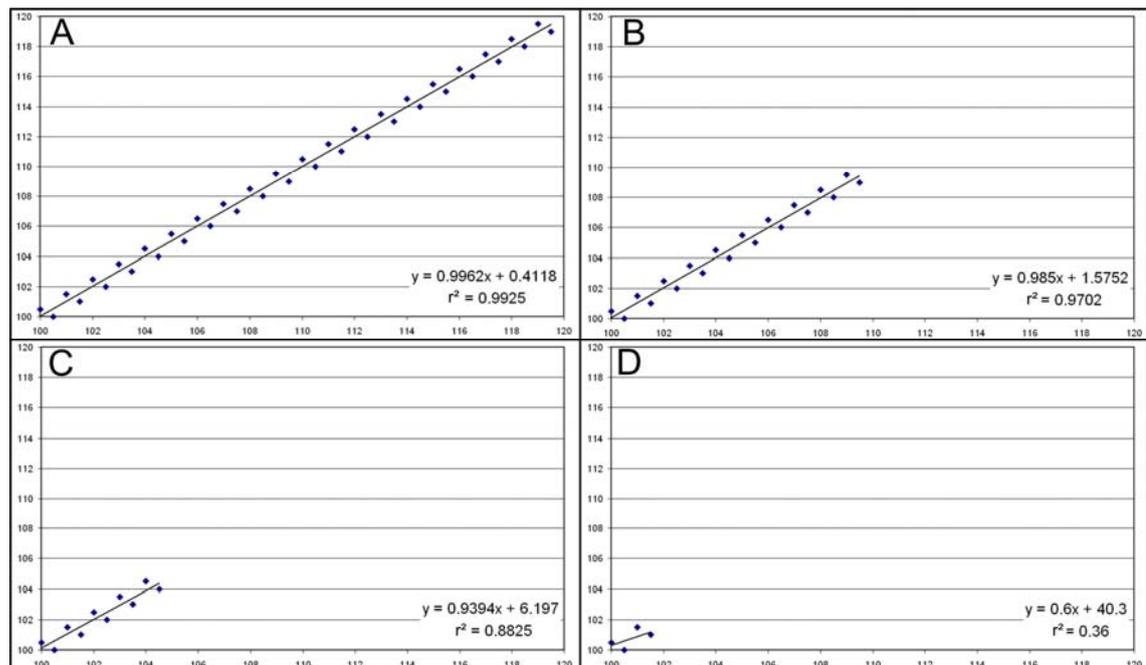


Abb. 4.12: Vier generische Kalibrierungen mit gleichem RMSE und den zugehörigen Regressionsanalysen, die zeigen, dass ein RMSE von 0,5m nicht zwangsläufig einer guten Kalibrierung entspricht.

Bei der Generierung dieser Datenreihen wurde ein gleichmäßiger Anstieg der Werte auf der x-Achsen mit jeweils angepassten (abwechselnd +0,50 m oder -0,50 m) y-Werten versehen. Bei dem gewählten RMSE ergibt sich optisch und bei der Regressionsanalyse in Abb. 4.12 (A) eine sehr gute Anpassung. Im Gegensatz ergibt sich in Abb. 4.12 (D) ein Anstieg der Regressionsgerade von $0,6x$ und ein Bestimmtheitsmaß von $r^2=0,36$. Der RMSE beträgt wie in Abb. 4.12 (A) 0,5 m. Der RMSE ist also nur für relative Vergleiche von Modellkalibrierungen mit gleichem Stichprobenumfang geeignet. Es sind damit keine anwendungsübergreifenden, allgemeinen Aussagen zur Kalibrierungsgüte möglich.

Tab. 4.4: Übersicht der statistischen Parameter der vier generischen Kalibrierungen, welche in Abb. 4.12 dargestellt sind.

Anzahl Punkte	A 40	B 20	C 10	D 4
RMSE	0,5	0,5	0,5	0,5
NRMS	1,4 %	5,9 %	14,3 %	100,0 %
r^2	0,9925	0,9702	0,8825	0,36
Regressionsgleichung	$y=0,996x+0,4$	$y=0,985x+1,6$	$y=0,939x+6,2$	$y=0,6x+40,3$

Im Rahmen der Kalibrierung der vorliegenden Arbeit wurde der NRMS-Fehler genutzt, um die Kalibrierungsgüte abzuschätzen. Die Kalibrierungen wurden bis zum Abbruchkriterium $NRMS < 5 \%$ durchgeführt und die Modelle mit einem NRMS-Fehler wurden als kalibriert definiert. Üblicherweise wird diese Fehlergrenze von 5% angesetzt, um die Kalibrierung abzuschließen. Für Abb. 4.12 (B) ergibt sich ein NRMS-Fehler von 5,9 %. Somit ist der als Ziel definierte Fehler von 5 % verfehlt worden. Allerdings erreicht das Bestimmtheitsmaß einen Wert von $r^2=0,9702$ und somit jedwedem zuvor gewähltes Vertrauensintervall. Die beiden Aussagen über die Güte der Kalibrierung widersprechen sich. Beim Heranziehen beider Kriterien ist also keine abschließende Aussage über die Kalibrierungsgüte möglich.

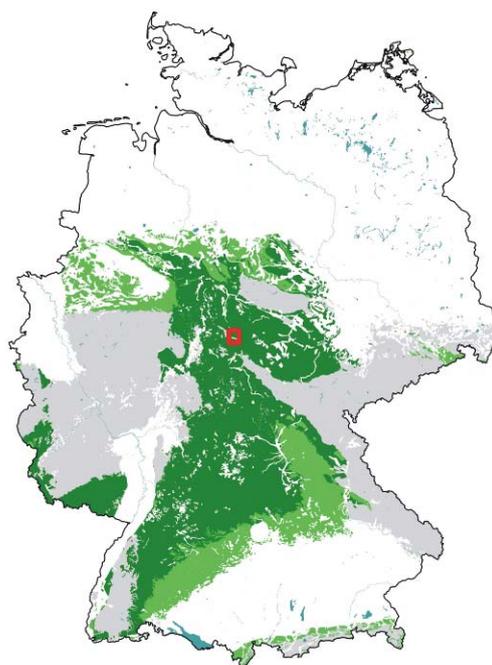
Sowohl die Anpassungsfehler RMSE und NRMS, als auch die Regressionsanalyse können also nur bedingt für den Vergleich von Modellkalibrierungen genutzt werden. Nur das relative Vergleichen verschiedener Simulationen eines Modellgebietes ist damit möglich. Des Weiteren gibt es u.a. in der Hydrogeologie und Hydrologie viele andere statistische Verfahren, um Modellanpassungen an reale Messwerte zu überprüfen. Dabei handelt es sich oft um mathematische Erweiterungen des NRMS, wie z.B. der CVRMSE, der RSR, der NSE oder der Index of Agreement (KRAUSE ET AL. 2005, LEGATES & MCCABE 1999, GUPTA ET AL. 1999, MORIASI ET AL. 2007, NASH & SUTCLIFFE 1970, siehe Anhang). In der vorliegenden Arbeit wurden der RMSE und der NRMS genutzt, da diese die am häufigsten verwendeten Parameter in der Hydrogeologie sind.

5. Zusammenfassung und Ausblick

5.1. Anwendbarkeit der beschriebenen Methoden

Die ausgewählten und beschriebenen Methoden zur Grundwassermodellierung eignen sich sehr gut zur hydrogeologischen Erfassung, Beschreibung und Modellierung des Untersuchungsgebietes. Durch eine Analyse der Eigenschaften des Modellgebietes können weitere Gebiete in Deutschland definiert werden, in denen die gewählten Methoden, insbesondere auch das Berechnungsverfahren für den Grundwasserflurabstand Hydro-FaBer, angewendet werden können.

Das exemplarisch gewählte Modellgebiet Eschwege steht für eine Vielzahl anderer Untersuchungsgebiete mit ähnlichen hydrogeologischen und geologischen Verhältnissen. Zunächst sind hier die Gebiete in Deutschland anzuführen, in denen die Gesteine des Mesozoikums (Trias, Jura, Kreide) vorkommen (Abb. 5.1). Diese entsprechen in ihrem Alter bzw. ihrer Genese den Gesteinen der Trias bei Eschwege.



Zeichenerklärung

	Untersuchungsgebiet
	Gewässer
	Quartär, Tertiär
	Kreide, Jura
	Trias
	Prä-Trias

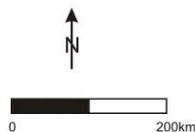


Abb. 5.1: Gebiete in Deutschland mit ähnlichen geologischen Eigenschaften, Datengrundlage: HAD (BMU 2003).



Zeichenerklärung

	Untersuchungsgebiet
	Gewässer
	Mittelgebirge (max. schwach metamorph)
	sonstige Gesteine

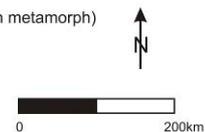


Abb. 5.2: Gebiete in Deutschland mit ähnlichen lithologischen Eigenschaften, Datengrundlage: HAD (BMU 2003).

Ein weiteres Kriterium für die Anwendbarkeit der beschriebenen Verfahren ist eine ähnliche lithologische Ausbildung der Gesteine und eine vergleichbare Morphologie des Untersuchungsgebietes. Hierfür wurde aus dem Hydrogeologischen Atlas von Deutschland (BMU 2003) die Karte mit den Gesteinstypen herangezogen. Die dort aufgeführte Klasse „Mittelgebirge, vorwiegend aufgebaut aus schwach diagenetisch veränderten Festgesteinen“ deckt im Untersuchungsgebiet Eschwege die relevanten Gesteine der Trias ab. Somit stellen die in Abb. 5.2 grün markierten Bereiche aus lithologischer Sicht potentielle Anwendungsgebiete der beschriebenen Methoden dar.

Durch eine Verschneidung beider Kartendarstellungen können die Bereiche Deutschlands dargestellt werden, die beide Kriterien erfüllen. In diesen Gebieten sind sowohl Hydro-FaBer als auch die anderen, beschriebenen Methoden für die geologische und hydrogeologische Modellierung einsetzbar (Abb. 5.3).

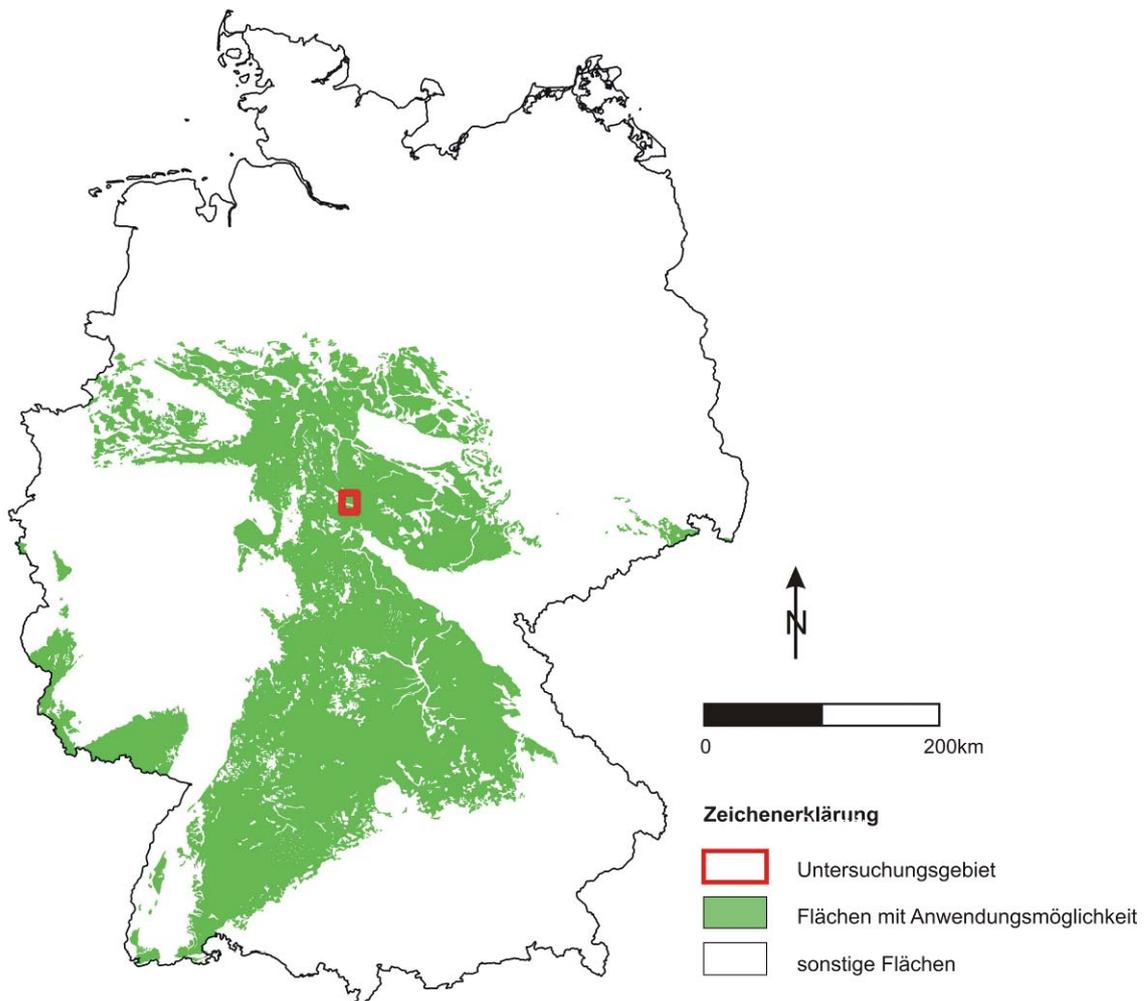


Abb. 5.3: Gebiete mit uneingeschränkter Anwendbarkeit der beschriebenen Methoden.

Die Gebiete, auf welche die beschriebenen Methoden (incl. dem Verfahren Hydro-FaBer) anwendbar sind, weisen eine Gesamtfläche von etwa 86.000 km² auf. Als Teilgebiete sind beispielhaft zu nennen:

- Thüringer Becken,

- nördlicher und westlicher Harzrand,
- Fränkische und Schwäbische Alb,
- Odenwald und Spessart,
- Pfälzerwald und
- Sächsische Schweiz.

Für das Untersuchungsgebiet bei Eschwege wurden zudem lokale Erkenntnisse gewonnen. Durch die Erstellung des geologischen Modells können nun 3D-bezogene Auswertungen im Untersuchungsgebiet durchgeführt werden. Das erstellte Modell ist u.a. für geothermische Fragestellungen verwendbar. Zudem wurde eine Kreuzkorrelation der geförderten Wässer der Auebrunnen durchgeführt. Dadurch konnten zwei verschiedene Grundwässer nachgewiesen werden, die zeitlich nacheinander, zwischen den Jahren 1977 und 1982, durch die Grundwasserentnahme aktiviert wurden.

5.2. Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden bestehende Methoden in der Hydrogeologie dokumentiert, Vor- und Nachteile aufgezeigt und eine Methode für den Grundwasserflurabstand in den Festgesteinsbereichen (Hydro-FaBer-Verfahren) entwickelt und ausführlich beschrieben. Dieses Verfahren eignet sich gut, den Grundwasserflurabstand von maximal schwach metamorphen, geologischen Einheiten des Mesozoikums zu bestimmen. Insbesondere in Gebieten mit schlechter hydrogeologischer Datenlage eignet sich Hydro-FaBer, einen primären Grundwassergleichenplan bzw. -flurabstandsplan zu ermitteln. In einer derzeit laufenden Master-Arbeit (ALTENSTEIN 2013) wird Hydro-FaBer auf das Rappbode-Einzugsgebiet angewandt und mögliche Weiterentwicklungsmöglichkeiten des Verfahrens bzgl. Integration von geologischen Informationen und optimierter Datenintegration geprüft.

Des Weiteren besteht, wie in Kap. 4.6 beschrieben ein methodisches Defizit, die Güte von Kalibrierungsergebnissen zu quantifizieren. Aufgrund des Schwerpunktes der vorliegenden Arbeit war es nicht möglich, die Quantifizierung von Kalibrierungen tiefer zu bearbeiten. Verschiedene Methoden werden in der Praxis herangezogen, die Qualität verschiedener Kalibrierungen von Modellszenarien zu vergleichen. Dadurch können aber nur relative Aussagen zwischen zwei Modellszenarien getroffen werden. Es können daher keine allgemeingültigen Aussagen über die Kalibrierergebnisse getroffen werden. Insbesondere bleiben zudem bei den existierenden Verfahren wichtige Parameter wie die zeitliche und räumliche Modellauflösung bei der Betrachtung außen vor. Die Kalibrierungszielkriterien sind für zeitlich und/oder räumlich gering aufgelöste

Modelle einfacher zu erfüllen. Diese Modelle werden also vergleichsweise früh aus dem Kalibrierungsprozess entnommen und als kalibriert definiert. Im Rahmen weiterführender, eigener Forschungen soll diese Methodenlücke zukünftig näher betrachtet werden.

Literaturverzeichnis

- AD-HOC-AG-BODEN (1994): Bodenkundliche Kartieranleitung. – 4. verbesserte und erweiterte Auflage (KA 4), E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 392 S.
- AD-HOC-AG-BODEN (2000): Methodendokumentation Boden – Auswertungsmethoden zur Beurteilung der Empfindlichkeit und Belastbarkeit von Böden. – Geol. Jb., Reihe G, Heft SG1, BGR, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 232 S.
- AD-HOC-AG-BODEN (2005): Bodenkundliche Kartieranleitung. – 5. verbesserte und erweiterte Auflage (KA 5), E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 438 S.
- ALLER, L., BENNETT, T., LEHR, J.H. & PETTY, R.J. (1985): DRASTIC - a standardized system for evaluating ground water pollution potential using hydrogeologic settings. – U.S. Environmental Protection Agency, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, Oklahoma, EPA/600/2-85/018, 163 S.
- ALLER, L., BENNETT, T., LEHR, J. H., PETTY, R. J. AND HACKETT, G. (1987): DRASTIC - A standardized system for evaluating groundwater pollution potential using hydrogeologic settings: EPA-600/2-87-035, 622 S.
- ALTENSTEIN, D. (2013, in Vorb.): Berechnung des Grundwasserflurabstandes auf der Grundlage von Oberflächenwasserdaten zur Nutzung in Festgesteinsbereichen am Beispiel des Rappbode-Einzugsgebietes (Harz). – MSc-Arbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, unveröff.
- ARBEITSAUSCHUSS BUNTSANDSTEIN DER GEOLOGISCHEN LANDESÄMTER (1974): Richtlinien zur Gliederung des westdeutschen Buntsandsteins. – Geol. Jb., A 25, Hannover, 123-125
- ARMBRUSTER, V., DUDDA, W., HAMMER, J., HÄFFELIN, H., HERRE, H., KILGER, B.-M., PLUM, H., RUOFF, H., SIEBER, A. & WALDMANN, F. (2004): Hydrogeologische Erkundung Baden-Württemberg, Grundwasserdynamik, Grundwasserhaushalt, Grundwasserschutz, Enztal-Pforzheim, Mappe 3. – LGRB Baden-Württemberg, 40 S.
- BAIR, E.S. (2001): Models in the Courtroom. – ANDERSON, M.G. & BATES, P.D.: Model Validation – Perspectives in Hydrogeological Science, John Wiley & Sons Ltd, London, 57-76

- BECKER, A. (1992): Methodische Aspekte der Regionalisierung. – KLEEBERG, H.-B. (Hrsg.): Regionalisierung in der Hydrogeologie. – DFG, Mitteilung XI der Senatskomm. f. Wasserforsch., 16-32
- BECKER, F. (2002): Zechsteinkalk und Unterer Werra-Anhydrit (Zechstein 1) in Hessen: Fazies, Sequenzstratigraphie und Diagenese. – Geol. Abh. Hessen, 109, Wiesbaden, 231 S.
- BENDER, S. (2007): Die Aussageunschärfe bei der Verwendung heterogener Datensätze im Rahmen wasserwirtschaftlicher Fragestellungen. – Bochumer geowiss. Arb., H. 8, Ruhr-Universität Bochum, 99 S.
- BERG, R.C. & KEEFER, D.A. (2004): Commentary – Three-dimensional Geologic Modeling: Challenging our Terminology and our Understanding of Geologic Maps. – BERG, R.C., RUSSELL, H. & THORLEIFSON, L.H. (Hrsg.): Three-dimensional Geological Mapping for Groundwater Applications: Workshop Extended Abstracts, Illinois State Geological Survey, Open File Series 2004-8, 1-6
- BERG, R.C. & THORLEIFSON, L.H. (2001): Geologic Models for Groundwater Flow Modeling. – Workshop Extended Abstracts, Illinois State Geological Survey, Open File Series, 2001-1, 62 S.
- BERLEKAMP, L.-R. & PRANZAS, N. (1992): Erfassung und Bewertung von Bodenversiegelungen unter hydrologisch-stadtplanerischen Aspekten am Beispiel eines Talraums von Hamburg. – Dissertation, Universität Hamburg, 264 S.
- BERNHARD, KAUFMANN & KNAB (1994): Gutachten zu den Untergrund- und Grundwasserverhältnissen zwischen Station 2490.00 und 3100.00 der Variante 2 (Tunnellösung) der Ortsumgehung Meinhard-Frieda der B 249 sowie zu möglichen Auswirkungen auf das „Verbandswasserwerk Werratal“, Werra-Meißner-Kreis. – Gutachten des Hess. L.-A. f. Bodenforsch., 321-341/384/94 Be-Ka/Ge, Archiv-Nr. 4826-116
- BEYER, W. (1964): Zur Bestimmung der Wasserdurchlässigkeit von Kiesen und Sanden aus der Kornverteilungskurve. – Wasserwirtschaft, 6(6), Berlin, 165-168
- BLA-GEO (2008): Empfehlungen für die Charakterisierung und Parametrisierung des Transportpfades Boden-Grundwasser als Grundlage für die Sickerwasserprognose. – Ad-hoc-AG Hydrogeologie und Ad-hoc-AG Boden, UAG Sickerwasserprognose, Version 2.0, 85 S.
- BLÖSCHL, G. (1999): Scale and scaling in hydrology: A framework for thinking and Analysis. – 1. Auflage, Wiley, Chichester, 352 S.
- BMU (2003): Hydrologischer Atlas von Deutschland. – Lieferung 1-3 mit 51 Kartentafeln, Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Bonn/Berlin 2000/2001/2003

- BOUWER, H. (1989): The Bouwer and Rice Slug Test – An Update. – *Ground Water*, 27 (3), 304-309
- BOUWER, H. & RICE, R.C. (1976): A Slug Test for Determining Hydraulic Conductivity of Unconfined Aquifers with Completely or Partially Penetrated Wells. – *Water Resources Research*, 12 (3), 424-428
- BRONSTERT, A., CARRERA, J., LEAVESLEY, G. & MÖLDERS, N. (2005): Scale Issues. – BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. & LÜTKEMEIER, S.: *Coupled Models for the Hydrogeological Cycle*. – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 21-43
- BRÜHL, H. & THEURER, G. (1986): Untersuchungen zur Wechselwirkung zwischen der Werra und dem Grundwasser in der Talaue im Bereich der Trinkwasserbrunnen bei Aue. – *Berliner Geogr. Abh.*, 41, Berlin, 41-51
- BRÜNING, U. (1986): Stratigraphie und Lithofazies des Unteren Buntsandsteins in Südniedersachsen und Nordhessen. – *Geol. Jb.*, A 90, Hannover, 3-125
- BUCHHOLZ, O. (2001): *Hydrogeologische Modelle – Theorie der Modellbildung und Beschreibungssystematik*. – RWTH Aachen, Mitteilungen 122, Verlag Mainz, Wissenschaftsverlag Aachen, 300 S.
- BUCHSTEIN, H. (1984): *Zur Lithostratigraphie der Salmünster-Folge bei Eschwege (Nordhessen)*. – Diplomarbeit, FU Berlin, 130 S.
- BÜCKING, H., PRÖSCHOLDT, H. & ZEISE, O. (1904): *Blatt Kella – Erläuterungen der geologischen Specialkarte von Preußen und den Thüringischen Staaten*. – Berlin, 21 S.
- BUSCH, K.-F., LUCKNER, L. & TIEMER, K. (1993): *Geohydraulik – Lehrbuch der Hydrologie, Band 3*. – 3. neubearb. Aufl., Gebrüder Bornträger, Stuttgart, Berlin, 497 S.
- CALCAGNO, P., CHILES, J.P., COURRIOUX, G. & GUILLEN, A. (2008): Geological modelling from field data and geological knowledge Part I. Modelling method coupling 3D potential-field interpolation and geological rules. – *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 171 (1-4), 147-157
- CARRERA, J. & BASTIDAS, L.A. (2005): Parameterisation of Complex Hydrogeological Systems. – BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. & LÜTKEMEIER, S. (Hrsg.): *Coupled Models for the Hydrogeological Cycle*. – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 123-164
- CARRERA, J. & NEUMAN, S.P. (1986): Estimation of aquifer parameters unter transient and steady state conditions, 3. Application to synthetic and field data. – *Water Resour. Res.*, 22 (2), 228-242

- COOPER, H.H. & JACOB, C. E. (1946): A generalized graphical method for evaluating formation constants and summarising well-field history. – Trans. Am. Geoph. Union, 27 (4), Richmond, 526-534
- CULSHAW, M. G. (2005): From concept towards reality: developing the attributed 3D geological model of the shallow subsurface. – Quart. J. of Engin. Geol. and Hydrogeol., 38 (3), 231-284
- DAGAN, G. (1989): Flow and Transport in Porous Formations. – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 465 S.
- DESBARATS, A.J., LOGAN, C.E., HINTON, M.J. & SHARPE, D.R. (2002): On the kriging of water table elevations using collateral information from a digital elevation model. Journal of Hydrology, 255, 25-38
- DIERSCH, H.-J. G. (2002): FEFLOW® 5.0 – User's Manual. – Wasy GmbH, 168 S.
- DIERSCH, H.-J. G. (2005): FEFLOW® 5.2 – User's Manual. – Wasy GmbH, 189 S.
- DIN 4049-3 (1994): Hydrologie, Teil 3, Begriffe zur quantitativen Hydrologie, 80 S.
- DVWK (1996): Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen. – Merkblätter zur Wasserwirtschaft, 238/1996, Bonn, Wirtschafts- und Verl.-Ges. Gas und Wasser, 135 S.
- EIGESTAD, G.T., DAHLE, H.K., HELLEVANG, B., RIIS, F., JOHANSEN, W.T. & OIAN, E. (2009): Geological modeling and simulation of CO₂ injection in the Johansen formation. – Computational Geosciences, 13 (4), 435-450
- EISERMANN, D. (2005): Multi-Spezies-Modellierung sanierungsrelevanter Fragestellungen für einen heterogenen Feldstandort: SAFIRA-Bitterfeld. – Dissertation, 17/2005, UfZ Leipzig-Halle, 214 S.
- ELMAHDY, S.I. & MOHAMED, M.M. (2012): Topographic attributes control groundwater flow and groundwater salinity of Al Ain, UAE: a prediction method using remote sensing and GIS. – J. Env. and Earth Sc., 2 (8), 1-14
- EVANS, R. (2003): Current themes, issues and challenges concerning the prediction of subsurface conditions. – ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 359-378
- FINKENWIRTH, A. (1963): Über die Möglichkeiten einer weiteren Erschließung von Grundwasser für die Stadtwerke Eschwege. – Gutachten des Hess. L.-A. f. Bodenforsch., 4826-38, 341-2759/63 Fkw/St
- FINKENWIRTH, A. (1970): Hydrogeologische Neuerkenntnisse in Nordhessen. – Notizbl. hess. L.-Amt Bodenforsch., 98, Wiesbaden, 212-233

- FUJIMAKI, R., KAWASAKI, A., FUJII, Y. & KANEKO, N. (2008): The influence of topography on the stream N concentration in the Tanzawa Mountains, Southern Kanto District, Japan. – *J. For. Res.*, 13 (6), 380-385
- GAERTNER, H. (1963): Zur Gliederung des Mittleren Buntsandsteins im thüringisch-nordhessischen Grenzgebiet. – *Geol. Jb.*, 80, Hannover, 741-770
- GAGANIS, P. & SMITH, L. (2001): A Bayesian approach to the quantification of the effect of model error on the predictions of groundwater models. – *Water Resour. Res.*, 37 (9), 2309-2322
- GARLEFF, K. (1966): Beitrag zur Deutung der Terrassen im unteren Werratal. – *Eiszeitalter und Gegenwart*, 17 (1), Wiesbaden, 118-124
- GAU, C. (2005): Geostatistische Simulationsverfahren als Werkzeug der Quantifizierung der Unsicherheit geologischer Untergrundmodelle für die Stadtplanung. – SCHRENK, M.(Hrsg.): *Proceedings - 10th International Conference on Information & Communication Technologies (ICT) in Urban Planning and Spatial Development and Impacts of ICT on Physical Space*, Selbstverlag des Instituts für EDV-gestützte Methoden in Architektur und Raumplanung der TU Wien, 623-630
- GAUGLITZ, E. (1975): Gutachten über die Baugrundverhältnisse in Flur 6 B der Gemarkung Eschwege-Niederhone. – Proj.-Nr. 248/30-E, 4. Ausfertigung, HLU-Gutachten 4726-25, unveröff., 17 S.
- GONZÁLEZ-AGUILERA, D., MUÑOZ-NIETO, A., GÓMEZ-LAHOZ, J., HERRERO-PASCUAL, J. & GUTIERREZ-ALONSO, G. (2009): 3D Digital Surveying and Modelling of Cave Geometry: Application to Paleolithic Rock Art. – *Sensors* 2009, 9 (2), 1108-1127
- GOSSEL, W. (2008): Schnittstellen bei der Kopplung von Modellierungssystemen der Hydrogeologie. – *Habilitation*, Martin Luther Universität Halle, 150 S.
- GOSSEL, W. & WYCISK, P. (2006): Berechnung der monatlichen Sickerwasserrate als Grundlage für die Berechnung der Grundwasserneubildung für ein regionales Grundwassermodell. – VOIGT, H.-J., KAUFMANN-KNOKE, R. & JAHNKE, C. (Hrsg.): *Indikatoren im Grundwasser*, SDGG, Heft 43, Kurzfassungen der Vorträge und Poster Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGG, 24.-28.05.06 in Cottbus, S. 140
- GRÁBNER, I. (1970): *Geologische Untersuchungen in der Umgebung von Wanfried.* – *Diplomarbeit*, Frankfurt (Main), 150 S.
- GROSSMANN, J. (2005): Einfaches Verfahren zur Berechnung der Grundwasserneubildung aus Niederschlag. – *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung* 49 (3), 162-163

- GROSSMANN, J. (2006): Anwendung und Optimierung des TUB-BGR-Verfahrens zur Berechnung der Grundwasserneubildung. – Hydrologie und Wasserbewirtschaftung 50 (4), 178-183
- GUNDLACH, H. & STOPPEL, D. (1966): Zur Geologie und Geochemie der Schwespatlagerstätten im Unterwerra-Grauwackengebirge. – Notizbl. hess. L.-Amt Bodenforsch., 94, Wiesbaden, 321-338
- GUPTA, H.V., SOROOSHIAN, S. & YAPO, P.O. (1999): Status of Automatic Calibration for Hydrologic Models: Comparison with Multilevel Expert Calibration. – Journal of Hydrologic Engineering, Vol. 4, No. 2, April 1999, 135-143
- HAAN, K. (1984): Zur Lithostratigraphie des Unteren Buntsandsteins bei Eschwege in Niederhessen. – Diplomarbeit, FU Berlin, 137 S.
- HAIJEMA, H.M. & MITCHEL-BRUKER, S. (2005): Are Water Tables a Subdued Replica of the Topography? – Ground Water, 43 (6), 781-786
- HAMPEL, M. & PEKDEGER, A. (1993): Die hydrogeologischen Verhältnisse im Eschweger Becken. – Berliner Geogr. Abh., 56, Berlin, 59-77
- HAUDE, W. (1954): Zur praktischen Bestimmung der aktuellen und potentiellen Evaporation und Evapotranspiration. – Mitt. DWD, Nr. 8, Bad Kissingen, 21 S.
- HAUDE, W. (1955): Zur Bestimmung der Verdunstung auf möglichst einfache Weise. – Mitt. DWD, 11 (2), 1-24
- HAZEN, A. (1893): Some physical properties of sands and gravels with special reference to their use in filtration. – 24th annual report state board of health Mass., Boston, 541-556
- HEGER, B. (1988): Hydrogeologische Bestandsaufnahme der Gemarkung Eschwege. – HLUG-Gutachten 4826-119, unveröff., 25 S.
- HILL, M. C. (2006): The Practical Use of Simplicity in Developing Ground Water Models. – Ground Water, 44 (6), 775-781
- HINTERDING, A., MÜLLER, A., GERLACH, N. & GABEL, F. (2003): Geostatistische und statistische Methoden und Auswerteverfahren für Geodaten mit Punkt- bzw. Flächenbezug. – Institute of Geoinformatics, Münster University, Unpublished Report 1: Grundlagen; LABO, Bund/Länderarbeitsgemeinschaft Bodenschutz, Düsseldorf, 53 S.
- HIRSCHBERG, C.G. (1997): Die Gerölle von Werra und Weser – ihre strukturelle und kompositionelle Reifung in der Natur und im Experiment. – Berliner geowiss. Abh., A 191, Berlin, 114 S.
- HÖLTING, B. (1972): Ein in Wetter/ Kr. Marburg (Hessen) erschlossenes Na₂SO₄-haltiges Mineralwasser und die Genese solche Wässer. – Notizbl. Hess. L.-A. f. Bodenforsch., 100, Wiesbaden, 260-283

- HÖLTING, B. (1979): Die Buntsandsteingebiete des hessischen Berglandes. – KELLER, R. (Hrsg.): Deutsche Forschungsgemeinschaft (1979): Hydrogeologischer Atlas der Bundesrepublik Deutschland. – Textband, Boppard, 199-203
- HUG, N. (2004): Sedimentgenese und Paläogeographie des höheren Zechstein bis zur Basis des Buntsandsteins in der Hessischen Senke. – Geol. Abh. Hess., 113, HLUG, Wiesbaden, 238 S.
- HÜHN, R. (1993): Die Betroffenheit der Bürger an der Werra. – DVWK MITTEILUNGEN 24: Salz in Werra und Weser – Ursachen, Folgen und Abhilfe. – Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V., Bonn, 104-111
- HVORSLEV, M.J. (1949): Ground-Water Observations. – Subsurface Exploration and Sampling of Soil for Civil Engineering Purposes, Waterways Experiment Station, Corps of Engineers, U.S. Army, Vicksburg, Mississippi, 460 S.
- HVORSLEV, M.J. (1951): Time Lag and Soil Permeability in Ground-Water Observations. – Bull. No. 36, Waterways Experiment Station, Corps of Engineers, U.S. Army, Vicksburg, Mississippi, 1-50
- JACOBSHAGEN, V., BREDE, R., HAMPEL, M. & KUHNERT, C. (1993): Zur Geologie der Umgebung von Eschwege in Nordhessen. – Berliner Geogr. Abh., 56, Berlin, 1-49
- JACOBSHAGEN, V., KORITNIG, S., RITZKOWSKI, S., RÖSING, F., WITTIG, R. & WYCISK, P. (1977): Unterwerra-Sattel: Sein Deckgebirge (Perm-Tertiär) und der gefaltete paläozoische Kern. – Exkursionsführer Geotagung '77, II, Göttingen, 1-34
- JIA, Q. & LUA, A.C. (2008): Concentration-dependent branched pore kinetic model for aqueous phase adsorption. – Chem. Eng. J., 136 (2-3), 227-235
- KÄBEL, H. (2006): Grundwasserstockwerke im thüringischen Werra-Kaligebiet und Folgen der Salzabwasserversenkung bis 1980. – Geol. Jb. Sh., SC 5, 3-114
- KAHLERT, M. (1993): Auswirkungen der Werraversalzung auf die ökologischen Verhältnisse der Auenlandschaft des Werratals. – Ökologie und Umweltsicherung 2/1993, Witzenhausen, 168 S.
- KASTENS, U. & KLEINE BÜNING, H. (2005): Modellierung – Grundlagen und formale Methoden. – Carl Hanser Verlag, München, Wien, 256 S.
- KÄSTNER, H. & SEIDEL, G. (1965): Zur Ausbildung des Oberen Buntsandsteins (Röt) in Westthüringen. – Geologie, 14 (2), Berlin, 145-152
- KAUFMANN, O. & MARTIN, T. (2008): 3D geological modelling from boreholes, cross-sections and geological maps, application over former natural gas storages in coal mines. – Computers & Geosciences, 34 (3), 278-290
- KOBRAVI, H.R. & ERFANIAN, A. (2009): Decentralized adaptive robust control based on sliding mode and nonlinear compensator for the control of ankle movement using

- functional electrical stimulation of agonist-antagonist muscles. – *J. Neural Eng.*, 6 (4), 1-10
- KÖHLER, S. (2004): Ursachen und zeitliche Entwicklung der Grundwasserversalzung in der Werratalaue bei Eschwege im Zeitraum 1980 bis 2002. – Diplomarbeit, Universität Potsdam, FU Berlin, 103 S.
- KORITNIG, S. (1968): Die „Blaue Kuppe“ bei Eschwege. – *Der Aufschluss*, Sonderheft 17, Heidelberg, 173-182
- KORITNIG, S. (1978): Die „Blaue Kuppe“ bei Eschwege. – *Der Aufschluss*, Sonderband 28 (Göttingen), Heidelberg, 237-247
- KRAGH, E. & CHRISTIE, P. (2002): Seismic repeatability, normalized rms, and predictability. – *Lead. Edge*, 21 (7), 640-647
- KRAUSE, R., BOYLE, D.P. & BÄSE, F. (2005): Comparison of different efficiency criteria for hydrological model assessment. – *Adv. Geosc.*, 5, 89-97
- KUHNERT, C. (1986): Die geologischen Verhältnisse des Werra-Meißner-Kreises. – Stäblein, G. (Hrsg.): *Geo- und biowissenschaftliche Forschungen*. – *Berliner Geogr. Abh.*, 41, Berlin, 25-39
- KULICK, J., LEIFELD, D., MEISL, S., PÖSCHL, W., STELLMACHER, R., STRECKER, G., THEUERJAHR, A.-K. & WOLF, M. (1984): Petrofazielle und chemische Untersuchung des Kupferschiefers der Hessischen Senke und des Harz-Westrandes. – *Geol. Jb.*, D 68, Hannover, 223 S.
- LÄHNE, R. (2003): Hydrodynamik des Talraums bei Eschwege (Nordhessen). – Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, unveröffentlicht, 76 S.
- LÄHNE, R., ALTENSTEIN, D. & GOSSEL, W. (2013, angenommen): Comparison of Methods for Depth to Groundwater Calculation in Hard Rock Areas. – *IAMG*, Madrid, 2013, Springer-Verlag, 4 S.
- LAEMMLER, M. (1958): Ein Buntsandstein-Muschelkalk-Profil bei Hausen am Südwestabhang des Hohen Meißners in Nordhessen. – *Notizbl. Hess. L.-Amt Bodenforsch.*, 86, Wiesbaden, 215-240
- LEGATES D.R. & MCCABE, G.J. (1999): Evaluating the use of “goodness-of-fit” measures in hydrologic and hydroclimatic model validation. – *Water Resources Research*, 35 (1), 233-241
- LEMON, A.M. & JONES, N.L. (2003): Building solid models from boreholes and user-defined cross-sections. – *Computers & Geosciences*, 29 (5), 547-555
- LEPPIG, B. (2004): GIS gestützte Methoden zur räumlich-geometrischen Modellierung der Grundwasserdruckhöhe in Festgesteinen. – *Mitt. Ing. Hydrogeol.*, 88, Aachen, 11-25

- LESER, H. (1997): Landschaftsökologie: Ansatz, Modelle, Methodik, Anwendung. – 4., neubearb. Aufl., Ulmer, Stuttgart, 644 S.
- LI, H.T., KINZELBACH, W., BRUNNER, P., LI, W.P. & DONG, X.G. (2008): Topography representation methods for improving evaporation simulation in groundwater modelling. – *Journal of Hydrology*, 356 (1-2), 199-208
- LIERSCH, K.-M. (1993): Die Entwicklung der Salzfrachten in Werra und Weser. – DVWK MITTEILUNGEN 24: Salz in Werra und Weser – Ursachen, Folgen und Abhilfe. – Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V., Bonn, 69-82
- LUA, A.C. & JIA, Q. (2007): Adsorption of phenol by oil-palm-shell activated carbons. – *Adsorption*, 13, 129-137
- MALLET, J.-L. (2002): Geomodeling. – Oxford University Press, New York, 599 S.
- MARKLUND, L. (2009): Topographic Control of Groundwater Flow. – PhD-Thesis, Royal Institute of Technology (KTH), Stockholm, 44 S.
- MAROTZ, G. (1968): Technische Grundlagen einer Wasserspeicherung im natürlichen Untergrund. – Schriftenreihe des KWK, 18, 228 S.
- MARSAL, D. (1989): Finite Differenzen und Elemente – Numerische Lösung von Variationsproblemen und partiellen Differentialgleichungen. – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 300 S.
- MIDDLEMIS, H., MERRICK, N. & ROSS, J. (2000): Groundwater Flow Modelling Guide. – Murray-Darling Basin Commission, Aquaterra Consulting Pty Ltd., Project No. 125, 133 S.
- MÖLLER, K. (1988): Reliefentwicklung und Auslaugung in der Umgebung des Unterwerra-Sattels (Nordhessen). – *Berliner Geogr. Abh.*, Heft 48, Berlin, 187 S.
- MÖLLER, K. & STÄBLEIN, G. (1986): Die geomorphologische Karte 1:25.000 Blatt 17, 4725 Bad Sooden-Allendorf. Erkenntnisse und Anwendungen. – *Berliner Geogr. Abh.*, 41, Berlin, 227-255
- MOESTA, F. (1876): Blatt Eschwege – Erläuterungen der geologischen Specialkarte von Preußen und den Thüringischen Staaten. – Berlin, Verlag der Neumann'schen Kartenhandlung, 24 S.
- MOESTA, F. (1886): Blatt Allendorf – Erläuterungen der geologischen Specialkarte von Preußen und den Thüringischen Staaten. – Berlin, Verlag der Neumann'schen Kartenhandlung, 66 S.
- MOREL-SEYTOUX, H.J. (2001): Groundwater. – ANDERSON, M.G. & BATES, P.D. (Hrsg.): Model Validation – Perspectives in Hydrogeological Science. – John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 293-324

- MORIASI, D.N., ARNOLD, J.G., VAN LIEW, M.W., BINGER, R.L., HARMEL, R.D. & VEITH, T.L. (2007): Model Evaluation Guidelines for Systematic Quantification of Accuracy in Watershed Simulations. – American Society of Agriculture and Biological Engineers, 50 (3), 885-900
- MORTON, A. & SUÁREZ, M. (2001): Kinds of Models. – ANDERSON, M.G. & BATES, P.D. (Hrsg.): Model Validation – Perspectives in Hydrogeological Science. – John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 11-22
- NASH, J.E. & SUTCLIFFE, J.V. (1970): River flow forecasting through conceptual models, Part 1 – a discussion of principles. – J. Hydro., Amsterdam, 10 (3), 282-290
- NASSER, K.H., BOLIVAR, S., CANEPA, J. & DORRIES, A. (2003): New paradigms for geoscience information management – ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 41-58
- NEITSCH, S.L., ARNOLD, J.G., KINIRY, J.R., WILLIAMS, J.R. & KING, K.W. (2002): Soil and Water Assessment Tool Theoretical Documentation, Version 2000. – Texas Wat. Res. Inst., College Station, TWRi Report TR-191, Texas, 506 S.
- NEITSCH, S.L., ARNOLD, J.G., KINIRY, J.R. & WILLIAMS, J.R. (2005): Soil and Water Assessment Tools – Theoretical Documentation Version 2005. – Grassland Soil and Water Research Laboratory, Agricultural Research Service, Temple, Texas, <http://swatmodel.tamu.edu/media/1292/swat2005theory.pdf>
- NEUMANN, D. (2002): Methodik zur Erstellung eines ingenieurgeologischen 3D-Modells. – Workshop-Manuskript „Anwendung von Geodaten – Bedarf, Auswahl und Bereitstellung“ vom 05. bis 06. Juni 2002, LAGB, Halle / Saale
- OSA ESCHWEGE (1977): Ergänzungsbericht zum Gesamtübersichtsplan Werratal, Albugen, Altenburschla. – unveröffentlicht, 26 S.
- PAULY, E., ANDERLE, H.-J. & VÖLK, H.R. (1973): Gutachten über Sand- und Kiesvorkommen im Werra-Tal zwischen Heldra und Albugen, Krs. Eschwege. – Gutachten des Hess. L.-A. f. Bodenforsch., 375 Ki 2786/72 Ep-A-Vö/Ro, Archiv-Nr. 4826-68, 6 S.
- PEARSON, E.S. & STEPHENS, M.A. (1964): The ratio of range to standard deviation in the same normal sample. – Biometrika, 51 (3/4), 484-487
- PFOH, O. (2003): Bedeutung der elektrostatischen Rohsalzaufbereitung für das Werra-Kalirevier. – Kali und Geschichte, 1-2/2003, 18-26
- PINDER, G.F. & GRAY, W.G. (1977): Finite Element Simulation in Surface and Subsurface Hydrology. – Academic Press, New York, 295 S.

- PRICE, K. (2011): Effects of watershed topography, soils, land use, and climate on baseflow hydrology in humid regions: A review. – *Progress Phys. Geogr.*, 35 (4), 465-492
- RAHBAR, Y. (1998): Modellierung der Grundwasserversalzung in der Werratalaue bei Eschwege (Nordhessen). – Dissertation, FU Berlin, 148 S.
- RAMBOW, D. (1976): Profile durch den Mittleren Buntsandstein an der Ostflanke des nordhessischen Teilbeckens (Gebiet östlich Kassel). – *Geol. Jb. Hessen*, 104, Wiesbaden, 43-49
- RAMDOHR, P. (1920): Über die Basalte der Blauen Kuppe bei Eschwege und benachbarte Vorkommen und ihr Cristobalit. – *Cbl. F. Min.*, 33-36
- RAPPAZ, M., BELLET, M. & DEVILLE, M. (2003): Numerical Modeling in Material Science and Engineering. – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 540 S.
- RENGER, M. & WESSOLEK, G. (1990): Auswirkungen von Grundwasserabsenkung und Nutzungsänderung auf die Grundwasserneubildung. – *Mitt. Inst. für Wasserwesen, Univ. der Bundeswehr München*, Heft 386, 295-307
- RETTIG, B. (1996): Die Solling-Folge (Mittlerer Buntsandstein) im Grenzgebiet Niedersachsen - Thüringen - Hessen. – *Mitt. geol. Inst. Univ. Hannover*, 35, 107 S.
- REUTER, H.I., NELSON, A. & JARVIS, A. (2007): An evaluation of void-filling interpolation methods for SRTM data. – *Intern. J. of Geogr. Inform. Science*, 21 (9), Bristol (USA), 983-1008
- RICHTER, D. (1995): Ergebnisse methodischer Untersuchungen zur Korrektur des systematischen Meßfehlers des Hellmann-Niederschlagsmessers. – *Berichte des DWD*, 194, Offenbach, 93 S.
- RITZKOWSKI, S. (1978): Geologie des Unterwerra-Sattels und seiner Randstrukturen zwischen Eschwege und Witzenhausen (Nordhessen). – *Der Aufschluß, Sonderband 28*, Heidelberg, 187-204
- ROSENBAUM, M. (2003): Characterisation of the shallow subsurface: implications for urban infrastructure and environmental assessment. – ROSENBAUM, M.S. & TURNER, A.K. (Hrsg.): *New Paradigms in Subsurface Prediction*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 3-6
- RUBIN, Y. (2003): *Applied Stochastic Hydrogeology*. – Oxford University Press, Oxford, 391 S.
- RUSSELL, H.A.J., THORLEIFSON, L.H. & BERG, R.C. (2005): Three-Dimensional Geological Mapping for Groundwater Applications: Recent Activities. – SOLLER, D.R. (Hrsg.): *Digital Mapping Techniques '05 – Workshop Proceedings*, Baton Rouge, Louisiana, April 24-27, 2005, U.S. Geological Survey Open-File Report 2005-1428, 67-76

- SAKSA, P., HELLÄ, P. & NUMMELA, J. (2003): Analysing uncertainty when modelling geological structures. – ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): *New Paradigms in Subsurface Prediction*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 331-340
- SCHAFMEISTER, M.-TH. (1999): *Geostatistik für die hydrogeologische Praxis*. – Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 172 S.
- SCHAUMBERG, G. (1971): Die Aragonite der Blauen Kuppe bei Eschwege. – Sonderdruck aus „Der Aufschluss“, 22 (9), 293-297
- SCHILLING, K.E. (2009): Investigating local variation in groundwater recharge along a topographic gradient, Walnut Creek, Iowa, USA. – *Hydrogeology Journal*, 17 (2), 397–407
- SCHMID, M. (1991): *Der variszische Stockwerkbau des Unterwerra-Grundgebirges: das tektonische Bindeglied zwischen Harz und Rheinischem Schiefergebirge*. – Braunschweig, Technische Univ., Naturwiss. Fak., Braunschweiger geologisch-paläontologische Dissertationen, 12, 82 S.
- SCHMIDT, G., GRETZSCHEL, O., VOLK, M. & UHL, M. (2003): Konzept zur skalenspezifischen Modellierung des Wasser- und Stoffhaushaltes im Projekt FLUMAGIS. – HENNRICH, K., RODE, M. & BRONSTERT, A. (Hrsg.): *6. Workshop zur großskaligen Modellierung in der Hydrologie - Flussgebietsmanagement*, University Press, Kassel, 7-20
- SCHRAFT, A. & RAMBOW, D. (1984): Vergleichende Untersuchungen zur Gebirgsdurchlässigkeit im Buntsandstein Ost Hessens. – *Geol. Jb. Hessen*, 112, 235-261, Wiesbaden
- SCHUBART, W. (1955): Zur Stratigraphie, Tektonik und den Lagerstätten der Witzenhäuser Grauwacke. – *Abh. Hess. L.-Amt Bodenforsch.*, 10, 67 S.
- SEPPELT, R. (2003): *Computer-Based Environmental Management*. – Wiley-VCH, Weinheim, 284 S.
- SINGEWALD, A. (1980): Elektrostatik – neue umweltfreundliche Aufbereitung von Kalium- und Magnesiumrohstoffen. – *Erzmetall*, 33 (1), 19-27
- SOBISCH, H.-G. (2000): Ein digitales räumliches Modell des Quartärs der GK 25 Blatt 3508 Nordhorn auf der Basis vernetzter Profilschnitte. – *Berichte a. d. Geowiss.*, D 38, Diss. Univ. Köln, Shaker Verlag, Aachen, 113 S.
- SOBISCH, H.-G. & BOMBIEN, H. (2003): Regional subsurface models and their practical usage. – ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): *New Paradigms in Subsurface Prediction*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 129-134
- SOMMERHÄUSER, M. (1999): *Entwicklung und Anwendung eines Instrumentariums zur dreidimensionalen Grundwassermodellierung auf regionalem Maßstab (Fuhrberger Feld)*. – Dissertation, TU Carolo-Wilhelmina Braunschweig, 132 S.

- STACHOWIAK, H. (1973): Allgemeine Modellbildung. – Springer-Verlag, Wien, 494 S.
- STOPPEL, D. & GUNDLACH, H. (1978): Zur Geologie und Bergbaugeschichte der Schwespat- und Kobalterzvorkommen im Unterwerra-Grauwackengebirge und Richelsdorfer Gebirge. – Der Aufschluß, Sonderband 28, Heidelberg, 261-285
- SUN, Y., KANG S.Z., LI, F.S. & ZHANG L. (2009): Comparison of interpolation methods for depth to groundwater and its temporal and spatial variations in the Minqin oasis of northwest China. – Environmental Modelling & Software, 24 (10), 1163-1170
- TANAKA, M. & SUZUKI, K. (2009): Influence of Watershed Topography on the Chemistry of Stream Water in a Mountainous Area. – Water, Air & Soil Pollution, 196 (1-4), 321-331
- TETZLAFF, D., SEIBERT, J. & SOULSBY, C. (2009): Inter-catchment comparison to assess the influence of topography and soils on catchment transit times in a geomorphic province; the Cairngorm mountains, Scotland. – Hydrol. Process. 23 (13), 1874-1886
- THEIS, C. V. (1935): The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using groundwater storage. – Trans. Am. Geoph. Union, 16, Washington, 519-524
- THEURER, G. (1983): Ursachen zunehmender Gesamtmineralisationen in Wässern aus einzelnen Trinkwasserfassungsanlagen der Stadtwerke Eschwege. – Diplomarbeit, FU Berlin, 132 S.
- THOM, S. (1992): Grundwasserversalzung in der Werratalaue bei Eschwege (Nordhessen). – Diplomarbeit, Berlin, 154 S.
- THOM, S., HENTSCHEL, B., PEKDEGER, A., RAHBAR, J., TAUTE, T. & RATEI, H. (1993): Die Grundwasserversalzung in der Werratalaue bei Eschwege (Nordhessen). – Berliner Geogr. Abh., 56, Berlin, 79-116
- THOM, S., HENTSCHEL, B., SOMMER-VON JARMERSTEDT, C. & PEKDEGER, A. (1995): Die Grundwasserversalzung in der Werra-Talaue durch Uferfiltration. – Z. dt. geol. Ges., 146, Hannover, 114-121
- TURC, L. (1961): Évaluation des besoins en eau d'irrigation, évapotranspiration potentielle, formule simplifiée et mise à jour. – Ann. Agron., 12, 13-49
- TURNER, A.K. (2003): Putting the user first: implications for subsurface characterisation. – ROSENBAUM, M.S. & TURNER, A.K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 61-68
- UDLUFT, H. (1961): Wasserversorgung der Stadt Eschwege – Tiefbohrungen bei Aue und Eschwege. – Hess. L.-A. f. Bodenforsch., unveröff. Bericht, 341-4018/60 Udl/St, 2 S.

- VANROLLEGHEM, P.A. (2010): Modelling Aspects of Water Framework Directive Implementation Volume 1. – Iwa Publishing, ISBN-13: 978-1843392231, 352 S.
- VAN STEMPVOORT, D., EWERT, L. & WASSENAAR, L. (1992): Aquifer vulnerability index: a GIS-compatible method for groundwater vulnerability mapping. – Canadian Water Resources Journal 18 (1), 25–37
- WEBER, H. (1952): Pliozän und Auslaugung im Gebiet der Oberen Werra. – Geologica, 8, Berlin, 136 S.
- WENDLING, U. & MÜLLER, J. (1984): Entwicklung eines Verfahrens zur rechnerischen Abschätzung der Verdunstung im Winter. – Z. Meteorol., 34 (2), 82-85
- WENDLING, U., SCHELLIN, H.-G. & THOMÄ, M. (1991): Bereitstellung von täglichen Informationen zum Wasserhaushalt des Bodens für die Zwecke der agrarmeteorologischen Beratung. – Z. Meteorol., 41 (6), 468-475
- WENZEL, B. (1994): Zur Lithostratigraphie und Sedimentologie des Röt und zu den Massenverlagerungen an der Röt-/ Muschelkalkgrenze in Nordhessen. – Geol. Schr., 53, Diss., 248 S.
- WESSOLEK, G., DUIJNISVELD, W.H.M. & TRINKS, S. (2004): Ein neues Verfahren zur Berechnung der Sickerwasserrate aus dem Boden: das TUB-BGR-Verfahren. – BRONSTERT, A., THIEKEN, A., MERZ, B., ROHDE, M. & MENZEL, L. (Hrsg.): Wasser- und Stofftransport in heterogenen Einzugsgebieten. – Forum für Hydrologie – Wasserbewirtschaftung, ATV-DVWK, Heft 05.04, Beiträge zum Tag der Hydrologie, Band 1: 135-145
- WESSOLEK, G. & FACKLAM, M. (1997): Standorteigenschaften und Wasserhaushalt von versiegelten Flächen. – Z. Pflanzenernähr. Bodenk., 160 (1), Weinheim, 41-46
- WITTIG, R. (1968): Stratigraphie und Tektonik des gefalteten Paläozoikums im Unterwerra-Sattel. – Notizbl. hess. L.-Amt Bodenforsch., 96, Wiesbaden, 31-67
- WITTIG, R. (1974): Tiefoberdevonische Grauwacken unter der Hessischen Senke. – Notizbl. hess. L.-Amt Bodenforsch., 102, Wiesbaden, 46-57
- WYCISK, P. (1977): Fazies und Environment der Becken- und Schwellensedimente des Mittleren Buntsandsteins (Reinhardswald - Eschwege). – Nachr. dt. geol. Ges., 17, Hannover, 64-65
- WYCISK, P. (1984): Faziesinterpretation eines kontinentalen Sedimentationstrogos (Mittlerer Buntsandstein / Hessische Senke). – Berliner geowiss. Abh., A 54, 104 S.
- WYCISK, P., HUBERT, T., GOSSEL, W. & NEUMANN, C. (2009): High-resolution 3D spatial modelling of complex geological structures for an environmental risk assessment of abundant mining and industrial megasites. – Computers & Geosciences, 35 (1), 165-182

- WYCISK, P., HUBERT, T., STEINMETZ, T. & GOSSEL, W. (2008): 3D Modelling of Complex Geological Structures and its Relevance for Numerical Groundwater Models – A Case Study. – REPOSAFE 2007, International Conference on Radioactive Waste Disposal in Geological Formations, Braunschweig, 6.-9. November 2007, Proceedings, Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) und Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 285-295
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., FRANKE, B., RUSKE, R. & WEIß, H. (2003): 3-D Modeling of Complex Geological Structures and its Relevance for a Risk Based Management and Remediation Approach - Examples from the Bitterfeld / Wolfen Megasite, Germany. – Consoil 2003 Proceedings, 7 S.
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., RUSKE, R. & WEIß, H. (2002): Das digitale geologische Strukturmodell Bitterfeld als neuer Baustein in der Sanierungsforschung. – Grundwasser, 3/2002, 165-171
- XUE, Y., SUN, M. & MA, A.N. (2004): On the reconstruction of three-dimensional complex geological objects using Delaunay triangulation. – Fut. Gen. Comp. Sys., 20 (7), 1227-1234

Kartenverzeichnis

HESSISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT UND GEOLOGIE (2002a): Bodenkarte von Hessen, 1:50000, L 4926 Eschwege, Entwurf

HESSISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT UND GEOLOGIE (2002b): Bodenkarte von Hessen, 1:50000, L 4726 Heiligenstadt

HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1957): Topographische Karte 1:25000, Blatt 4726 Grebendorf, Letzte Nachträge 1955

HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1958): Topographische Karte 1:25000, Blatt 4826 Eschwege, Letzte Nachträge 1955

HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1995a): Topographische Karte 1:25000, Blatt 4826 Eschwege, Normalausgabe, 1. Auflage, umfassend aktualisiert 1992

HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1995b): Topographische Karte 1:25000, Blatt 4825, Waldkappel, Normalausgabe, 1. Auflage, umfassend aktualisiert 1992

HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1997): Topographische Karte 1:25000, Blatt 4725 Bad Sooden-Allendorf, Normalausgabe, 1. Auflage, umfassend aktualisiert 1994

THÜRINGER LANDESAMT FÜR UMWELT UND GEOLOGIE (1996): Digitale Bodenkundliche Konzeptkarte 1:50000, L 4726 Heilbad Heiligenstadt

THÜRINGER LANDESVERMESSUNGSAMT (1997): Topographische Karte 1:25000, Blatt 4726 Grebendorf, Normalausgabe, 2. Auflage, umfassend aktualisiert 1992

Verwendete Internetseiten

<http://www.pegelonline.wsv.de>

15-Minuten-Werte der Werra-Pegel Heldra und Allendorf
Datenabruf zwischen September 2006 und April 2010

Genutzte Software

ArcView 3.2a®

ESRI: Environmental Systems Research Institute Inc., (1992-1999)

380 New York Street, Redlands, CA 92373-8100

<http://www.esri.com>

GSI3D® (Geological Surveying & Investigation in 3D)

INSIGHT Geologische Softwaresysteme GmbH (1995-2002)

Hochstadenstrasse 1-3, 50674 Köln

Email: Hans-Georg.Sobisch@gmx.de

FEFLOW®

DHI-WASY GmbH

Waltersdorfer Straße 105, 12526 Berlin-Bohnsdorf

<http://www.dhi-wasy.de>

SPSS 17®

SPSS GmbH Software, an IBM Company

Theresienhöhe 13, 80339 München

<http://www.spss.com>

Surfer® (Surface Mapping System), Version 8

Golden Software Inc. (1993-2002)

809 14th Street, 80401-1866 Golden, Colorado

www.goldensoftware.com

Erwähnte Software

MVS®

C Tech Development Corporation (1994-2004)
16091 Santa Barbara Lane, Huntington Beach, CA 92649
<http://www.ctech.com>

Rockworks®

RockWare Inc.
2221 East St. #1, Golden, CO 80401
<http://www.rockware.com/>

Surpac®

Gemcom Software International Inc.
Suite 1100 - 1066 West Hastings Street, Vancouver, B.C. Canada V6E 3X1
<http://www.gemcomsoftware.com/>

Anhang – Gleichungen für Güteparameter der Kalibrierung

Mean Absolute Error

MAE

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |O_i - S_i|$$

Mean Square Error

MSE

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2$$

Root Mean Square Error

RMSE

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2} = \sqrt{MSE}$$

Coefficient of variation of the RSME

CVRMSE

$$CVRMSE = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}}{\bar{O}} = \frac{RMSE}{\bar{O}}$$

Normalized RSME

NRMSE

$$NRMSE = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}}{O_{\max} - O_{\min}} = \frac{RMSE}{O_{\max} - O_{\min}}$$

RSME observation standard deviation ratio

RSR

$$RSR = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}} = \frac{RSME}{STDABW_{obs}}$$

Nash Sutcliffe Model Efficiency

NSE

$$NSE = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}$$

Index of Agreement

d

$$d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|S_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}{PE} = 1 - N \cdot \frac{MSE}{PE}$$

Bestimmtheitsmaß

R²

$$R^2 = \left(\frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O}) \cdot (S_i - \bar{S})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^N (S_i - \bar{S})^2}} \right)^2 = \frac{s_{xy}^2}{s_x^2 \cdot s_y^2} = \frac{\text{cov}(xy)}{\text{var}(x) \cdot \text{var}(y)}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (S_i - \hat{S}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (S_i - \bar{S})^2} = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{S}_i - \bar{S})^2}{\sum_{i=1}^N (S_i - \bar{S})^2} = \frac{s_{\hat{S}}^2}{s_s^2}$$

Mit:

O	observed data (Messwerte)
\bar{O}	Mittelwert der Messwerte
S	simulated data (modellierte Werte)
\bar{S}	Mittelwert der modellierten Werte
\hat{S}	Regresswert der modellierten Werte
N	Anzahl der Messwerte
i	Laufvariable, ganze Zahlen

Lebenslauf

Persönliche Daten

Vor- und Zuname	Ronny Lähne
vorh. akademischer Grad	Dipl.-Geol.
Geburtsdatum	12.10.1977
Geburtsort	Lutherstadt Eisleben
Staatsangehörigkeit	deutsch
Geschlecht	männlich
Wohnsitz	Zur Saaleue 12, D-06122 Halle (Saale)
Korrespondenzanschrift	Zur Saaleue 12, D-06122 Halle (Saale)

Beruflicher Werdegang

2009 – 2013	Wissenschaftlicher Mitarbeiter Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
2007 – 2009	Ingenieurbüro HPC AG Merseburg
2005 – 2007	Stipendium Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Hochschulstudium

1997 – 2004	Studium Geologie/Paläontologie Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Abschluss: Dipl.-Geol.
-------------	---

Wehrdienst

1996 – 1997	Grundwehrdienst
-------------	-----------------

Schulbildung

1991 – 1996	Gottfried-August-Bürger Gymnasium Benndorf Abschluss: Allgemeine Hochschulreife
1984 – 1991	POS Adolf Hennecke Siersleben