

**„Schnittstellen bei der Kopplung von Modellierungssystemen der
Hydrogeologie“**

H a b i l i t a t i o n s s c h r i f t

zur Erlangung des akademischen Grades

Dr. rer. nat. habil.

vorgelegt der

Fakultät Naturwissenschaften III
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von

Herrn Dr. rer. nat. Wolfgang Gossel

geb. am 04.03.1963

in Bensberg (Rheinisch-Bergischer Kreis)

Gutachter /in

1. Prof. Dr. Peter Wycisk
2. Prof. Dr. Martin Sauter
3. Prof. Dr. Gunnar Nützmann

Vortrag und Diskussion gehalten am 08.01.08, Probevorlesung gehalten am 29.01.08

urn:nbn:de:gbv:3-000012990

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000012990>]

Gelobt seist Du, Herr,
durch Bruder Wind und Luft
und Wolke und Wetter,
die sanft oder streng, nach Deinem Willen,
die Wesen leiten, die durch Dich sind.
(Franz von Assisi, 1224)

Zusammenfassung

Die Modellierungskonzepte, auf denen die in der Arbeit betrachteten geologischen, hydro- und umweltgeologischen sowie hydrologischen Modelle basieren, können zunächst in statische und dynamische Konzepte entsprechend ihrer Zeitabhängigkeit gegliedert werden. Beide Modellierungskonzepte arbeiten mit verschiedenen Methoden, deren Einsatz entscheidend von den Zielen und in untergeordnetem Maße von den Datengrundlagen des Modells abhängt. Die Einsatzgebiete und Verwendungsmöglichkeiten der Modellierungsmethoden in Modellierungssystemen haben sich über die Zeit gewandelt, sodass heute bei den statischen Konzepten statistische und deskriptive Methoden und bei den dynamischen Konzepten numerische Methoden bevorzugt eingesetzt werden. Da die beschriebenen Modellierungskonzepte Grundlage der Modellierungen und Modellkopplungen sind, ergibt sich die Möglichkeit, unter dem Aspekt der Konzepte die Kopplungsmethoden systematisch zu beschreiben. In den Modellbeispielen Untere Mulde/Fuhne, Nubisches Aquifer System und Subrosions-Talraum Unterwerra wurden verschiedene Konzepte umgesetzt und die eingesetzten Methoden kurz beschrieben. Vor- und Nachteile der Modellierungsmethoden werde hier an praktischen Beispielen nachvollzogen.

Die hier betrachteten Modellierungssysteme der Hydrogeologie stammen insbesondere aus den Bereichen Geologie, Sickerwassermodellierung, ungesättigte Zone und Strömungsmodellierungen der gesättigten Zone. Transportmodellierungen, hydrologische und umweltgeologische Modellierungssysteme werden nur am Rande betrachtet. Verfügbare Datenquellen und Eingangsdaten der Modellierungssysteme müssen aufeinander abgestimmt werden, was durch die Vielzahl der Modellierungssysteme erleichtert wird. Unter den Modellierungsmethoden werden bevorzugt deterministische Arbeitsweisen dargestellt, da bei ihnen Verhaltens- und Strukturgültigkeit in der Regel gewährleistet sind. Für Kopplungen von Modellierungssystemen ist es von besonderer Bedeutung, welche Methoden bevorzugt eingesetzt werden, da sich insbesondere statistische Methoden flexibler in Kopplungen einsetzen lassen als konstruktive Methoden.

In den Modellbeispielen wurden je nach Modellierungsaufgabe verschiedene Modellierungssysteme eingesetzt. Bei den geologischen Modellierungssystemen sind die auf statistischen und deskriptiven Methoden aufbauenden Systeme bevorzugt worden, bei den Sickerwassermodellierungen empirische Methoden. Für die nur in einem Fall für spezielle Bereiche getrennt zu modellierende ungesättigte Zone wurde der Einsatz von empirischen und numerischen Verfahren getestet. In der gesättigten Zone dominieren deterministische numerische Verfahren sowohl für die Strömungs- als auch für die Transportmodellierung. Hydrologische Modelldaten sind ausschließlich über statistische Modellierungen berücksichtigt worden.

Schnittstellen für die Verknüpfung von Modellierungssystemen, die bei der Lösung komplexer Zielstellungen notwendig werden können, können systematisiert werden und erlauben in dieser Kategorisierung Bewertungen ihrer Einsatzmöglichkeiten. Die Kopplung mehrerer Modellierungssysteme wirkt sich in vielen Fällen durch Instabilitäten aus. Je enger die Kopplung und je komplexer die verknüpften Parameter oder Randbedingungen sind, desto höher wird meist der Aufwand zur Stabilisierung der gekoppelten Modelle. Besonders deutlich wird dies an den Modellbeispielen Untere Mulde/Fuhne und Nubisches Aquifer System. Horizontale wie vertikale Modellkopplungen sind hiervon gleichermaßen betroffen.

Der Vergleich zwischen Modellen mit gekoppelten Modellierungssystemen und der Realität wird durch die Art der Modellkopplungen, z.B. sequentielle Kopplungen, periodisch-synchrone Kopplungen oder integrierte Kopplungen, entscheidend beeinflusst. Bestimmte Arten der Modellkopplungen lassen nur in sehr reduziertem Ausmaß Kalibrierungen und Sensitivitätsanalysen sowie Fehlerbetrachtungen zu.

Prognostische Berechnungen werden mit gekoppelten Modellen zwar oft instabiler und die Zahl der zu berücksichtigenden Randbedingungen und Parametern steigt. Aber der Ersatz insbesondere von statistisch definierten Randbedingungen durch deterministische Modelle steigert die Zuverlässigkeit der prognostischen Modellrechnungen.

Summary

In the proposed study methods of geological, hydro- and environmental geological as well as hydrological modeling systems and the possibilities of their coupling are systematically examined.

The modeling concepts can be distinguished into static and dynamic concepts according to their time dependency. Both modeling concepts work with several methods that can be applied specifically to the objectives of the model and the data on which the model is based.

The possibilities and strategies of the application of modeling methods have been changing in the last decades so that today statistical and descriptive methods are used in static concepts and numerical methods are preferred in dynamical concepts.

The methods of coupling models are described systematically based on the concepts and modeling systems. Different concepts were used to model the case studies "Subrosions-Talraum Unterwerra", "Untere Mulde/Fuhne" (both in Germany) and the Nubian Aquifer System (Egypt and parts of Libya, Chad and Sudan). The methods are described briefly to demonstrate their advantages and disadvantages.

The hydrogeological modeling systems in the focus of this study concern particularly the geology, soil water and the flow in the unsaturated and the saturated zone. Transport modeling in the saturated zone, hydrological modeling and environmental geological models are considered only marginally. The sources and needs of data have to be considered according to the objectives of the model and the needs of the different modeling systems. The coordination of both demands is enhanced by a high diversity of modeling systems, so that it is possible within some limits to choose a suitable modeling system. Deterministic modeling methods are preferred because behavioural and structural validity are guaranteed. For the coupling of modeling systems it is most important, which modeling methods are used in the coupled systems, e.g. statistical methods are more flexible in geological modeling than constructive methods.

In the case studies different modeling systems according to the main tasks were used. For the geological models statistical and descriptive methods were preferred, for the soil water models empirical methods. The unsaturated zone was modeled only in the area Untere Mulde/Fuhne and in this case empirical and numerical methods were used. In the saturated zone the investigation areas were modeled with numerical methods for groundwater flow and transport. For the hydrological models only statistical methods were applied.

The interfaces for the coupling of modeling systems can be considered systematically and thus allow an evaluation. The most striking feature in coupling of modeling systems is their possibly instable behaviour. The tighter and the more complex the coupling is the higher will be in most cases the effort that is necessary to stabilize the coupled models. This can be demonstrated best with the case studies of the Nubian Aquifer System and the Untere Mulde/Fuhne. Horizontal and vertical coupling are affected in the same way.

Also the comparison of models with coupled modeling systems and the reality (calibration, validation and sensitivity analysis) is influenced by the kind of coupling. Some kinds of coupling reduce the possibilities of calibration, sensitivity and error analysis.

Prognostic modeling with coupled models will be more instable in most cases and the number of boundary conditions and parameters will increase but the reliability will increase according to the deterministic definitions.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand auf der Grundlage mehrerer Projekte, die durch die Arbeitsgruppe Hydro- und Umweltgeologie der Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg ausgeführt wurden. Mein Dank für die Unterstützung während der etwa fünfjährigen Arbeit gilt damit zuerst den Kollegen, die insbesondere durch verschiedene Abschlussarbeiten zur Lösung bestimmter Aufgaben und zur Klärung von Fragestellungen beigetragen haben:

Herr Dipl.-Geol. Ronny Lähne (Diplomarbeit und darauf aufbauend Vorbereitungen zur Dissertation im Bereich des Subrosions-Talraums Unterwerra, hydrodynamische Modellierungen, geologische Modellierung und numerische Grundwassermodellierung)

Herr Msc. Ahmed Sefelnasr (Vorbereitungen zur Dissertation über das Untersuchungsgebiet Nubisches Aquifer System, numerische Grundwassermodellierung)

Herr Dipl.-Geol. Tobias Hubert (Diplomarbeit und darauf aufbauend Vorbereitungen zur Dissertation im Raum Bitterfeld, geologische Modellierung)

Herr Dipl.-Geol. Christian Neumann (Durchführung von Projekten im Raum Bitterfeld)

Ganz wesentlich hierbei war die koordinierende Funktion und Organisation unseres Fachgebietsleiters Herrn Prof. Dr. P Wycisk.

Den genannten Kollegen danke ich ganz herzlich für eine Vielzahl fruchtbarer Diskussionen, ebenso den Herren Dipl.-Geol. Dirk Schlesier, Dipl.-Geol. Oliver Neef, Dipl.-Geol. Andreas Wollmann, Dipl.-Geol. Holger Fabritius und Dipl.-Geol. Raik Richter, die ihre Abschlussarbeiten ebenfalls im fachlichen Umfeld der vorliegenden Arbeit absolviert haben.

Für Anregungen und fachliche Unterstützung auch bei der Korrektur der Arbeit danke ich Herrn Dr. Michael Falkenhagen und Herrn Dr. Gerd Schmidt.

Die Arbeiten am numerischen Grundwassermodell Nubisches Aquifer System wurden von hervorragender Unterstützung durch Prof. Dr. A. M. Ebraheem in vielen Stadien der Modellverbesserung getragen. Hierfür ganz herzlicher Dank.

Die Ideen des (mittlerweile ehemaligen) Arbeitskreises Wasser des BUND Berlin haben wie meine Dissertation so auch diese Arbeit stark beeinflusst. Den Herren Dipl.-Ing. Bernhard Forner und Dipl.-Geol. Peter Schätzl gilt auch für eine Reihe nachfolgender Diskussionen herzlicher Dank.

Nicht zuletzt geht mein Dank an meine Eltern, die einerseits durch meine hohe Arbeitsbelastung vielfach auf meine Unterstützung verzichten mussten, andererseits die Korrektur der Arbeit übernommen haben. Auch für ihre moralische Unterstützung geht mein Dank an sie sowie an Frau Dipl.-Geol. Ursula Chowanietz.

Inhaltverzeichnis

1	EINFÜHRUNG UND BEGRIFFLICHE GRUNDLAGEN VON UMWELTMODELLEN.....	1
1.1	Einführung und Ziele	1
1.2	Begriffliche Grundlagen	4
1.3	Modellbeispiele	8
2	MODELLIERUNGSKONZEPT UND METHODISCHE KONZEPTE	13
2.1	Statische methodische Konzepte und Methoden in der Hydrogeologie	16
2.1.1	Statistische Methoden.....	18
2.1.2	Deskriptive und konstruktive Methoden.....	20
2.1.3	Deterministische bzw. prozessbasierte Methoden	20
2.2	Dynamische methodische Konzepte und Methoden in der Hydrogeologie	22
2.2.1	Statistische Methoden.....	23
2.2.2	Analytische Methoden.....	23
2.2.3	Numerische Methoden	24
2.3	Raum-zeitliche Aspekte der Modellierungskonzepte	25
2.4	Modellierungskonzepte der Modellbeispiele	31
2.4.1	Subrosions-Talraum Unterwerra	31
2.4.2	Nubisches Aquifer System	32
2.4.3	Untere Mulde/Fuhne	33
2.5	Modellierungskonzepte kurz gefasst	36
3	MODELLIERUNGSSYSTEME	37
3.1	Geologische Modellierungssysteme.....	38
3.1.1	Eingangsdaten geologischer Modellierungssysteme	39
3.1.2	Modellierungsmethoden	40
3.1.3	Ergebnisse der geologischen Modellierungen.....	42

3.2	Sickerwasser-Modellierungssysteme	43
3.2.1	Eingangsdaten von Sickerwasser-Modellierungssystemen.....	44
3.2.2	Methoden zur Berechnung der Sickerwasserrate	45
3.2.3	Ergebnisse der Sickerwassermodellierung	46
3.3	Modellierungssysteme für die ungesättigte Zone.....	47
3.3.1	Eingangsdaten für die Modellierung der ungesättigten Zone	48
3.3.2	Methoden zur Berechnung des Grundwasserflusses in der ungesättigten Zone.....	49
3.3.3	Ergebnisse der Modellierung der Wasserströmung und des – transports in der ungesättigten Zone	50
3.4	Strömungsmodellierungssysteme für die gesättigte Zone	50
3.4.1	Eingangsdaten der Strömungsmodellierungssysteme für die gesättigte Zone.....	52
3.4.2	Methoden der Modellierungssysteme	53
3.4.3	Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung.....	54
3.5	Transportmodellierungssysteme für die gesättigte Zone	55
3.6	Hydrologische Modellierungssysteme: Atmosphärischer Eintrag und Oberflächenwassergerinne-Modellierungssysteme	56
3.7	Umweltgeologische Modellierungssysteme.....	59
3.8	Beispiele des Einsatzes verschiedener Modellierungssysteme.....	61
3.8.1	Subrosions-Talraum Unterwerra	61
3.8.2	Nubisches Aquifer System	65
3.8.3	Untere Mulde/Fuhne	68
3.8.4	Beispiele für die Implementation von Modellierungssystemen in Werkzeugen	89
3.9	Modellierungssysteme in der Zusammenfassung	91
4	INTERAKTIONEN VON HYDROGEOLOGISCHEN MODELLIERUNGSSYSTEMEN	93
4.1	Kriterien zur Nutzung von Kopplungen bei der hydrogeologischen Modellierung.....	98
4.2	Horizontale Modellkopplungen.....	100

4.3	Vertikale Modellkopplungen	103
4.4	Stabilität gekoppelter Modellierungen	108
4.5	Räumliche Dimensionierung und Diskretisierung gekoppelter Modellierungen.....	109
4.6	Zeitliche Dimensionierung und Diskretisierung gekoppelter Modellierungen.....	111
4.7	Beispiele gekoppelter Modellierungen	112
4.7.1	Subrosions-Talraum Unterwerra	113
4.7.2	Nubisches Aquifer System	114
4.7.3	Untere Mulde/Fuhne	115
4.8	Zusammenfassung der Schnittstellen	118
5	VERGLEICHE ZWISCHEN GEKOPPELTEN MODELLEN UND DER REALITÄT.....	119
5.1	Kalibrierung.....	119
5.2	Validierung	124
5.3	Sensitivitätsanalyse, Fehleranalyse und -fortpflanzung	124
5.4	Beispiele für die Kalibrierung gekoppelter Modelle.....	125
5.5	Zusammenfassung der Kontrollinstrumente.....	130
6	PROGNOSERECHNUNGEN MIT GEKOPPELTEN MODELLEN	131
7	AUSBLICK AUF KÜNFTIGE ENTWICKLUNGEN.....	134
8	LITERATUR	137

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Aufbau der Arbeit. Die grau unterlegten Bereiche stellen die Beispiele mit ihren jeweilig geschätzten Anteilen am Gesamtkapitel dar.....	3
Abbildung 2: Beispiel eines Systems, das aus mehreren Systemelementen besteht. Die Systemelemente sind wiederum Systeme. Für jedes System gibt es Modellierungssysteme von sehr unterschiedlicher Qualität und für einige auch Modellierungswerkzeuge (aus FORNER & GOSSEL, 1996).	5
Abbildung 3: Prozess der Systemanalyse und Modellentwicklung (verändert nach BOSSEL, 1992). Im Zentrum der Modellentwicklung steht der Modellzweck. Je mehr Systemelemente und damit Modellierungssysteme und Modellierungswerkzeuge zu einem Gesamtsystem verbunden werden, desto größer wird nach BLUMENSTEIN ET AL. (2000) die Komplexität des Gesamtsystems.	7
Abbildung 4: Lageübersicht der drei Modellgebiete, die exemplarisch vorgestellt werden, auf der Grundlage des Satellitenbildes (NASA 2007), das Koordinatensystem ist geografisch (WGS 1984) mit Längen- und Breitengradangaben.	9
Abbildung 5: Modellgebiet des Nubischen Aquifersystems in der Übersicht. Die Modellgrenzen sind hier weitgehend geologisch durch die Grundgebirgsausbisse definiert. Im Norden ist das Mittelmeer als Randbedingung gewählt worden. Datengrundlage ist die geologische Karte (CONOCO 1987).	10
Abbildung 6: Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne in der Übersicht sowie mit den Modellgrenzen, die sich aus den hydrologischen und hydrogeologischen Randbedingungen ergeben. Die Grenzen der geologischen Detailmodelle sind ebenfalls dargestellt. Datengrundlage ist ein Satellitenbild etwa aus dem Jahr 1988 (SCOUT SYSTEMS 1997), das die Ausmaße der Tagebaue in ihrem Endstadium deutlich macht.....	11
Abbildung 7: Modellgebiet des Subrosions-Talraums Unterwerra mit seinem Einzugsgebiet. Die Modellgrenzen sind durch das oberirdische Einzugsgebiet definiert. Datengrundlage sind das auf der Basis der Höhenlinien (HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1995) und THÜRINGER LANDESVERMESSUNGSAMT (1997)) erstellte digitale Geländemodell in der Schummerungsdarstellung sowie die nach JACOBESHAGEN (1993) digitalisierte geologische Karte.....	12
Abbildung 8: Grafische Übersicht des Kapitels 2. Zur besseren Orientierung ist diese Grafik in den folgenden Unterkapiteln als Miniatur vorangestellt.....	15
Abbildung 9: Statistische, konstruktive und prozessbasierte Methoden in der statischen Modellierung.....	18
Abbildung 10: Statistische, analytische und numerische Methoden in der dynamischen Modellierung.....	23
Abbildung 11: Räumliche Skalen bei der hydrogeologischen Modellierung (verändert nach BRONSTERT ET AL. 2005)	26
Abbildung 12: Zeitskalen für hydrologische und hydrogeologische Modellierungen (verändert und ergänzt nach BRONSTERT ET AL. 2005).	29

Abbildung 13: Zusammenhänge zwischen räumlichen und zeitlichen Prozessskalen in der Hydrologie und Hydrogeologie (verändert nach BLÖSCHL 1996). Es werden nur die Strömungsprozesse, kein gelöster und/oder partikulärer Transport betrachtet.	30
Abbildung 14: Dynamik des Braunkohlentagebaus in der Region Bitterfeld. Die verschiedenen Zeitschnitte machen die Bewegungsrichtung von den Gebieten westlich Bitterfeld über den Süden bis zum Osten der Stadt deutlich. Damit gehen Veränderungen des Deckgebirges und damit des Kippenmaterials einher. Die Tiefenlagen der Braunkohle und damit die Endteufen des Abbaus werden ebenfalls beeinflusst.	35
Abbildung 15: Grafische Übersicht von Kapitel 3. Zur besseren Orientierung ist diese Grafik als Miniatur in den folgenden Unterkapiteln vorangestellt.....	37
Abbildung 16: Geologische Modellierung. Der Ablauf der Modellbildung kann durch die konsequente Nutzung digitaler Mittel bereits bei der Datenaufnahme im Gelände effizienter werden. Die Nutzung geostatistischer, konstruktiver und prozessbasierter Methoden bei der Interpretation ist nicht alternativ, sondern zunehmend integrativ zu sehen.....	39
Abbildung 17: Sickerwassermodellierung. Die Eingangsdaten sind oft bereits digital vorhanden, müssen jedoch für die Modellierung in geeigneter Weise aufbereitet werden. (P = Niederschlag, ETP = Potentielle Evapotranspiration)..	44
Abbildung 18: Modellierung ungesättigte Zone. Die vertikale Diskretisierung der geologischen Modelle reicht für die numerischen Methoden nicht aus, um konvergierende Modelle zu erzeugen. Die Erhöhung der Diskretisierung bringt in der 3D-Berechnung eine lineare Vervielfachung der horizontalen Auflösung mit sich.....	48
Abbildung 19: Modellierung der gesättigten Zone. Die Eingangsdaten der Modellierung müssen meist erst gesondert aufbereitet werden, um die Methoden nutzen zu können.	51
Abbildung 20: Hydrologische Modellierungen. Das Spektrum der Modellierungssysteme ist sehr groß und kann hier nur in einer Auswahl wiedergegeben werden. Entsprechend verhält es sich mit den Eingangsdaten und Ergebnissen.....	58
Abbildung 21: Umweltgeologische Modellierungen. Während hier die bereits bestehenden Modellierungssysteme nur vereinzelt vorhanden sind, können sowohl die Fragestellungen (und damit die Ergebnisse) als auch die zu ihrer Beantwortung notwendigen Eingangsdaten sehr vielfältig sein.	60
Abbildung 22: Arbeitsablauf der geologischen Modellierung des Subrosions-Talraums Unterwerra.	62
Abbildung 23: Karte der im Subrosions-Talraum Unterwerra durchgeführten hydrogeologischen Parameterermittlungen (analytische Methoden).	63
Abbildung 24: Arbeitsablauf der numerischen Grundwassermodellierung für den Subrosions-Talraum Unterwerra.....	64
Abbildung 25: Arbeitsablauf der Grundwasserneubildungsmodellierung für den Subrosions-Talraum Unterwerra.....	65
Abbildung 26: Arbeitsablauf der geologischen Modellierung für das Nubische Aquifer System.	66

Abbildung 27: Arbeitsablauf für die numerische Grundwassermodellierung des Nubischen Aquifer Systems.....	67
Abbildung 28: Hydrogeologisches Strukturmodell des Nubischen Aquifer Systems.....	68
Abbildung 29: Arbeitsablauf der geologischen Modellierungen im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.....	69
Abbildung 30: Geologisches Modell, entwickelt mit statistischen Methoden. Auf der Grundlage der Bohrungen ergeben sich zu stark vereinfachende Strukturen. Die Grenzflächen der Schichtkörper müssen durch weitere geometrische Operationen korrigiert werden. Wesentliche Datengrundlage sind z.B. das DGM und die horizontalen Ausmaße und die Tiefe der Tagebaue (aus HUBERT 2005).	70
Abbildung 31: Geologisches Modell, entwickelt mit konstruktiven Methoden. Die zusätzlich für einen Horizont abgebildete Triangulation zur Interpolation zwischen den konstruierten Profilschnitten muss expertenbasiert angepasst werden, um die geologischen Strukturen sinnvoll zu formen (aus HUBERT 2005).	71
Abbildung 32: Arbeitsablauf der Sickerwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.....	74
Abbildung 33: Räumliche Eingangsdaten der Sickerwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne. Die Daten zu Landnutzung, Boden und Grundwasserflurabstand wurden in klassifizierter Form im 25 m-Raster verarbeitet.....	75
Abbildung 34: Räumliche Verteilung der Sickerwassermenge für a) ein mittleres, b) ein trockenes und c) ein nasses Jahr. Die Berechnungsmethode von WESSOLEK ET AL. (2004) wurde für die weitere zeitliche Auflösung in Monatsmittelwerte modifiziert.	78
Abbildung 35: Ganglinie der monatlichen Sickerwassermenge zweier Hydrotope in den Jahren 2002 bis 2004.	81
Abbildung 36: Arbeitsablauf der numerischen Grundwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.....	82
Abbildung 37: Übersicht des hydrogeologischen Regionalmodells. Grundlage ist ein Finite-Elemente Modellierungssystem, in dem die horizontale Diskretisierung sehr variabel gestaltet werden kann. Die Randbedingungen wurden im Norden, Osten und Westen mit zeitlich variablen Wasserständen (Dirichlet-Randbedingung) vorgegeben, im Süden wurde eine Wasserscheide (vonNeumann Randbedingung) genutzt. Zusätzlich wurden diejenigen Bäche, die eindeutig an das Grundwasser angeschlossen sind, als interne Randbedingungen mit variablem Wasserstand übernommen.	84
Abbildung 38: Tagebautentwicklung im Großraum Bitterfeld. Für die Modelle wurden die grün gekennzeichneten Zeitschnitte gewählt, um die Randbedingungen optimal anpassen zu können.....	85
Abbildung 39: 2D-Projektion der Pathlines der Strömungszustände a) 1890, 1922 und 1978, b) 1998 und 2005. Die Startpunkte der Berechnung wurden für alle Zeitpunkte gleich gesetzt.	86

Abbildung 40: Wasserstandsganglinien der Mulde. Der Vergleich der gemessenen und modellierten Ganglinien zeigt, dass das Modell die Werte nicht im Detail, sondern nur im generellen Verlauf wiedergibt. Die violetten Linien sind zu den Zeitpunkten der Frühjahrshochwässer im März positioniert. Der Korrelationskoeffizient für die Datenreihe von 3707 Mess- und Modellwertepaaren liegt bei 0.31, das 99%-Vertrauensintervall ist damit erfüllt.....	88
Abbildung 41: Einsatz von Modellierungssystemen und -methoden in den Untersuchungsgebieten.....	91
Abbildung 42: Übersicht der betrachteten Modellierungssysteme. Die Verbindungen zwischen den Modellierungssystemen können sehr unterschiedlich gestaltet sein und sind hier nur schematisch dargestellt.....	95
Abbildung 43: Kopplungsmöglichkeiten von Modellierungssystemen (ModSys).	97
Abbildung 44: Grafische Übersicht von Kapitel 4. Zur besseren Orientierung ist diese Grafik als Miniatur in den folgenden Unterkapiteln vorangestellt.....	98
Abbildung 45: Betrachtete Modellierungssysteme der vertikalen Kopplung in hydrogeologischen Systemen. Die Pfeile markieren die Richtung der Kopplung, die Zahlen beziehen sich auf die Erläuterungen im Text mit der jeweiligen Abschnittsnummerierung.	103
Abbildung 46: Kopplung der Modelle für das Untersuchungsgebiet Subrosions-Talraum Unterwerra.....	114
Abbildung 47: Kopplungen der Modelle zur Geologie, Grundwasserneubildung und Grundwasserströmung im Modellgebiet Nubisches Aquifer System.....	115
Abbildung 48: Kopplungen der Modelle im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.	118
Abbildung 49: Scatter-Plot der gegen die Messdaten aufgetragenen Modelldaten. Die Gerade und das Bestimmtheitsmaß des stationären Modells von 0.9776 (Korrelationskoeffizient 0.9887) und einem Bestimmtheitsmaß von 0.8065 (Korrelationskoeffizient 0.8981) des instationären Modells zeigen einen sehr engen Zusammenhang der Datenmengen (Stichprobenumfang: Jeweils 142 Grundwassermessstellen in den quartären Grundwasserleitern).	127
Abbildung 50: Variogramme der Messdaten im Gebiet Untere Mulde/Fuhne für die Stichtagsmessung Oktober 2002. Das omnidirektionale Variogramm (oben) zeigt ein lineares Variogrammmodell. Die beiden gerichteten Variogramme haben einen Sill von etwa 0.2 und einen Range von etwa 350 m.....	129
Abbildung 51: Verteilung der Flächengrößen der Voronoi-(Thiessen-)Polygone im Gebiet Untere Mulde/Fuhne	130

1 Einführung und begriffliche Grundlagen von Umweltmodellen

Die Erfassung unserer Umwelt, die prognostische „Modellierung“ ihrer weiteren Entwicklung und die tatkräftige Veränderung zugunsten besserer Lebensbedingungen gehören zum Wesen des Menschen. Wir erfassen unsere Umwelt seit Jahrtausenden in verschiedensten Formen: Am besten dokumentiert sind astronomische Beobachtungen, aber auch klimatische und biologische Veränderungen sind schon von Anbeginn an ganz wesentlich für die menschliche Entwicklung gewesen.

Auch im Bereich der Wasserversorgung und der Nutzung von Wasserwegen hat der Mensch im Laufe seiner Entwicklung bereits sehr früh verändernd in seine Umwelt eingegriffen. Beispiele hierfür sind Zisternen, Bewässerungsanlagen, Wasserfassungen wie Khanate und Brunnen, Flussausbauten, Trockenlegung von Feuchtgebieten, wie es an weltweiten Beispielen in ASCE (1998), für einige Beispiele in Deutschland sehr kurz von VORREYER (1987) und für den Berliner Raum z.B. von FORNER & GOSSEL (1996) beschrieben wird. Dabei hat der Mensch oftmals die Folgen seines Handelns nicht in geeigneter Weise prognostizieren können. Aber auch ohne menschliche Eingriffe haben Entwicklungen der Umwelt und hier insbesondere des Wasserhaushalts die menschliche Entwicklung entscheidend beeinflusst. Dies konnte insbesondere im Bereich der Sahara durch detaillierte Forschungen nachgewiesen werden, z.B. bei EDMUNDS & WRIGHT (1979), PACHUR ET AL. (1990), HOELZMANN ET AL. (2001), KLITZSCH (1991). Auch die prähistorische und historische Entwicklung in Europa ist nur zwischen den Eiszeiten möglich gewesen. Problematisch waren in der Vergangenheit gerade die Erfassung von Prozessen und Prognosen für größere Räume – seien es globale Entwicklungen oder Prognosen für größere Zeiträume. Durch die aktuellen Möglichkeiten zur Erfassung und Modellierung unserer Umwelt mit Hilfe der EDV wird die Lücke zwischen dem Verständnis von Prozessen und den unbewussten Einflussnahmen kleiner. Modelle für Teile der Wasserhaushaltprozesse und chemische Prozesse wurden bereits sehr frühzeitig entwickelt. Die hohe strukturelle Vernetzung der durch Modelle erfassbaren Einzelprozesse bereitet jedoch auch heute noch große Probleme, weil die Komplexität sehr hoch ist. Zusätzlich besteht heute das Problem der hohen Diversifizierung in den Wissenschaften. Gerade in den Kompartimenten der Hydrosphäre treffen sich mehrere Natur- und Ingenieurwissenschaften, wodurch eine Überlappung und Konkurrenz der Forschungsbereiche besteht, die grundsätzlich aber auch die Chance zur interdisziplinären Arbeit bietet. Die systematische Betrachtung der Verknüpfung von bestehenden, teilweise selbst hoch komplexen Modellierungssystemen für Teilprozesse kann über die direkte Anwendung auf Fragen des Wasserhaushalts hinaus auch für die Übertragung auf andere numerisch modellierbare Prozesse genutzt werden.

1.1 Einführung und Ziele

EDV-gestützte Modelle ermöglichen Umweltwissenschaftlern und damit auch Hydro- und Umweltgeologen heute die Prognose von bestimmten Auswirkungen anthropogener Eingriffe in bestehende Umweltsysteme, so auch in den Landschafts- und Wasserhaushalt. VAN BERNEM (2001) erweitert die Anwendbarkeit von Modellen auch in den Bereich der Sensitivitätsbetrachtungen („Environmental Sensitivity Indexes“), der Risikobewertung („Environmental Risk Assessment“) und der Bewertung von Umwelteinwirkungen („Environmental Impact Assessment“).

Die mit Hilfe der Modellierungswerkzeuge erstellten Modelle sind ein auf eine Fragestellung reduziertes Abbild der Realität. Die meisten der eingesetzten Modellierungswerkzeuge beschränken sich auf einen thematischen Ausschnitt, um, spezialisiert bis in kleinste Details, in mehreren Projekten, als Teile eines gleichsam für die Aufgabe zusammengesetzten Baukastens, einsetzbar zu sein. Sie können beispielsweise nur einen Teil des Wasserkreislaufs und der mit ihm verknüpften Stoffströme abbilden.

Für einige Aufgaben reicht daher der Einsatz eines Modellierungswerkzeugs allein nicht aus. Einige Beispiele hierfür:

- Jedes numerische Grundwassermodell benötigt ein geologisches Modell, das durch Abstraktion der geologischen zu hydrogeologischen Strukturen und Parametern zum Aufbau eines hydrogeologischen Strukturmodells beiträgt. Bei den meisten Modellen reicht eine Bearbeitungsstufe aus, die einerseits die Strukturen plausibel – aber nicht im Detail – wiedergibt und andererseits an die Anforderungen des numerischen Prozessors optimal angepasst ist.
- Für Wasserhaushaltsuntersuchungen und für Fragen des Grund-/Trinkwasserschutzes sind neben einem numerischen Grundwassermodell auch ein Grundwasserneubildungsmodell und/oder ein Bodenwasserhaushaltsmodell notwendig. Oftmals reichen hier flächendifferenzierte und zeitlich gemittelte Parameterisierungen aus. Nur für tiefer gehende Fragen der Dynamik eines Einzugsgebiets und für eine mächtige ungesättigte Zone müssen räumlich und zeitlich hoch differenzierte Modelle, evtl. mit Rückkopplungen erstellt werden.
- Unter den Aspekten des Hochwasserschutzes oder des landschaftsökologisch notwendigen Niedrigwasserabflusses sind Grund- und Oberflächenwassermodelle zu verbinden.
- Siedlungswasserwirtschaftliche und technische Maßnahmen verlangen in manchen Fällen nicht nur eine Veränderung von Parametern oder Randbedingungen bei der Anwendung bestehender Modellierungswerkzeuge, sondern vor allem auch den zusätzlichen Einsatz eigenständiger Entwicklungen.
- Das Ausbreitungsverhalten von chemischen Stoffen im Grundwasser kann nur in Ausnahmefällen mit den reinen Advektionsmodellen abgebildet werden. Eine Kopplung mit der Modellierung chemischer Gleichgewichtsreaktionen und biologischer Abbaumodelle ist in den meisten Zusammenhängen notwendig.
- Zur Bewertung der Risiken von Schadstoffausbreitungen sind nicht nur Transportmodelle notwendig, evtl. verknüpft mit hydrochemischen Modellen, sondern auch Fragen der Landnutzung, der Entwicklung von Nutzungen des Grundwassers und des Bodens und biologische und ökologische Fragestellungen.

Die einzelnen Teilmodelle müssen aufgrund der Komplexität der Modellierungswerkzeuge oftmals von Wissenschaftlern verschiedener Fachdisziplinen bedient werden. Schnittstellen und die Interaktion von Modellierungssystemen müssen bei solchen Modellen grundsätzlich geklärt werden.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, den theoretischen Überbau dieser Schnittstellen zu systematisieren und Beispiele für die Verknüpfung vorzustellen. Hierbei muss natürlich auch auf unterschiedliche Modellierungskonzepte eingegangen werden. Im Vordergrund dieser Arbeit stehen Teilmodelle zur Geologie, Hydrogeologie (gesättigte und ungesättigte Zone) und Grundwasserneubildung. Abbildung 1 zeigt, dass dies

im ersten Teil dominierende Aufgaben sind. Kap. 4 ist das zentrale Kapitel, in dem die Verknüpfungen dieser Modellierungssysteme dargestellt werden.

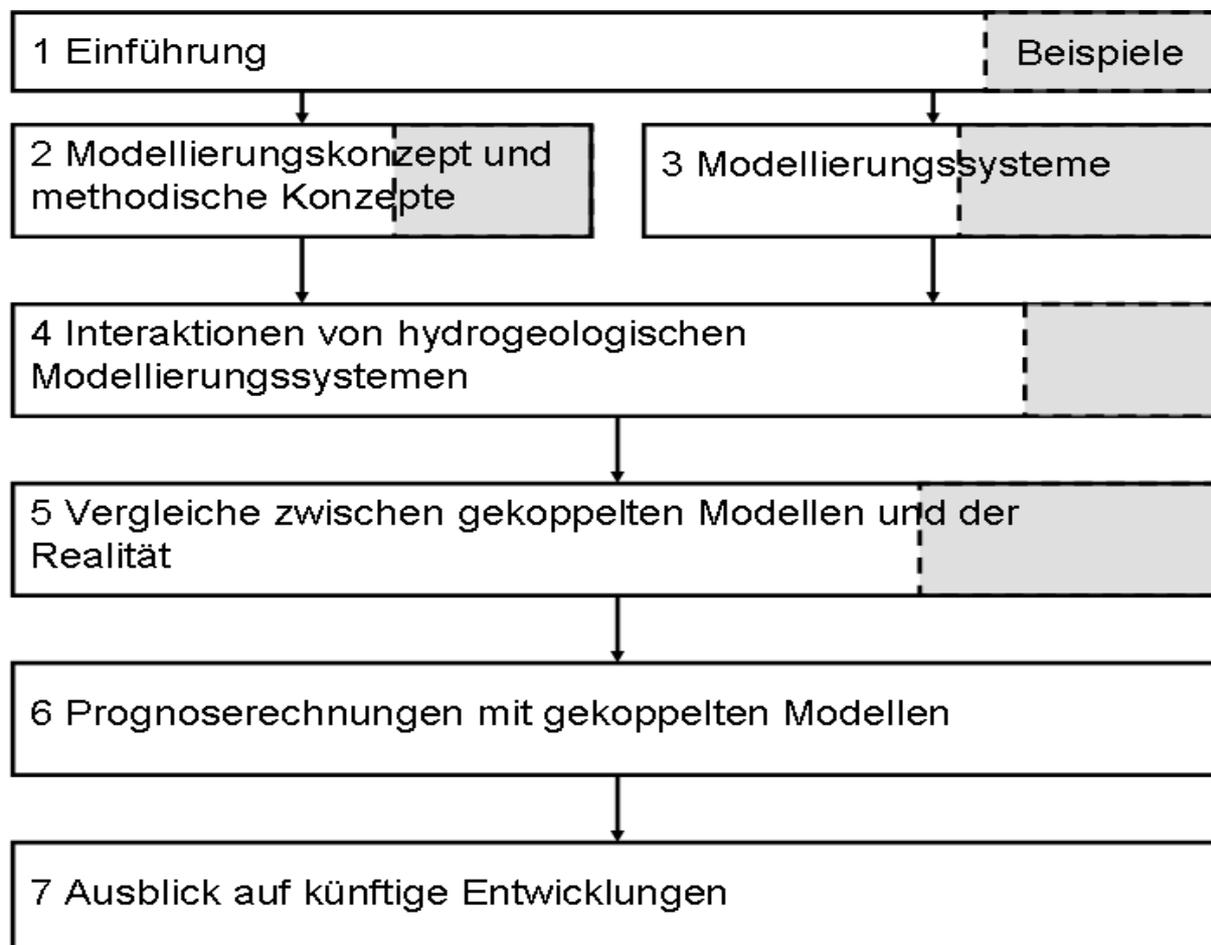


Abbildung 1: Aufbau der Arbeit. Die grau unterlegten Bereiche stellen die Beispiele mit ihren jeweilig geschätzten Anteilen am Gesamtkapitel dar.

Die folgenden Kapitel 5 und 6 sind den regulären Aufgaben von Modellierungen unter dem ausschließlichen Aspekt der Kopplung von Modellierungssystemen gewidmet, denn gekoppelte Modelle bedürfen sowohl bei der Kalibrierung als auch bei den Prognoserechnungen zusätzlicher Kriterien und Rahmenbedingungen. Der abschließende Ausblick zeigt die Entwicklungslinien für Kopplungen und die zugehörigen Schnittstellen auf.

1.2 Begriffliche Grundlagen

Zum besseren Verständnis werden folgende Begriffsdefinitionen voran gestellt:

- Ein **System** ist ganz allgemein nach BOSSEL (1994) und BUCHHOLZ (2001) ein Objekt, das aus mehreren Elementen, die zeitlich, räumlich oder multidimensional über Relationen miteinander verknüpft sind, zusammengesetzt ist. Ein System selbst ist wiederum durch zu definierende Grenzen von anderen Systemen (zu denen durchaus Schnittstellen existieren) getrennt. Jedes Element eines Systems kann als eigenes System oder Teil eines anderen Systems aufgefasst werden, obwohl das übergeordnete System selbst durch eine Herausnahme eines Teilsystems seine Integrität verlieren würde. Systeme lassen sich nach BLUMENSTEIN ET AL. (2000) entsprechend ihrer Relationen und der Anzahl der Elemente in einfache und komplexe Systeme, entsprechend des zeitlichen Verhaltens in statische und dynamische Systeme, bezüglich der Wechselwirkung mit ihrer Umwelt in geschlossene und offene Systeme, in Bezug auf die Relationen der Elemente zueinander in deterministische und stochastische Systeme und bezüglich des Verhaltens in stabile und instabile Systeme gliedern. Abbildung 2 zeigt ein Beispiel eines Systems der Wasserkreisläufe in Berlin, das aus mehreren Systemelementen der Meteorologie, Hydrologie, Siedlungswasserwirtschaft und Hydrogeologie aufgebaut ist. Die Erfassung eines Systems mit seinen Elementen und Relationen bildet nach BUCHHOLZ (2001) die Vorstufe zur Erstellung eines Modells, indem durch eine Transformation in weiteren Entwicklungsschritten ein mathematisches Modell generiert wird. Nach DEATON & WINEBRAKE (2000) besteht ein System
 1. aus Speichergrößen,
 2. Prozessen, die direkt die Veränderung der Speichergrößen angeben,
 3. Konvertern, die die Veränderungsraten wiedergeben, und
 4. den Verknüpfungen zwischen Speichergrößen, Prozessen und Konvertern.
- Als **Modellierungssysteme** werden hier Systeme verstanden, die einzig dazu dienen, Modelle zu erstellen. Die in den Modellierungssystemen genutzten Methoden sind dabei völlig offen. Aufgrund systemarer, struktureller oder räumlicher Unterschiede und definierbarer Schnittstellen bilden die Modellierungssysteme Bausteine, im vorliegenden Falle der Hydrogeologie, die voneinander abgegrenzt werden können. Sie können damit auch wieder Elemente übergeordneter Systeme werden.
- **Modellierungswerkzeuge** bezeichnen entsprechend BRASSEL ET AL. (1999) (meist computerimplementierte) Realisierungen der Modellierungssysteme. Die Bandbreite der Werkzeuge reicht heute von Tabellenkalkulationsprogrammen über Geoinformationssysteme bis hin zu Spezialwerkzeugen, z.B. für die numerische Grundwasserströmungsmodellierung.
- **Modelle** sind vereinfachende und pragmatisch orientierte Abbilder der Natur. Der Begriff leitet sich vom lateinischen Modulus ab und bezeichnet allgemein Muster, Vorbilder, Entwürfe. Diese sehr allgemeine Bezeichnung macht es notwendig, eine Reihe weiterer Begrifflichkeiten genauer zu definieren und zu erläutern. BROY & STEINBRÜGGEN (2004) verstehen beispielsweise, ähnlich wie in der Mathematik, allgemeine Datenmodelle der Informatik sowie formale Strukturen bereits als Modelle. Davon heben sich sowohl die Modelle der Ingenieurwissenschaften (auch der Architektur) als auch die stark dynamischen naturwissenschaftlichen Modelle

deutlich ab. KASTENS & KLEINE BÜNING (2005) beschreiben mehrere Arten von Modellen: Ein Modell kann eine Abbildung und das Original bezeichnen. Sowohl das Original(modell) als auch das Abbild(modell) können konkret oder abstrakt sein. Aus dem Bereich der Geologie wäre beispielsweise ein konkretes Original ein Steinbruch mit seinen Schichten, eingemessenen Schichtgrenzen und tektonischen Grenzflächen, ein abstraktes Original die Abfolge und der lithostratigraphische Aufbau der theoretisch vorhandenen Schichtenfolge. Ein konkretes Abbild könnte dann ein Gips-Abbild, ein abstraktes Abbild eine Darstellung der Klüfte in einem Kluftnetz sein. In der Logik ist „eine Struktur S ein Modell der logischen Formeln F, wenn alle Formeln aus F für S gelten“ (KASTENS & KLEINE BÜNING 2005). KAISER (2000) weist aus seiner Erfahrung mit betriebswirtschaftlichen Modellen darauf hin, dass der Abbildungsprozess möglichst große Realitätsnähe gewährleisten muss, um den Informationsverlust möglichst gering zu halten. Er unterscheidet daher iso-morphe Modelle, die ohne Informationsverlust arbeiten, und homomorphe Modelle mit Informationsverlust. In der hydrogeologischen Praxis sind Modelle mit Parametern und Randbedingungen versehene Anwendungen der Modellierungssysteme, die in Modellierungswerkzeugen umgesetzt sind. Weitere, von BROCKS (2001) zusammengetragene Definitionen und Beispiele von Modellen („models“) werden hier nicht vertieft dargestellt.

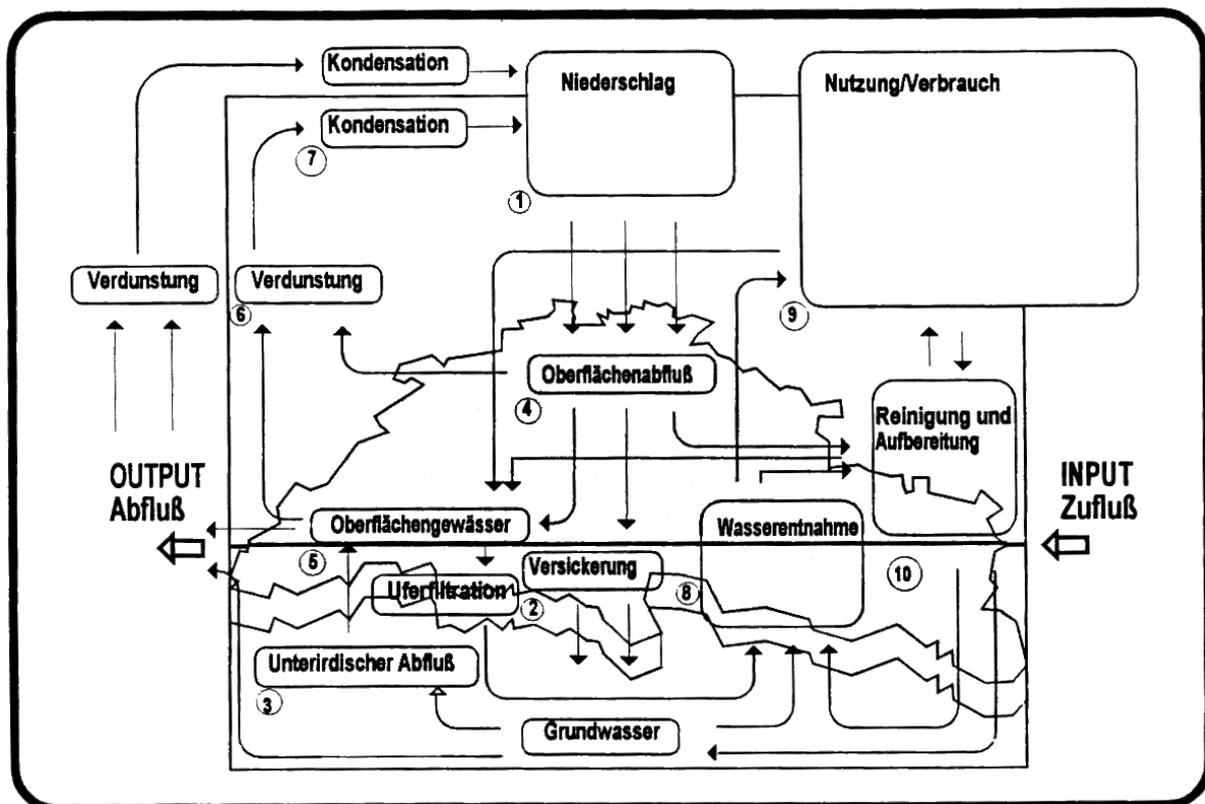


Abbildung 2: Beispiel eines Systems, das aus mehreren Systemelementen besteht. Die Systemelemente sind wiederum Systeme. Für jedes System gibt es Modellierungssysteme von sehr unterschiedlicher Qualität und für einige auch Modellierungswerkzeuge (aus FORNER & GOSSEL, 1996).

Durch die **Kalibrierung** und die **Validierung** wird die Zulässigkeit der Abbildung der Realität für den ausgewiesenen Zweck durch das Modell nachgewiesen.

Die Belegung mit (meist prognostischen) Randbedingungen und/oder Parametern führt schließlich zu einem **Szenario**.

Modellierung bezeichnet also den Prozess, bei dem mit Hilfe von Modellierungswerkzeugen zunächst Modelle und anschließend Szenarien erstellt werden. Abbildung 3 zeigt eine Übersicht der Modellentwicklung, in deren Mittelpunkt der Modellzweck steht. Der Modellzweck entscheidet über die Zulässigkeit des Modellierungskonzepts und den Einsatz von Modellierungssystemen, die Modellierungssysteme über geeignete Werkzeuge. Die Systementwicklung erfolgt dann von der Beobachtung und Analyse des Systems über die mathematische Formulierung bis zur Umsetzung in oder mit Hilfe von Modellierungswerkzeugen in einem Modell. Bei komplexen Modellierungsaufgaben reicht der Einsatz eines Modellierungssystems nicht mehr aus. Hier spielen die Schnittstellen und ihr systematischer Einsatz eine entscheidende Rolle.

Für Aufgaben der Informatik gliedern HUBWIESER & AIGLSTORFER (2004) den Modellierungsprozess in vier Arbeitsgänge, was für die Modellerstellung in der Hydrogeologie für die Vorbereitungsphase übernommen werden kann. Alle diese Arbeitsschritte werden meist nicht nur zeitlich parallel bearbeitet, sondern hängen oft auch direkt miteinander zusammen. Ein erster Schritt besteht in der Abgrenzung des Modells, was sowohl für die Aspekte des Modells gilt, die sich aus den Zielen der Modellierung ableiten, als auch für die räumlichen und zeitlichen Ausmaße. Der Arbeitsschritt der Abstraktion umfasst insbesondere die Ausklammerung von wenig relevanten Details in der Systemstruktur. Die Idealisierung führt zu einer leichteren Beschreibung des Systems durch die Reduzierung auf ideale Eigenschaften. Die anschließende Beschreibung leitet zu den bei Nutzung bereits fertig gestellter Modellierungswerkzeuge notwendigen Aufgaben über.

In vielen Fällen reicht die Erstellung eines von BOSSEL (1994) als Wortmodell und von FH-DGG (1999) als Hydrogeologisches Modell bezeichneten beschreibenden Modells aus. Der von BUCHHOLZ (2001) als Modellentwurf übersetzte englische Begriff *conceptual model* bezeichnet eine ausformulierte Modellierungsstruktur, in der Prozesse nicht mathematisch-physikalisch beschrieben sind. Der weiterführende und für belastbare prognostische Aussagen notwendige Schritt ist die mathematische Modellierung. Hierbei werden auf der Grundlage der naturwissenschaftlichen Gesetze und auf der Basis zu beschreibender Randbedingungen und Parameter Prozesse innerhalb eines Untersuchungsgebiets beschrieben und je nach Aufgabenstellung auch prognostisch ausgewertet. Der Begriff „konzeptionelles Modell“ in der Definition von BUCHHOLZ (2001) ist ein physikalisch-mathematisch formuliertes Modell, dessen raumzeitliche Auflösung aufgrund der Modelldimensionen allerdings so gering ist, dass sich die modellierten Prozesse nicht mehr kontinuierlich abbilden lassen. Im Folgenden soll diese Differenzierung durch BUCHHOLZ (2001) nicht übernommen und die Definition des konzeptionellen Modells als nicht mathematisch-physikalisch ausformulierte Prozessmodellierungsstruktur im Sinne des *conceptual model* genügen.

Die Nutzung von fertigen Modellierungswerkzeugen führt dazu, diese für manche Modellierungsaufgaben zu verbinden oder zu koppeln. Hierbei muss sich der Modellierende darüber klar werden, welche Informationen ein Modellierungssystem oder das konkrete Werkzeug empfangen muss und welche Informationen es an andere Teilsysteme weitergeben kann. Diese **Kopplung** zwischen Modellierungssystemen kann auf mehrere Arten geschehen, wovon zwei kurz exemplarisch angesprochen werden:

Die Übergabe von Werten für Randbedingungen oder Parametern eines Modellierungssystems an ein anderes wird als **Parameterisierung** bezeichnet. Sie kann am ehesten mit der in der Informatik üblichen Parameterübergabe an ein Unterprogramm verglichen werden. Eine Untervariante dieser Kopplung besteht darin, dass die Übergabeparameter durch das Modellierungssystem selbst verändert werden, bevor sie einem weiteren Modellierungssystem zur Verfügung gestellt werden.

Rückkopplungen sind direkte Verbindungen, bei denen die Ergebnisse des ersten Modellierungssystems zu einem bestimmten Zeitschritt an ein zweites Modellierungssystem übergeben werden, das wiederum seine Ergebnisse dem ersten zur Verfügung stellt. Sie sind in der Informatik mit Programmen vergleichbar, die iterativ arbeiten. Eine andere iterative Arbeitsweise ist in numerischen Modellierungssystemen implementiert. Dort fehlen im Allgemeinen die Rückkopplungselemente. Solche Rückkopplungen können wechselseitig unterschiedlichen Einfluss auf die Ergebnisse haben.

Alle Formen der Modellkopplungen können in ihrer Realisierung sehr komplex ausfallen, weshalb sich die vorliegende Arbeit den systematischen und praktischen Problemen und den aus ihnen resultierenden Regeln zu nähern versucht.

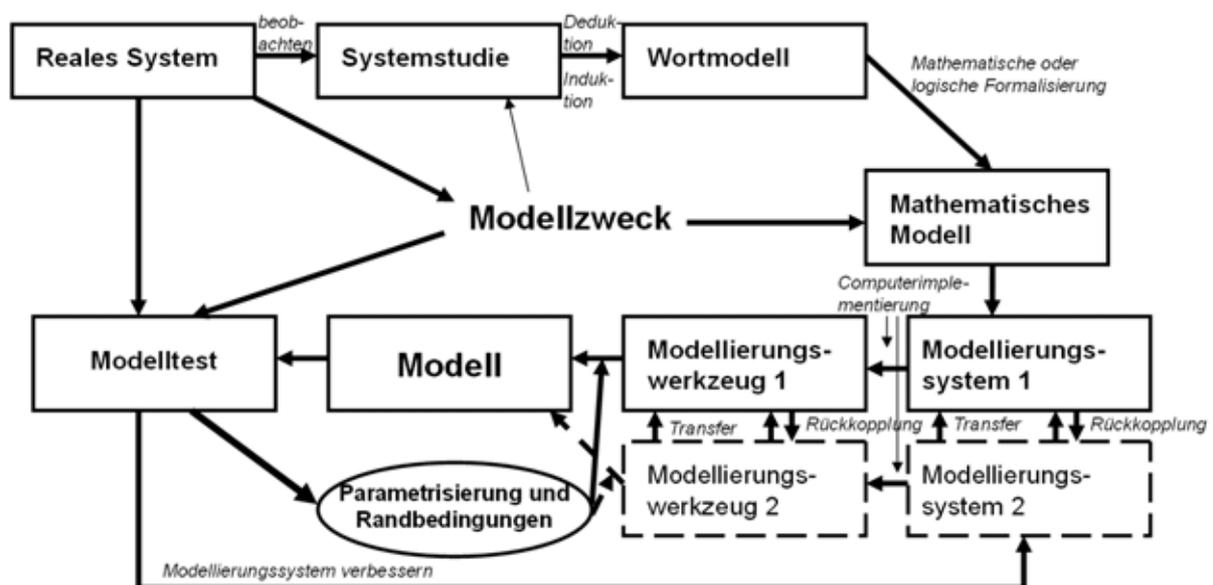


Abbildung 3: Prozess der Systemanalyse und Modellentwicklung (verändert nach BOSSEL, 1992). Im Zentrum der Modellentwicklung steht der Modellzweck. Je mehr Systemelemente und damit Modellierungssysteme und Modellierungswerkzeuge zu einem Gesamtsystem verbunden werden, desto größer wird nach BLUMENSTEIN ET AL. (2000) die Komplexität des Gesamtsystems.

1.3 Modellbeispiele

Die theoretischen Analysen werden anhand dreier numerischer Grundwassermodelle exemplarisch und auf die Zielstellung reduziert dargestellt. Die Lage aller drei Modellierungsgebiete ist in Abbildung 4 dargestellt. Die Reihenfolge der Beispiele wurde gewählt, um die Entwicklungsprozesse der Schnittstellen zwischen Modellsystemen und die Auswirkungen einer systematischen Vorgehensweise zu verdeutlichen.

- Das Modell Subrosions-Talraum Unterwerra (Region in der Umgebung der Stadt Eschwege, s. Abbildung 7) umfasst neben einem kiesgefüllten erweiterten Talabschnitt an der unteren Werra auch die umgebenden Festgesteinsbereiche des Einzugsgebiets. Für die Fragestellungen der Schnittstellen stehen hier insbesondere die Verknüpfung von Fest- und Lockergesteinsaquiferen in einem Einzugsgebiet. Das Gebiet ist durch eine sehr hohe Erkundungsdichte in dem Talraum gekennzeichnet, was Besonderheiten für die hydrogeologische Erkundung zur Folge hat.
- Das Modell des Nubischen Aquifersystems (s. Abbildung 5) betrachtet eine etwa 2 Mio. km² große Fläche der östlichen Sahara (große Teile Ägyptens, des nördlichen Sudans und des östlichen Libyens sowie die nordöstliche Ecke des Tschads). Neben der räumlichen Größe ist für das Modell auch die zeitliche Dimensionierung von etwa 25 000 Jahren charakteristisch. Hier geht es um die Verknüpfung von klimatischen Entwicklungen mit einem Grundwassermodell, dessen aktuelle Nutzung von großer politischer Bedeutung ist. Im Fokus stehen hier die Verknüpfungen zwischen geologischen Untersuchungen aus den letzten 20 Jahren, und der Interpretation in Form eines Grundwassermodells. Die geologischen Daten dienen einerseits für den Modellaufbau und andererseits ermöglichen sie die Kalibrierung für diesen langen Zeitraum erst durch die notwendigen Proxy-Daten. Die Schnittstellen zwischen geologischen Daten und dem numerischen Modell sind daher vielfältig.
- Das Modell Untere Mulde/Fuhne (s. Abbildung 6) ist eine Prinzipstudie zur Untersuchung von Schnittstellen und Kopplungsmöglichkeiten zu sehr komplexen geologischen und hydrologischen Modellen. Zudem wurde der Einfluss von Tagebauen auf die Ausbreitung von Stoffen in einem von fluviatilen und glazialen Lockersedimenten geprägten quartären Grundwasserleitersystem näher untersucht. Das Untersuchungsgebiet liegt in Mitteldeutschland (Großregion um Bitterfeld) und ist etwa 320 km² groß. Die Zielsetzung macht einen Modellierungszeitraum von über 150 Jahren erforderlich. Das Modell ist für die Fragestellung der Schnittstellen hydrogeologischer und umweltgeologischer Problemstellungen besonders gut geeignet, weil sehr wesentliche Grundlagen insbesondere in Form hochauflösender geologischer Modelle aber auch umweltgeologischer Untersuchungen bereits vorlagen.

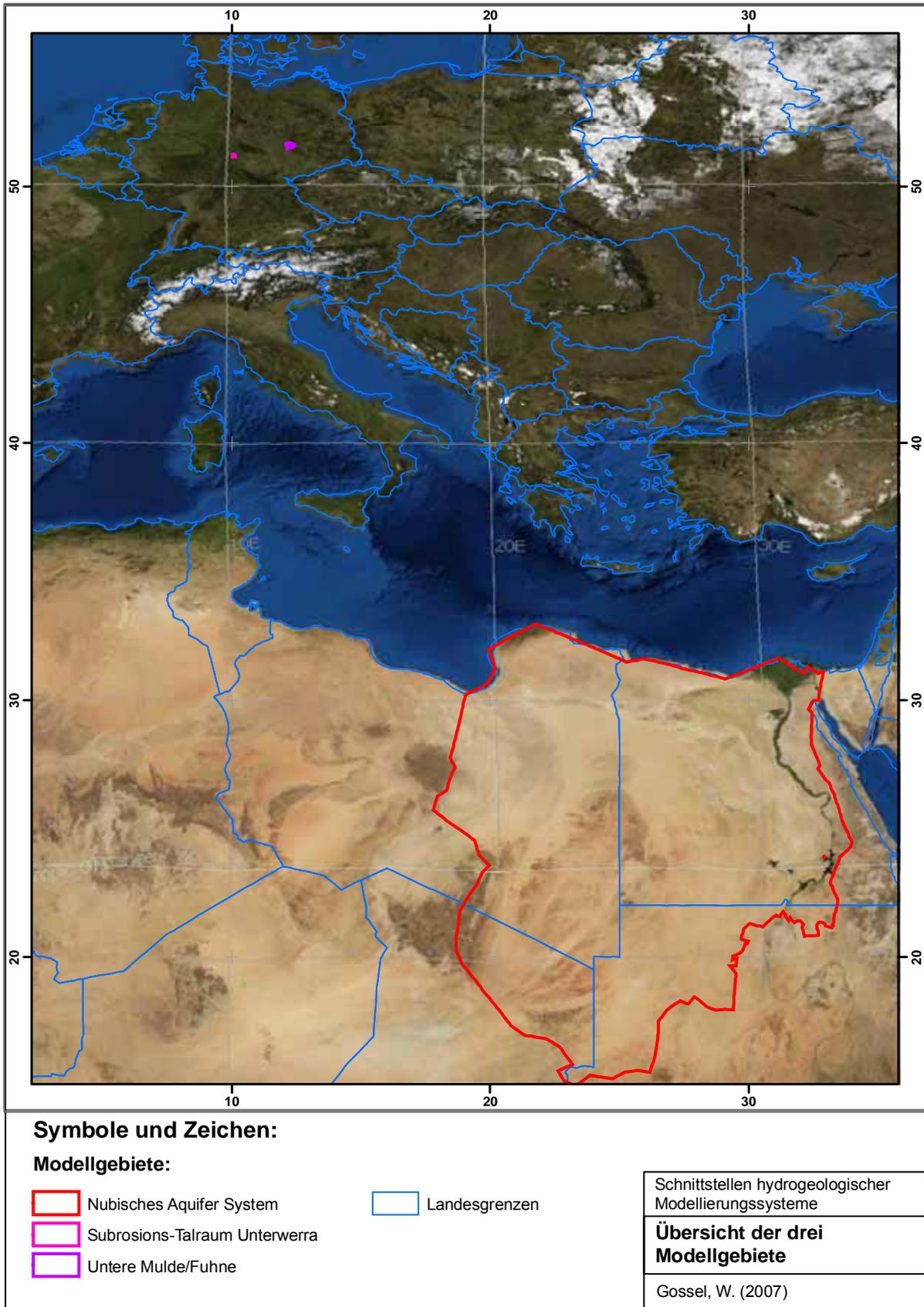


Abbildung 4: Lageübersicht der drei Modellgebiete, die exemplarisch vorgestellt werden, auf der Grundlage des Satellitenbildes (NASA 2007), das Koordinatensystem ist geografisch (WGS 1984) mit Längen- und Breitengradangaben.

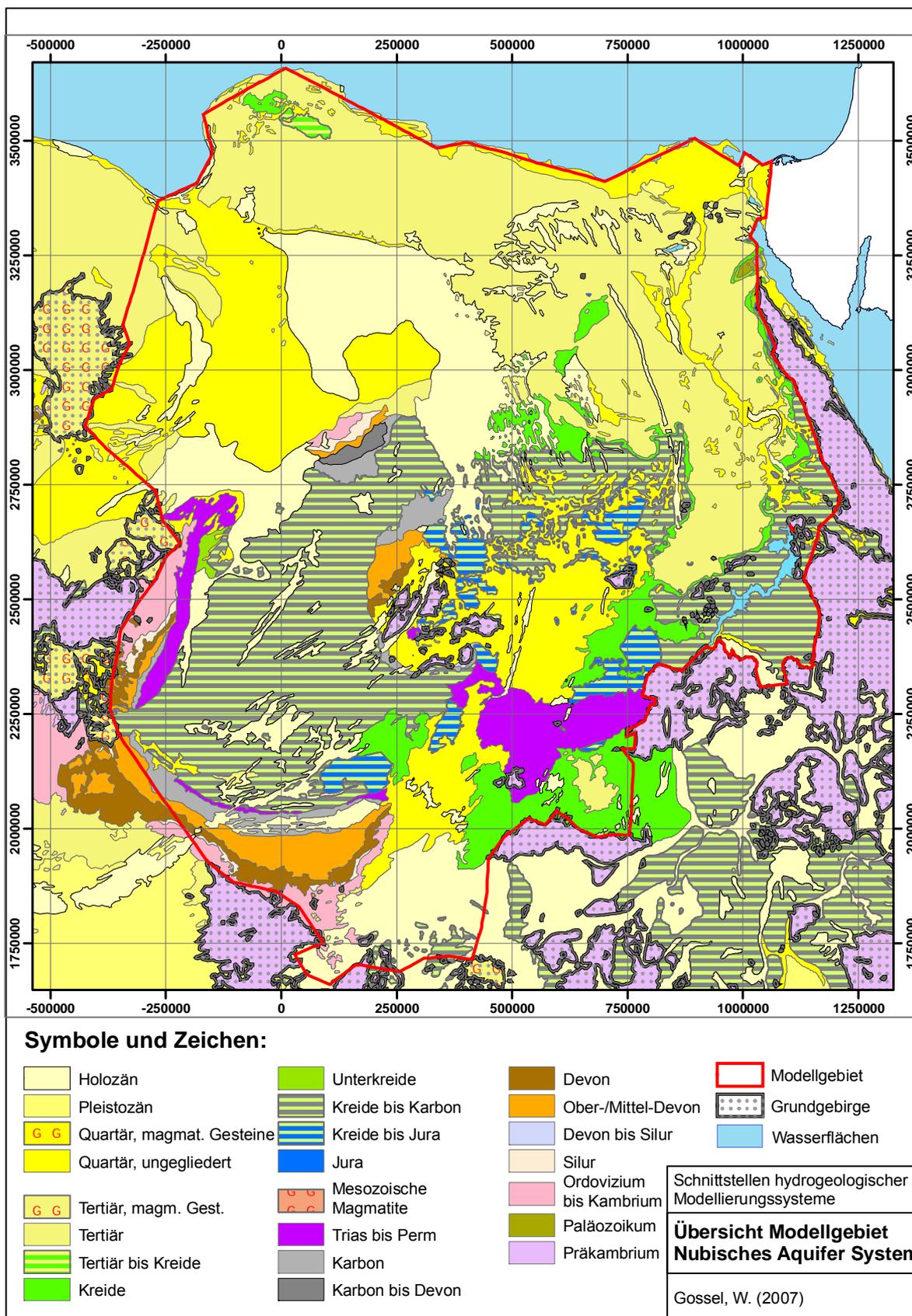


Abbildung 5: Modellgebiet des Nubischen Aquifersystems in der Übersicht. Die Modellgrenzen sind hier weitgehend geologisch durch die Grundgebirgsausbisse definiert. Im Norden ist das Mittelmeer als Randbedingung gewählt worden. Datengrundlage ist die geologische Karte (CONOCO 1987).

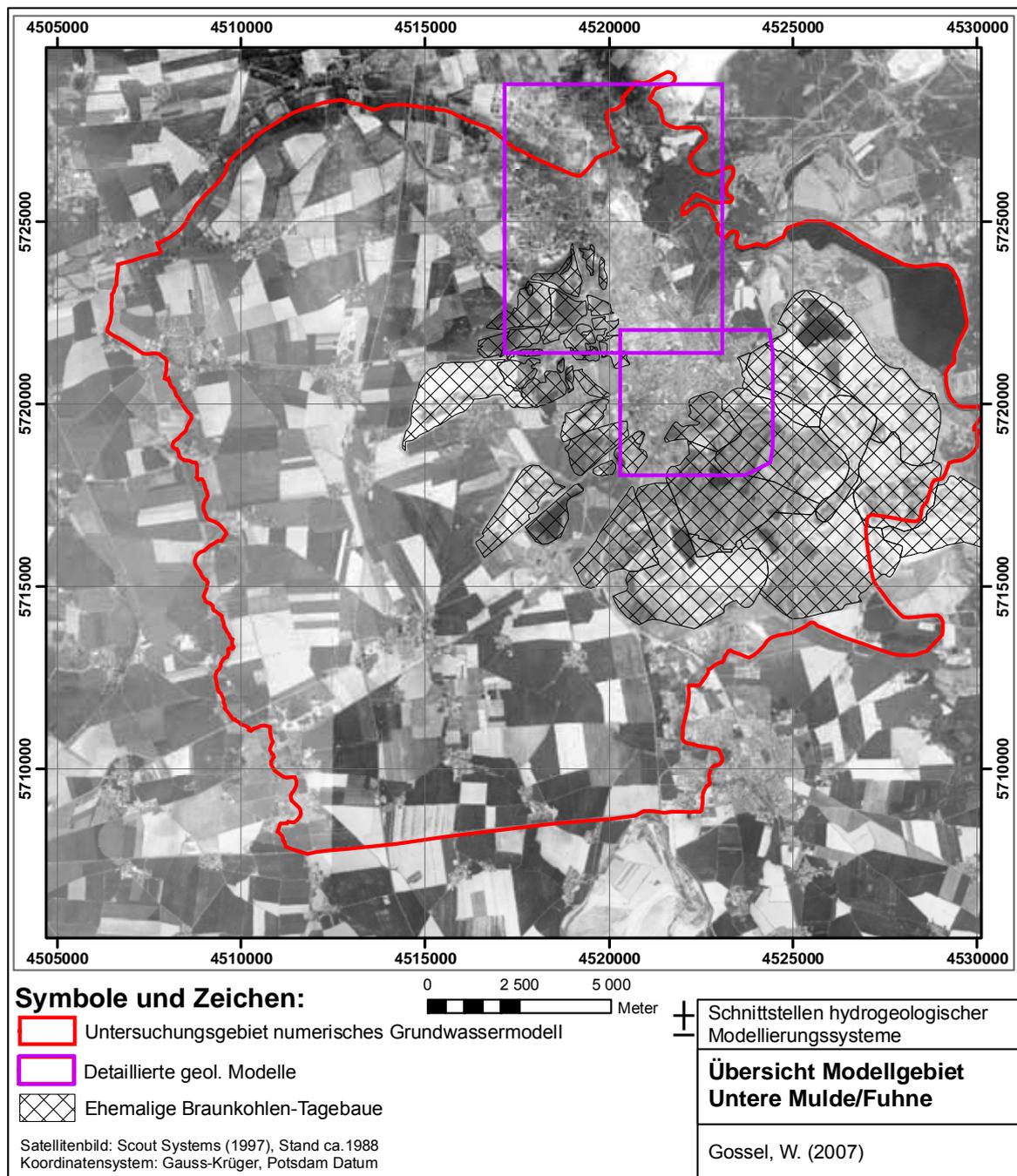


Abbildung 6: Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne in der Übersicht sowie mit den Modellgrenzen, die sich aus den hydrologischen und hydrogeologischen Randbedingungen ergeben. Die Grenzen der geologischen Detailmodelle sind ebenfalls dargestellt. Datengrundlage ist ein Satellitenbild etwa aus dem Jahr 1988 (SCOUT SYSTEMS 1997), das die Ausmaße der Tagebaue in ihrem Endstadium deutlich macht.

Diese Prinzipstudien wurden zwar z.T. mit erheblicher Detaillierung, angepasst an differenzierte Fragestellungen, erstellt. Sie werden aber im Rahmen dieser Arbeit nur für die hier vorgestellten Zwecke genutzt. Ziel bei der Darstellung dieser Beispiele ist weder die Beschreibung eines Modellierungswerkzeugs noch die im engeren Sinne angewandte Ergebnisinterpretation, wie z.B. für Gefährdungsabschätzungen, Expositionsrechnungen, Prognosen für Sanierungsmaßnahmen oder Möglichkeiten weiterer Grundwassergewinnung zur Deckung eines gestiegenen Wasserbedarfs. Hier werden ausschließlich die Unterschiede zwischen der Nutzung verschiedener Modellierungsansätze in systematischer Hinsicht verdeutlicht. Insofern werden weder Ver-

gleiche zwischen Modellierungswerkzeugen noch zwischen konkreten Modellen, die sich alle in laufender Weiterentwicklung befinden, dargestellt, sondern es werden Richtungen zur Weiterentwicklung aufgezeigt und exemplarisch ausgeführt.

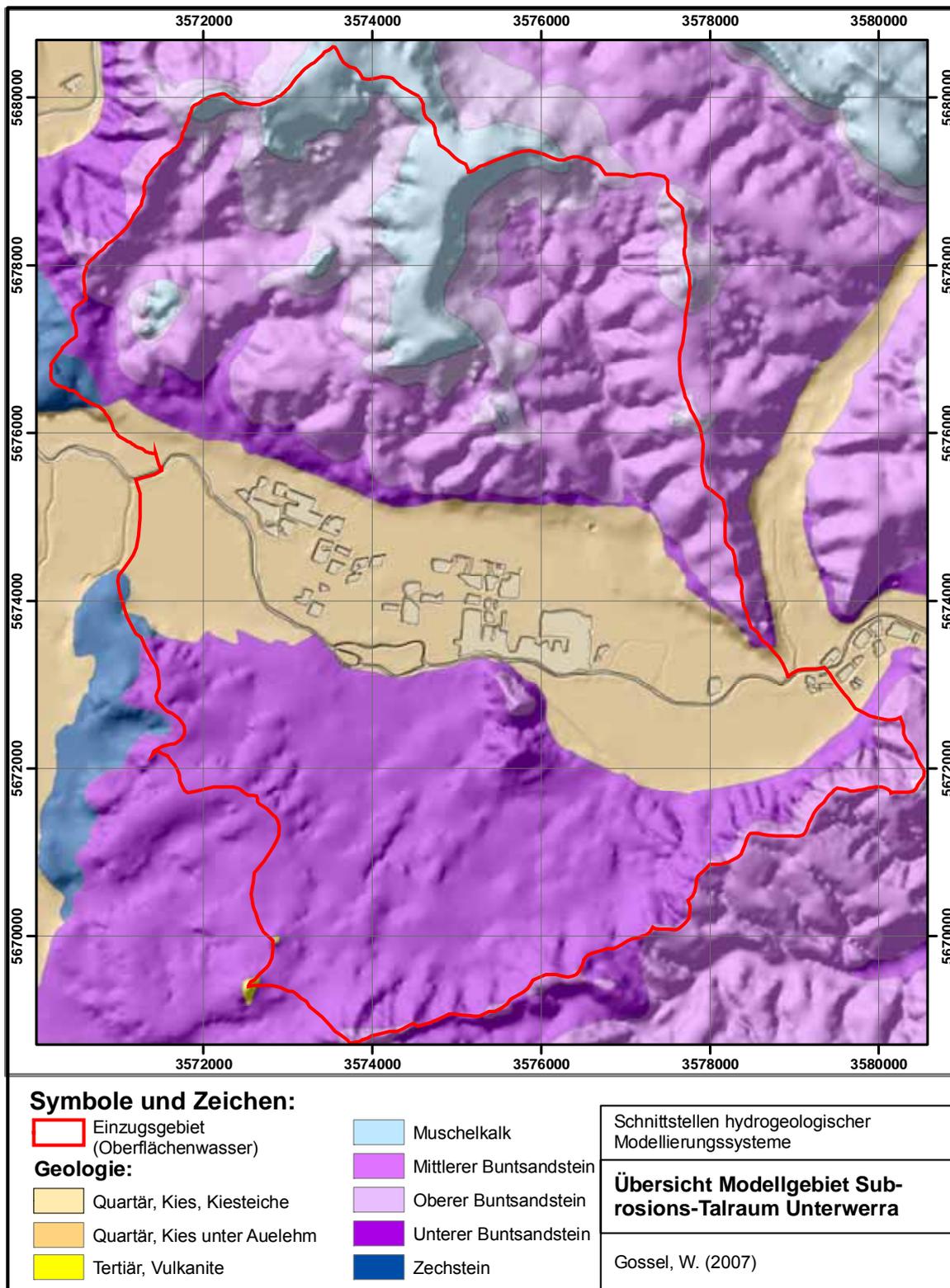


Abbildung 7: Modellgebiet des Subrosions-Talraums Unterwerra mit seinem Einzugsgebiet. Die Modellgrenzen sind durch das oberirdische Einzugsgebiet definiert. Datengrundlage sind das auf der Basis der Höhenlinien (HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1995) und THÜRINGER LANDESVERMESSUNGSAMT (1997)) erstellte digitale Geländemodell in der Schummerungsdarstellung sowie die nach JACOBSHAGEN (1993) digitalisierte geologische Karte.

2 Modellierungskonzept und methodische Konzepte

Für BUCHHOLZ (2001) ist das Modellierungskonzept der zentrale Knotenpunkt der Modellierung, an dem

- Wissen,
- Modellannahmen
- und die Prinzipien der Modellbildung und Theorie

verknüpft werden. Das Modellierungskonzept begleitet demnach den gesamten Modellierungsprozess, und die Möglichkeiten eines Modells sind in dem der Modellbildung zugrunde liegenden Modellierungskonzept verankert. Es folgt dabei nach BUCHHOLZ (2001) einer Reihe von Prinzipien, die einen sehr komplexen Rahmen für den Modellierungsprozess und seine einzelnen Schritte ergeben. Die Einhaltung der Prinzipien kann jedoch kein Maß für die Qualität des Modellierungsprozesses sein, da sich einzelne Prinzipien widersprechen.

Dominanzprinzip: Prinzip der ausschließlichen Berücksichtigung von dominanten Prozessen. Das Dominanzprinzip wird ergänzt durch das **Einfachheitsprinzip**, das das Bestreben nach einer möglichst unkomplizierten Beschreibung wiedergibt.

Erheblichkeitsprinzip: Die wichtigsten zustandsbeschreibenden Parameter und Randbedingungen werden identifiziert. Damit das Dominanzprinzip und das Einfachheitsprinzip möglichst weitgehend erfüllt werden, werden oftmals hydrologische Prozesse in Parametern versteckt. Damit einhergehend werden neben unsauberen Prozessbeschreibungen auch unsaubere Skalierungen generiert.

Das von BUCHHOLZ (2001) **Vertikal-/Horizontal-Prinzip** genannte Vorgehen der Einteilung des Raums in säulenartige Ausschnitte und horizontale „Schichten“ wird zwar in weiten Bereichen sowohl in der Definition der Prozessräume als auch innerhalb der Modellierungssysteme angewendet, verliert aber mit der zunehmend dreidimensionalen Raumgliederung und der Verknüpfung von Modellierungssystemen, die gleichermaßen weitere (hydrologische) Teilprozesse verbindet, an Bedeutung. Dennoch erwachsen aus diesem Prinzip die wesentlichen Anforderungen an die Kopplung von Modellierungssystemen. Mit dem **Topologieprinzip** ist Ähnliches gemeint, wobei sich die Topologie in der Hydrologie nach dem Fließverhalten des Wassers ausrichtet.

Das **Translations-Retentionsprinzip** spielt im Wesentlichen für den internen Aufbau der Modellierungssysteme aus Speichern und Transportstrecken eine Rolle. Hierbei ist ebenfalls das **Linearitätsprinzip**, das die Fokussierung auf Advektionsprozesse ausdrückt, zu beachten.

BRASSEL ET AL. (1999) differenzieren bei den Modellierungskonzepten lediglich in sog. Makrokonzepte, die ähnlich wie die Systeme und Modelle von MEADOWS ET AL. (1972) sehr große, mehrere oder gar alle Volkswirtschaften umfassen, und Mikrokonzepte, die einzelne Volkswirtschaften betrachten. Als Verbindung zwischen beiden Konzepten dient das Mehrebenen-Konzept.

Als **methodische Konzepte** werden hier grundlegende Strukturen der Modellierungswerkzeuge verstanden. Zwei methodische Konzepte sind dabei anhand der zeitlichen Komponenten ihrer Methoden zu unterscheiden:

Statische Konzepte werden für weitgehend zeitinvariante und damit raumorientierte Modellierungsziele genutzt. Einige der sehr vielfältigen Beispiele hierfür sind geologi-

sche 3D-Modelle, wie in WYCISK ET AL. (2002) und WYCISK ET AL. (2003) beschrieben, sowie die meisten umweltgeologischen Modellierungen, morphologische Modelle (Geländemodelle) und Landschaftsmodelle.

Dynamische Konzepte fokussieren auf stark zeitabhängige Modellierungsziele, wie z.B. den Transport von Stoffen in Atmosphäre, Boden und Grundwasser, die Auswirkungen von Hochwasser oder die Entwicklung von Grundwasserressourcen. Der kategorischen Aussage von BLUMENSTEIN ET AL. (2000), geowissenschaftliche Modelle seien immer dynamisch, kann hier nicht gefolgt werden. Andererseits müssen bei den dynamischen Modellen stationäre Modelle (Gleichgewichtsmodelle) und instationäre Modelle unterschieden werden, wie es BLUMENSTEIN ET AL. (2000) für den Bereich der Geoökologie und beispielsweise KINZELBACH (1986) für den Bereich der Grundwassermodellierung beschreiben.

Anders als die statischen Konzepte, die Zeitaspekte nur in Ausnahmefällen berücksichtigen können, ist bei dynamischen Konzepten der räumliche Aspekt sehr häufig mit zu verarbeiten.

Beide methodischen Konzepte treffen sich im Bereich der Hydrogeologie und Umweltgeologie und haben ihre eigenen, spezifischen Anforderungen und Realisierungswege. Hydro- und Umweltgeologie bilden damit eine wesentliche Verbindung zwischen statischen und dynamischen Modellierungskonzepten, was insbesondere in Kapitel 3 näher dargestellt wird.

Die mit Hilfe statischer Konzepte erstellten Modelle dienen oft als Lieferanten für räumliche Grundlageninformationen der dynamischen Modelle. Hierbei werden sie oft in vereinfachter Weise implementiert, wobei die Definition der Schnittstellen zwischen beiden besonders wichtig ist.

Die Entwicklungslinien der Umsetzung der methodischen Konzepte waren zunächst völlig unterschiedlich:

Statische räumliche Modelle wurden im Landschaftsbau, Maschinenbau und der Architektur entwickelt und sehr stark verfeinert. Die Übernahme der bereits fertigen digitalen Verfahren in die geologische Modellierung erfolgte seit Mitte der 1980er Jahre. Einige der ersten Werkzeuge stammen von Geographischen Informationssystemen (GIS) ab, andere wurden aus CAD-Applikationen entwickelt. In der Lagerstättenexploration wurden ebenfalls im geologischen Umfeld statische Entwicklungswerkzeuge implementiert, die den besonderen geologischen Anforderungen gerecht wurden.

Dynamische Modelle wurden bereits in den 1970er Jahren computergestützt implementiert, z.B. in MEADOWS ET AL. (1972). Sie waren zunächst eindimensional. Im Bereich der Hydrogeologie wurden aber bereits in den 1980er Jahren Modelle mit Berücksichtigung räumlicher (2D-Informationen) erstellt (LUCKNER & SCHESTAKOW 1986, KINZELBACH 1986, DIERSCH 1984).

Beiden methodischen Konzepten ist gemeinsam, dass sie, mit wenigen Ausnahmen, die kaum praktisch nutzbar sind, statistische und deterministische bzw. physikalische Methoden nutzen. Die Anteile variieren in den einzelnen Systemen, weshalb eine Klassifizierung in diese beiden Endpunkte einer fast kontinuierlichen Reihe, wie sie von BOSSEL (1994) vorgenommen wurde, kaum praktikabel ist.

Die beiden methodischen Konzepte unterscheiden sich nicht nur in der Fokussierung auf die jeweilige(n) Dimension(en), sondern übertragen den jeweiligen Fokus auch auf die Abgrenzung und die Skalen der erstellten Modelle: Statische Modelle sind

meist kleinräumig und räumlich hoch auflösend (Ausnahme bilden Reservoirmodelle der Lagerstättenkunde), während die dynamischen Modelle oft die integrierende Betrachtung größerer Räume und eine zeitlich hohe Auflösung liefern (Ausnahme bilden hier die globalen Klimamodelle, GCM). Das Kapitel gliedert sich auf dieser Grundlage entsprechend Abbildung 8:

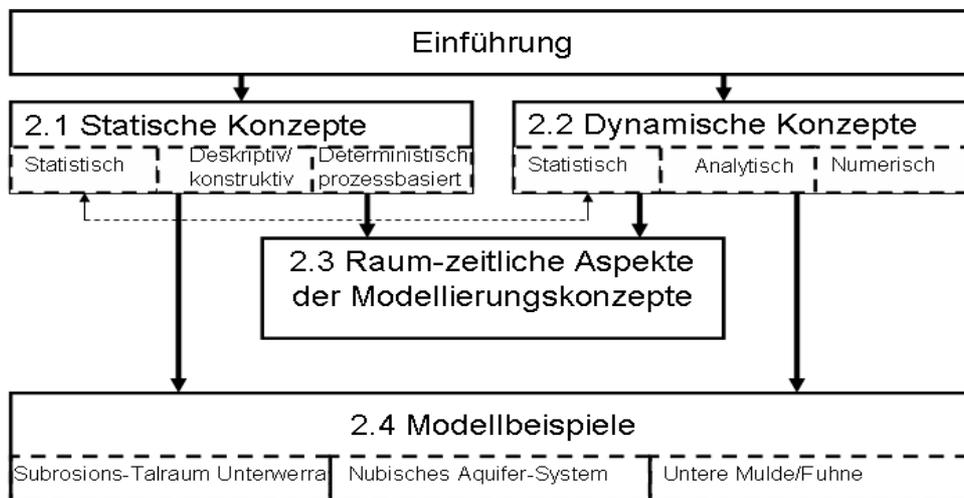


Abbildung 8: Grafische Übersicht des Kapitels 2. Zur besseren Orientierung ist diese Grafik in den folgenden Unterkapiteln als Miniatur vorangestellt.

Bei der zu berücksichtigenden Datenbasis unterscheiden sich die Modellierungsmethoden erheblich:

Alle statistischen Modellierungssysteme bauen zunächst ausschließlich auf sog. „harten“ Daten – hier Messwerten – auf und können daraus verschiedene gleich wahrscheinliche Modelle (Realisierungen) erzeugen. Die eingesetzten Methoden sind alle nicht eindeutig. Die verschiedenen Ebenen statistischer Auswertung sind detailliert in BLÖSCHL (1996) beschrieben. Lediglich durch Ergänzungen der Datenbasis um begründet vermutete, „weiche“ Daten, die allerdings den Status von „harten“ Daten bekommen, können auch zusätzlich geologische Kenntnisse in die Modellierung mit einfließen. Im Vergleich dazu sind die Methoden zur Generierung der Ergebnisse sehr unspezifisch. Sie können auf eine Vielzahl sehr unterschiedlicher raum-zeitlicher Ausgangsdaten angewendet werden.

In deskriptiven Modellierungssystemen werden mit Hilfe meist konstruktiver Methoden, die zusätzlich auch „weiche“ Daten berücksichtigen, Einschränkungen der statistischen Modellrealisationen vorgenommen. So können z.B. Kenntnisse über Rinnenverläufe in der Geologie oder andere deskriptive Gesetzmäßigkeiten zusätzlich genutzt werden. Auch die konstruktiven bzw. deskriptiven Methoden sind nicht eindeutig. Es sind durchaus noch – theoretisch unendlich viele – verschiedene Realisationen möglich.

Deterministische bzw. Prozess-Modellierungssysteme nutzen analytische und numerische Methoden zum Aufbau von Modellen, die weniger auf der Interpretation von Messdaten als auf der Erkenntnis über physikalische, deterministische Gesetzmäßigkeiten beruhen. Deterministische Verfahren sind eindeutige Verfahren, d.h. aus einem gegebenen Satz von Einflussgrößen wird durch die deterministische Methode genau ein Satz von Zielgrößen erzeugt.

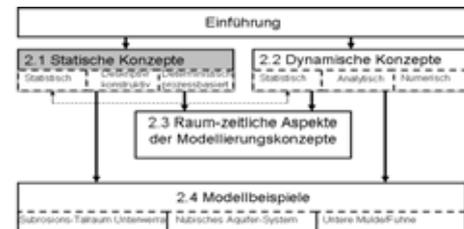
Zur Nutzung numerischer Methoden müssen oftmals alle drei vorgenannten Methoden gemischt werden, um ein funktionsfähiges Modell zu erstellen: Die Datengrund-

lage, die meist mit statistischen und/oder konstruktiven Methoden erzeugt werden muss, weil die modellrelevanten Daten meist nicht in der erforderlichen Auflösung als Messdaten zur Verfügung stehen, wird mit physikalischen und deterministischen Gesetzmäßigkeiten verknüpft.

2.1 Statische methodische Konzepte und Methoden in der Hydrogeologie

Statische Konzepte, statische Systeme und statische Werkzeuge sind im Bereich der Modellierung sehr weit verbreitet:

- Architektur: Nachbildung von Gebäuden.
- Ingenieurwissenschaften: Berechnung der Statik von Gebäuden, Darstellung und Berechnung von Werkzeugen, Fahrzeugen usw.
- Landschaftsplanung: Modellierung der gestalterischen Elemente.
- Mathematisch-statistische Modelle: Die z.B. in der Lagerstättenkunde entwickelten statistischen und insbesondere auch geostatistischen Verfahren und die mit ihnen aufgebauten Modelle sind zwar zur Vorbereitung dynamischer Modelle oft sehr wichtig, aber diese Modelle betrachten dynamische Prozesse mit statischen Methoden.
- Umweltgeologische Bewertung: Bewertungsmodelle, die mit Hilfe von räumlichen Analysen die von VAN BERNEM (2001) aufgezeigten Sensitivitäts-, Risiko- und Gefährdungsuntersuchungen ermöglichen.



Ziel von statischen Modellierungen sind insbesondere strukturelle und datenanalytische Fragestellungen. Einige Beispiele aus dem hydro- und umweltgeologischen Kontext:

- Die dreidimensionale Verbreitung von Grundwasserleitern und –geringleitern einschließlich räumlicher Parameterverteilungen.
- Die Analyse potentieller Fließwege im Grundwasser.
- Die Berechnung der Grundwasserneubildung auf der Grundlage von Boden-, Landnutzungs-, Grundwasserflurabstands- und Klimadaten.
- Die Berechnung der Grundwassergeschütztetheit oder –gefährdung aufgrund einer Vielzahl hydrogeologischer, pedologischer und landnutzungsspezifischer Daten.
- Statische Expositionsbewertungen bei Altlasten und flächenhaften Stoffeinträgen.

Trotz der Vielzahl der Einsatzmöglichkeiten statischer Modelle stehen in der Hydrogeologie meist dynamische Prozesse im Mittelpunkt der Fragen. Daher sind hier statische methodische Konzepte zunächst nicht im Fokus der Modellentwicklung, sondern werden für die Erstellung des geologischen Modells und des Strukturmodells gebraucht.

Allen statischen und raumbezogenen Modellen ist gemeinsam, dass ihre Ergebnisse in einer diskretisierten, d.h. nicht oder nur quasi-kontinuierlichen Form vorliegen. Hierbei werden bevorzugt regelmäßige Gitter (GRIDs) genutzt. Die Möglichkeit der Verarbeitung in Form unregelmäßiger Dreiecksnetze ist jedoch ebenfalls gegeben.

In groben Zügen können drei Entwicklungslinien statischer räumlicher Modellierungsmethoden unterschieden werden, zwischen denen es bei der Implementation in Form von Modellierungswerkzeugen jedoch fließende Übergänge gibt:

- statistische Methoden,
- konstruktive bzw. deskriptive Methoden und
- deterministische bzw. prozessbasierte Methoden.

Die Auswahl einer Methode reflektiert gleichzeitig die Sichtweise des Bearbeiters bei der Abgrenzung der modellierten Teilkörper:

Die Grundlage aller statistischen Methoden ist, dass sie auf der Basis ein und desselben Eingangsdatensatzes eine Vielzahl gleich wahrscheinlicher Realisierungen erzeugen können. Hierbei können entweder weitgehend kontinuierliche Übergänge zwischen Teilkörpern präferiert werden, z.B. durch räumliche Analysen und geostatistische Interpolationen, oder die vollständige Heterogenität der gesamten Datengrundlage als Maß für die Heterogenität der Realisation zugrunde gelegt werden.

Konstruktive Methoden schränken die statistischen Realisationsmöglichkeiten aufgrund zusätzlicher Informationen ein. Diese zusätzlichen Informationen sind keine harten Daten, denn diese wurden bereits in den statistischen Methoden genutzt, sondern Erkenntnisse über Gesetzmäßigkeiten, wie z.B. in der Geologie Analogieschlüsse, genetische, geometrische oder räumliche Zusammenhänge. Auch Proxy-Daten, die auf die eigentlichen Eingangsgrößen schließen lassen, können genutzt werden, ohne eine direkte Funktion zwischen Proxy-Daten und Eingangsgröße definieren zu müssen. Konstruktive Methoden bewirken in geologischen Modellen zunächst eine scharfe Abgrenzung von Teilkörpern, die nachträglich durch eine statistische Parameterverteilung wieder relativiert werden kann.

Prozessbasierte, deterministische Methoden sind sehr vielfältig und umfassen analytische und numerische Methoden. Sie werden zur Entwicklung statischer Modelle bisher sehr selten eingesetzt, da sie meist dynamische Grunddaten voraussetzen und dynamische Prozesse abbilden.

Die statistischen Methoden basieren auf deskriptiven Grunddaten und versuchen, über verschiedene Interpolationsmethoden eine zumindest 2,5D-Verteilung zu erzeugen. Auch die Ergebnisse sind vornehmlich deskriptiv. Die Entwicklung der eingesetzten statistischen Verfahren vollzog sich von den einfach räumlich interpolierenden Verfahren (Thiessen-Polygone bzw. Nearest Neighbor-Verfahren, Gewichtete Räumliche Mittel bzw. Inverse Distance Weighted Verfahren und Dreiecksinterpolation bzw. Triangular Irregular Network) zu geostatistischen Verfahren mit einer vorgeschalteten Dateninterpretation bzw. -analyse, wie z.B. Kriging und Konditionale Simulation. Letztere Verfahren sind daher ansatzweise bereits interpretativ zu nennen.

KOLTERMANN & GORELICK (1996) tragen in ihrem Übersichtsartikel eine Fülle von Beispielen der Ausführung verschiedener Modellierungsmethoden für die als hydrogeologisches Strukturmodell bezeichneten räumlichen Verteilungen der Grenzflächen sowie der Parameter hydraulische Durchlässigkeit und Porosität (in einigen Fällen auch effektive Porosität) von numerischen Grundwasserströmungsmodellen zusammen.

Deskriptive und konstruktive Methoden werden insbesondere für die Entwicklung geologischer Modelle genutzt. Hierfür ist eine präzise Stratifizierung der Eingangsdaten (Bohrdaten, geologische Karten, ggf. geophysikalischer Daten) notwendig, um daraus ein Modell geometrisch exakt voneinander getrennter geologischer Körper zu

erstellen. Konstruktive Methoden nutzen daher schon bei den Datengrundlagen Interpretationen. Auch die anschließenden Modellierungsverfahren sind sehr viel stärker interpretativ als die statistischen Verfahren. Als deskriptiv sind jedoch auch hydrogeologische Modelle zu bezeichnen, die lediglich konzeptionellen Charakter haben, wie z.B. in FH-DGG (1999) beschrieben.

Prozessbasierte Methoden werden insbesondere für genetische Fragestellungen genutzt. Daher ist ihr Einsatzbereich bisher eng begrenzt. Neben der Lagerstätten erkundung sind aber auch umweltgeologische Fragestellungen denkbar. Prozessbasierte Methoden sind bereits bei den Eingangsdaten neben der Interpretation auch auf weitergehende, von einem Prozessverständnis getragene Kenntnisse angewiesen.

Da statischen Modellierungskonzepten die Zeitkomponente fehlt, ist die Möglichkeit prognostischer Aussagen per Definitionem zunächst ausgeschlossen. Die Realisationen (Modelle) zeigen jedoch mögliche Entwicklungen auf, so z.B. die Möglichkeiten von Wasserwegsamkeiten zwischen Grundwasserleitern.

In den folgenden Kapiteln wird der Fokus auf geologische, hydro- und umweltgeologische sowie hydrologische Fragestellungen und Beispiele eingeschränkt.

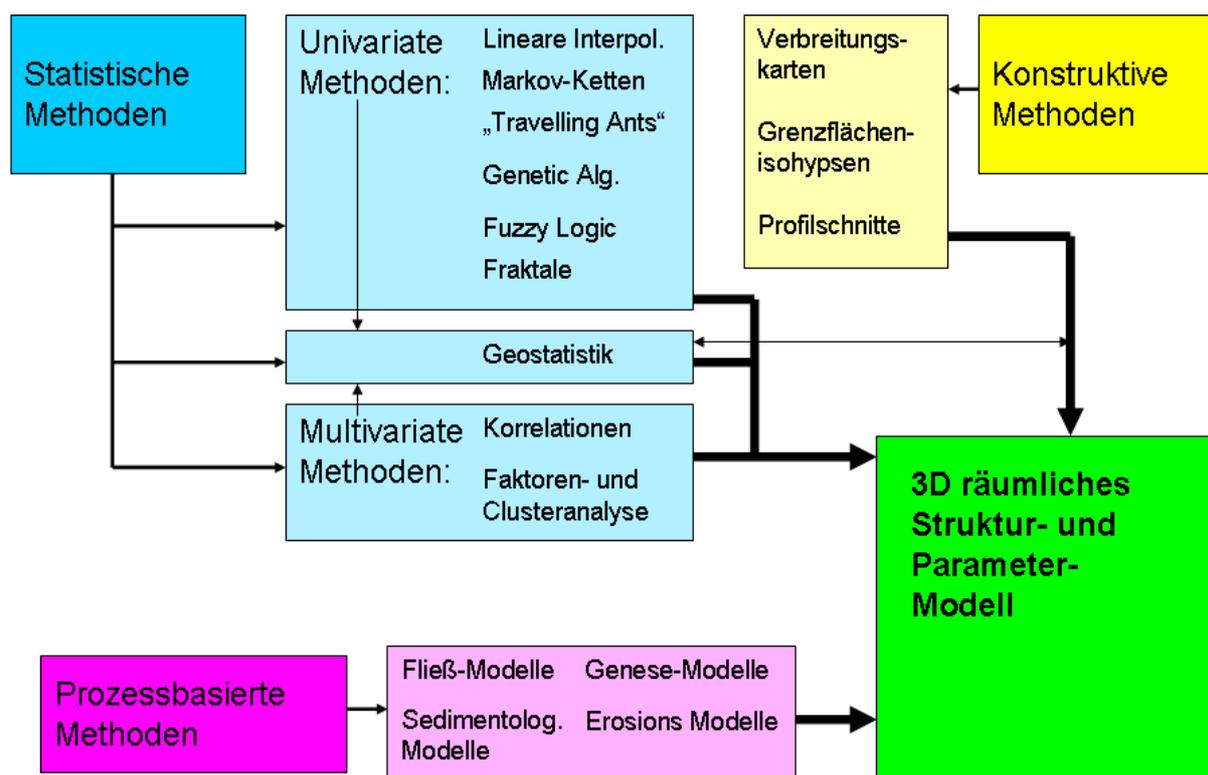


Abbildung 9: Statistische, konstruktive und prozessbasierte Methoden in der statischen Modellierung.

2.1.1 Statistische Methoden

Bei den statistischen Methoden sind zunächst univariate und multivariate Verfahren zu unterscheiden: Während die ersteren sich auf die Schätzung eines Parameters im Raum konzentrieren, geht es bei den multivariaten Verfahren darum, statistische Abhängigkeiten zu identifizieren und dies für die Verteilungsberechnung zu nutzen. Uni- und multivariate Verfahren, die nicht zur räumlichen Interpolation genutzt werden

können (z.B. Berechnungen statistischer Kennwerte wie verschiedene Mittelwerte, Schiefen, aber auch Faktoren- und Clusteranalysen) werden hier nicht weiter betrachtet.

Räumlich-statistische Methoden sind zunächst auf die Erstellung von 2.5D-Oberflächen ausgerichtet worden. Durch Verknüpfungen von Grenzflächen und Schließung der Körper können dann 3D-Körper erstellt werden, die wesentlich weiter gehende Auswertungen zulassen als die Oberflächen.

Interessant ist die Fragestellung, wie bei der Berechnung von Verteilungen innerhalb dieser 3D-Körper vorgegangen wird, wenn also auf der Grundlage der 3D-räumlichen Struktur Parameterverteilungen (multidimensional) berechnet werden. Die Beschreibung der Abhängigkeiten mehrerer Variablen voneinander ist zwar beispielsweise durch die Cokriging-Verfahren, wie in WACKERNAGEL (1995) ausgeführt, vorhanden, die bisherigen praktischen Anwendungen sind jedoch auf 2.5D-Fälle beschränkt.

Datengrundlage geologischer statistischer Modelle sind zunächst, wie bei den in Kapitel 2.1.2 behandelten konstruktiven Methoden, Bohrinformationen. Die Implementation von Expertenwissen ist nur sehr bedingt, z.B. durch virtuelle Bohrpunkte, möglich.

Methodisch werden sowohl für die Interpolation geologischer Strukturen als auch für Interpolationen von Parametern weitgehend geostatistische Methoden eingesetzt. Sie bieten vor der eigentlichen Interpolation die Möglichkeit einer weit über die nicht räumliche Statistik hinausgehenden Datenanalyse mittels Variogrammetrie. Diese ermöglicht auch das Einbringen von Kenntnissen des Bearbeiters. So beschreiben DAVIS (1986), DEUTSCH & JOURNEL (1992), SCHAFMEISTER-SPIERLING (1990), SCHAFMEISTER (1998) und SCHAFMEISTER (1999) Methoden, z.B. für Teilgebiete getrennte Variogrammodelle zu nutzen. Anschließend müssen die Interpolationsergebnisse zusammengesetzt werden.

Neben der Geostatistik sind eine Reihe weiterer methodischer Ansätze entwickelt worden, die jedoch aus verschiedenen Gründen selten genutzt werden:

- Markov-Ketten wurden von LUO (1993) für ein- und zweidimensionale Interpolationen von Bohrprofilen und zur Schätzung von Erzgehalten in der Lagerstättenkunde genutzt und können prinzipiell auch für die Interpolation von hydrogeologischen Parametern genutzt werden.
- Fraktale werden in der Hydrologie zunehmend eingesetzt (KORVIN (1992), BLÖSCHL 1996). In der Hydrogeologie sind die Ansätze für die Generierung statischer Modelle mit dieser Methode leider noch nicht sehr verbreitet. DIMRI (2005) zeigt jedoch eine Reihe Anwendungen aus der Geophysik, die auch für die Erstellung hydrogeologischer Modelle, insbesondere für Parameterverteilungen, genutzt werden können. KORVIN (1992) zeigt Beispiele für die Berechnung von Permeabilitäten von Festgesteinen auf, die durch fraktale Verteilungen von Tonmineralen bestimmt werden. HECHT (2004) beschreibt die Anwendung von Fraktalen auf die Korngrößenverteilungen und Störungsmuster, die im Bereich der Festgesteine auch hydrogeologisch von Bedeutung sind.
- Genetic Algorithms (DAVIS 1991) und Simulated Annealing sind weitere Erfolg versprechende Methoden zur Generierung geologischer Strukturen, die allerdings über vereinzelte Experimente nicht hinausgekommen sind, obwohl sie in anderen Wissenschaftsbereichen bereits seit langem etabliert sind.

- Mit Fuzzy Logik können ebenfalls Modellstrukturen aufgebaut werden. NORDLUND (1999) zeigt auf, wie für den Bereich der Lagerstätten erkundung großräumige sedimentologische Modelle aufgebaut werden können.
- Die Algorithmen der „Travelling Ants“-Methode (DORIGO & GAMBARDELLA 1997) wurden bisher noch nicht auf geologische Fragestellungen angewendet, obwohl ihr Einsatz vielversprechend ist, da sie bereits erfolgreich in der Geographie genutzt werden.

Methodenvergleiche wurden bisher vornehmlich für geostatistische Verfahren vorgenommen, z.B. von SCHAFMEISTER-SPIERLING (1990), HEINRICH (1992), KOLTERMANN & GORELICK (1996), wären aber sicher auch für die anderen statistischen Verfahren nützlich.

2.1.2 Deskriptive und konstruktive Methoden

Die konstruktiven Methoden zur räumlichen geologischen Modellierung stützen sich im Wesentlichen auf die klassischen Verfahren der Konstruktion von vertikal-ebenen Profilschnitten und horizont-orientierten Verbreitungskarten und sind damit deskriptiv zu nennen. Hierbei können nicht nur stratigrafische und lithologische Kenntnisse, sondern auch fazielle und genetische Konzepte einfließen und damit eine Verdichtung von Informationen durch das Wissen des Bearbeiters bewirken. Die grundlegenden Methoden der Anwendung im geologischen Bereich sind sehr ausführlich, beispielsweise in GROSHONG (1999), dargestellt. Die Umsetzung dieser Methoden mit Hilfe der EDV, die in WYCISK ET AL. (2002), BECKER-HAUMANN (2005) und SOBISCH (2000) beschrieben ist, erzeugt eine Datenmenge, die mit einfachen statistischen Methoden (Triangulation) zu flächendeckenden Grenzflächen verarbeitet werden kann.

Während die statistischen Methoden sich gerade im Bereich der Geostatistik in den letzten Jahrzehnten sehr schnell entwickelt haben, kommen die konstruktiven Methoden nahezu ohne Veränderungen der Arbeitsweise aus.

Bei Änderungen der Datenbasis sind konstruktive Methoden gegenüber statistischen Methoden oft im Nachteil, da möglicherweise zusätzliche Profilschnitte angelegt werden müssen und dann der gesamte Modellierungsprozess in wesentlichen Teilen neu durchgeführt werden muss, was bei diesen Methoden wesentlich umfangreicher ist als bei (geo)statistischen Methoden.

2.1.3 Deterministische bzw. prozessbasierte Methoden

Prozessbasierte Methoden zur Entwicklung statischer Modelle sind insbesondere in der Sedimentologie sehr weit verbreitet. Sie stehen rein methodisch zwischen den rein statischen Modellierungskonzepten und den dynamischen Konzepten, da sie für die Erstellung der fertigen statischen Modelle eine Reihe dynamischer Prozesse berechnen. HSÜ (1989) trägt bereits grundlegende Berechnungsmethoden zusammen, LEE & HARBAUGH (1991), MARTINEZ (1991), WENDEBOURG & ULMER (1991), TIPPER (1991) und CSIRO (2004) stellen Computerprogramme bzw. Programmmodule vor, die insbesondere klastische fluviatile und klastische sowie chemoklastische und organisch-klastische marine Sedimentationsszenarien beschreiben. Auch für die Modellierung von magmatischen Vorgängen wurden neben den Diagrammen zu Mineralparagenesen usw. bereits konkrete Methoden entwickelt (GUGLIELMO 1991).

BRÄUER (2002) zeigt, wie turbulente hydrodynamische Fließprozesse durch Fraktale abgebildet werden können, womit auch die mit den Fließprozessen verbundenen

Sedimentationsprozesse und damit auch Verteilungen der hydrogeologischen Parameter in fluviatil geprägten Schichten besser verstanden werden können. Die Berechnung von Fraktalen als eigentlich statistische Methode nutzt zusätzlich zu rein statistischen Größen dabei auch Größen, die aus den sedimentologischen Prozessen abgeleitet werden.

MUIR WOOD (2004) führt eine Reihe insbesondere geotechnischer und ingenieurgeologischer Parameterverteilungen durch empirische Modelle auf geologische Prozesse zurück. Auch diese, weitgehend auf in situ Messungen oder Labormessungen der Gesteinsparameter beruhenden Modelle basieren jedoch nicht auf der geologischen Genese des Gesteins, sondern eher auf einigen wenigen Grundannahmen über Parameterverteilungen.

ADAM (2003) geht in der Analyse von Verteilungen („patterns“) wesentlich weiter. Er beschreibt die Prozesse, die zu diesen Verteilungen führen, mit mathematisch-physikalischen Grundlagen. Leider sind seine Beispiele für die Hydrogeologie nur in Ausnahmen und in bestimmten Bereichen interessant. Aber die Grundintention, natürliche Verteilungen durch mathematische Beschreibung der zugrunde liegenden Prozesse zu erklären, ist ein sehr wesentlicher Anstoß für weitergehende geologische und auch hydrogeologische Untersuchungen, da hierdurch die reine statistische oder konstruktive Auswertung mit zusätzlichem geologischem Wissen erweitert werden kann.

Geologische Prozesse sind häufig erstens irreversibel und zweitens sehr langfristig. Zudem gibt es sehr diskontinuierlich ablaufende Prozessanteile. Dadurch sind viele Prozesse nicht experimentell fassbar. Die prozessbasierten Beschreibungen von Parameterverteilungen sind daher und auch aus systematisch-theoretischen Gründen nicht einfach zu entwickeln und zu beschreiben. Konzeptionelle Modelle helfen hier zunächst weiter, sind aber nur ein erster Schritt.

Bodenerosions- und –sedimentations-Modellierungen, wie sie mit Hilfe der Universal Soil Loss Equation (USLE) (WISCHMEIER & SMITH 1978) durchgeführt werden können, dienen derzeit nur zur Berechnung von Bodenabtrag, könnten aber auch zur Berechnung räumlicher Verteilungen hydrogeologischer Parameter in Sedimentgesteinen weiterentwickelt werden. Teilweise wurden diese Modellierungsmethoden bereits in fertige GIS-Applikationen oder als Module in GIS-Werkzeuge integriert.

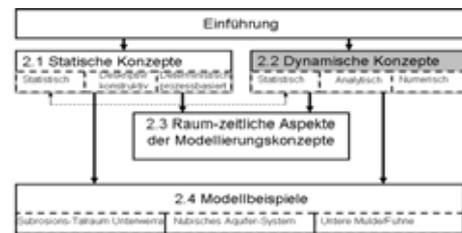
In der Hydrogeologie können stationäre numerische Grundwassermodelle als Grenzfall zwischen dynamischen Modellen und statischen Modellen angesehen werden. Sie sind prozessbasiert, benötigen allerdings für die Belegung mit Strukturen, Parametern und Randbedingungen meist auch statische und konstruktive Methoden. Ihre Grundlage sind zunächst Strömungsnetze, aus denen dann vollständige Strömungsmodelle erzeugt werden.

In der Hydrochemie spielen die Modellierungssysteme für Gleichgewichtsreaktionen eine ähnliche Rolle. Auch sie stellen einen Spezialfall dynamischer Modelle dar.

Für die Nutzung prozessbasierter Methoden ist die Frage entscheidend, welche Prozesse in welchen Skalenbereichen berücksichtigt werden sollen. Den betrachteten Prozessen werden daher sinnvollerweise charakteristische Skalenbereiche zugeordnet.

2.2 Dynamische methodische Konzepte und Methoden in der Hydrogeologie

Dynamische methodische Konzepte wurden bereits sehr früh bei der Modellierung in der Hydrogeologie eingesetzt. Ihre Lösung beruhte zunächst auf analytischen Methoden, wie z.B. bei der Auswertung von Pumpversuchen. Letztlich ist auch der Darcy-Versuch eine dynamische, wenn auch meist stationär durchgeführte Methode.



Auch bei den dynamischen methodischen Konzepten ist eine Einteilung entsprechend der in ihnen eingesetzten Methoden möglich:

- Statistische Methoden vernachlässigen oft die prozessualen Strukturen und geben nur statistische Zusammenhänge wieder. Hier sind insbesondere Zeitreihenanalysen (Trend-, Periodizitäts- und Autokorrelationsanalysen), Korrelationsanalysen und Faktoren- und Clusteranalysen zu nennen, die auch Hinweise auf Prozesse geben, wie in GOSSEL (1999) für Prozesse der Grundwasserneubildung und der Verbindung Grundwasser-Oberflächenwasser gezeigt wurde. Besondere Bedeutung haben statistische Verfahren in der hydrologischen Einzugsgebietsmodellierung (z.B. DYCK ET AL. (1980b)).
- Analytische Methoden sind ein klassisches Arbeitsgebiet der Hydrogeologie im Bereich der Bestimmung von Aquiferparametern, z.B. durch Pump-, Auffüll- oder Slug & Bail-Versuche.
- Bei der Grundwassermodellierung haben sich numerische Verfahren bereits seit etwa 10 bis 15 Jahren durchgesetzt.

Gerade die statistischen Methoden sind nicht nur in statischen und dynamischen methodischen Konzepten vertreten, sondern sie nehmen auch von den Methoden selbst eine Mischstellung ein. In dynamischen Konzepten sind sie eher statisch in der Auswertemethode (z.B. Korrelationsanalyse). Die meisten statistischen Methoden können sowohl in statischen Konzepten wie auch in dynamischen Konzepten eingesetzt werden.

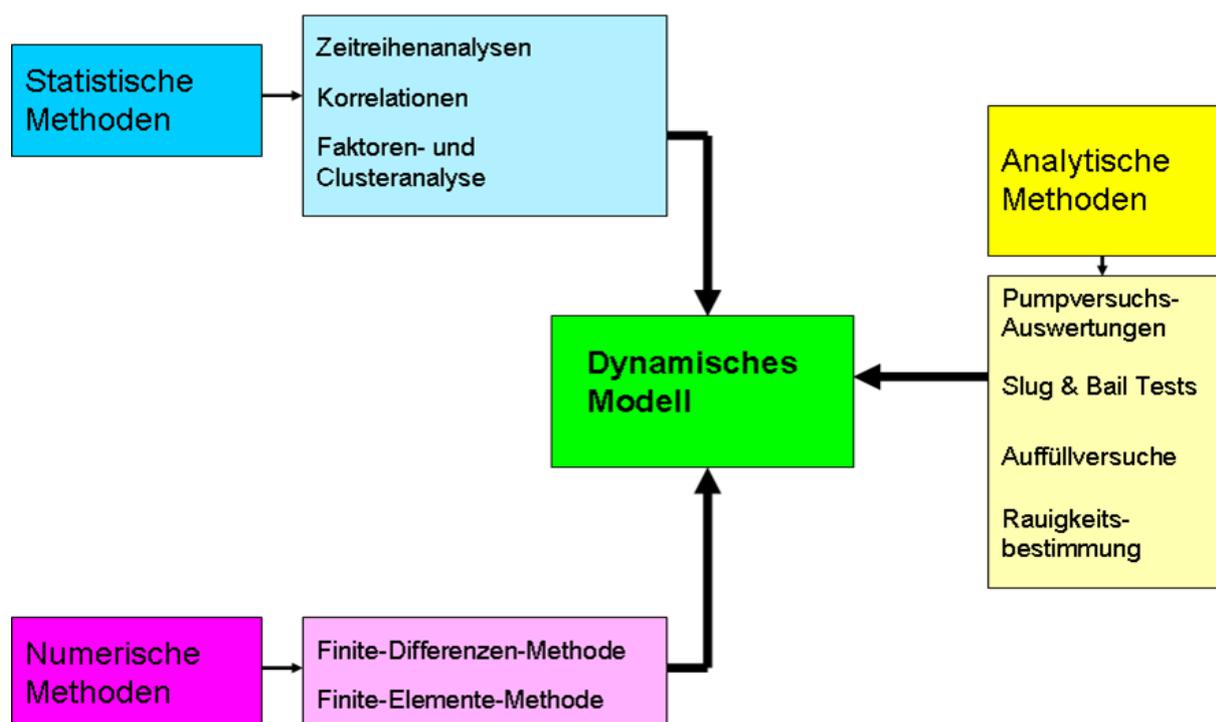


Abbildung 10: Statistische, analytische und numerische Methoden in der dynamischen Modellierung.

2.2.1 Statistische Methoden

Besonders weitgehend werden statistische Methoden in der Hydrologie bei der Betrachtung von Einzugsgebieten und der Analyse von Abflussmessungen eingesetzt. Gerade die in DYCK ET AL. (1980a) und DYCK ET AL. (1980b) beschriebenen Methoden sind zum überwiegenden Teil stochastische Methoden mit erheblichen statistischen Anteilen. Für dynamische Untersuchungen werden insbesondere Zeitreihen in Form von Ganglinien analysiert. In der Hydrogeologie werden mit diesen Methoden nicht nur Wasserstandsganglinien ausgewertet, sondern auch Konzentrationsganglinien. Die wesentlichen Elemente der Zeitreihenbewertung sind die Trendanalyse, Periodizitätsanalyse und die Autokorrelationsanalyse. Besondere Anforderungen werden an die Methoden durch die Einmaligkeit (bzw. fehlende Wiederholbarkeit) und gleichzeitig teilweise Unregelmäßigkeit der Messzeitpunkte gestellt. Durch zunehmende Automatisierung (und zuverlässigere Messgeräte) können die Anforderungen sauberer statistischer Verfahren besser erfüllt werden. In GOSSEL (1999) werden auf der anderen Seite Verfahren vorgestellt, auch mit nicht äquidistanten Datenreihen zu arbeiten. Diese praxisorientierten Verfahren sind allerdings sehr rechenaufwändig und nur mit Hilfe der EDV einzusetzen. In der Hydrologie werden insbesondere Abflusszeitreihen (Hochwasser- und Niedrigwasserabflüsse), aber auch meteorologische Daten wie Niederschlagsdaten (siehe z.B. BARDOSSY 1993) analysiert. Hier geht es auch nicht nur um die o.g. zeitreihenanalytischen Untersuchungen auf Trend, Periodizitäten und Autokorrelationen, sondern insbesondere um die statistisch abgesicherte Vorhersage von Spitzenwerten des Abflusses und des Wasserstandes aus voneinander abhängigen oder unabhängigen tributären Flusssystemen.

2.2.2 Analytische Methoden

Die Bestimmung hydrogeologischer Parameter ist ein klassisches Einsatzgebiet analytischer Methoden, wie z.B. die analytische Beschreibung des Zeit-

Absenkungsverhaltens bei Pumpversuchen oder bei Slug & Bail Tests. Diese Verfahren sind aufgrund ihrer Komplexität jedoch meist auf idealisierte Fälle und unter einschränkenden Voraussetzungen einsetzbar. Einige Einschränkungen seien hier genannt, obwohl durch Weiterentwicklungen, die umfangreich in BRUGGEMANN (1999) beschrieben sind, die Einsatzmöglichkeiten wesentlich erweitert wurden:

- Die Berechnungen sind meist nur für homogene Aquiferbereiche zulässig.
- Isotropie ist für viele Methoden ebenfalls eine Voraussetzung.
- Die Berechnungen sind nur für relativ einfache Versuchsanordnungen lösbar; komplexere Anordnungen sind nur durch Analogieschlüsse berechenbar.

Ausschlaggebend für die Erweiterungen und Entwicklungen neuer Verfahren war der Einsatz von EDV-Werkzeugen. Hierdurch konnten auch sehr komplexe Gleichungen gelöst werden. Gleichzeitig stiegen die Möglichkeiten der Visualisierung gerade der dynamischen Vorgänge.

2.2.3 Numerische Methoden

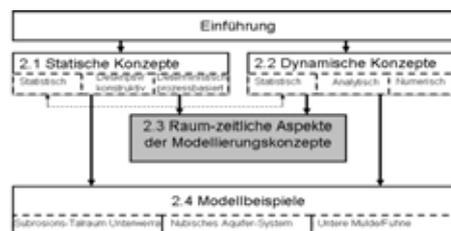
Seit etwa Mitte der 1980er Jahre werden numerische Methoden bei der Modellierung von hydrogeologischen Systemen eingesetzt. LUCKNER & SCHESTAKOW 1986, KINZELBACH 1986, DIERSCH 1984 sowie McDONALD & HARBAUGH (1988) übernahmen Methoden aus dem Ingenieurbereich und entwickelten sie für die Hydrogeologie weiter, die dazu geeignet waren, die hochgradig nichtlinearen Gleichungssysteme, die sich aus Kontinuitätsgesetz und Darcy-Gleichung ergeben, iterativ zu lösen und damit zu linearisieren. Numerische Methoden wurden darauf aufbauend auch für die Erstellung globaler Klimamodelle und Abflussmodelle genutzt. So beschreibt ROBINSON (2001) die Wechselwirkungen zwischen Atmosphäre und terrestrischen wie extraterrestrischen Energiequellen zwar zunächst analytisch, setzt sie dann jedoch durch Diskretisierung um. Auch die von CLAUSSEN & GAYLER (1997) und KUBATZKI & CLAUSSEN (1998) sowie von DÖLL & FOHRER (1999) beschriebenen klimatischen und hydrologischen Modelle sind ohne numerische Methoden nicht lösbar.

Die numerischen Methoden basieren darauf, nichtlineare Gleichungssysteme durch Diskretisierung iterativ zu lösen. Hierbei werden Raum und/oder Zeit in kleine Teilabschnitte aufgeteilt, für die eine lineare Lösung bei Konstanz der Parameter und Randbedingungen innerhalb dieses Teilabschnitts angenommen wird. Insofern liegt hier eine Analogie zu den räumlichen Interpolationsverfahren vor, die unter 2.1.1 beschrieben wurden, was für die räumlichen Aspekte der dynamischen Modellierung sehr stark genutzt wird. Numerische Verfahren sind daher meist bei ihrer Umsetzung in Modellierungssysteme, Modellierungswerkzeuge und Modelle ohne geeignete Interpolationswerkzeuge kaum einsetzbar. Die Zusammenhänge zwischen Parametern, Randbedingungen und Ergebnissen der Modellierung sind trotz der Diskretisierungen nicht linear, was die Kalibrierung von Modellen erheblich erschwert.

Bei der zeitlichen Diskretisierung kommen anders als bei der räumlichen Modellierung häufig automatisch adaptierende Konzepte zum Einsatz. Diese orientieren sich an den innerhalb eines Berechnungszeitschritts stattfindenden Veränderungen der Zielgröße aufgrund von Änderungen der Randbedingungen und/oder Parameter. Werden bestimmte benutzerdefinierte Kriterien überschritten, wird automatisch der Berechnungszeitschritt verkleinert bzw. bei Einhaltung des Kriteriums vergrößert, wenn keine weiteren Vorgaben, z.B. für die benutzerdefinierte Ausgabe zu bestimmten Zeitpunkten vorliegen.

2.3 Raum-zeitliche Aspekte der Modellierungskonzepte

Bezüglich der Dimensionierung lassen sich die statischen Konzepte einteilen in 2D-Konzepte, die bei allen informationsbasierten Modellen, in denen es um Flächen geht, wie z.B. bei einer Reihe umweltgeologischer Fragestellungen, eine wesentliche Rolle spielen. Bei ober- oder trennflächenbasierten Konzepten werden 2.5 Dimensionen genutzt. Echte 3D-Konzepte werden für räumlich differenzierte Fragestellungen eingesetzt, bei denen geologische Strukturen von Bedeutung sind. Für hydrologische Modellierungen wird die dritte Dimension meist durch die Aufteilung der Prozesse entsprechend dem Vertikal-/Horizontal-Prinzip und dem Topologieprinzip aufgelöst.



Bei den statischen Modellen spielt die horizontale Abgrenzung des Modellgebiets eine untergeordnete Rolle. Die Aussagefähigkeit wird unter Beachtung des Ziels der Modellierung nicht durch die Dimensionierung beeinflusst.

Die Abgrenzung geologischer Modelle sollte sich selbstverständlich an den zu modellierenden geologischen Körpern orientieren, soweit sie sich aufgrund der Datenbasis abgrenzen lassen.

In der Hydrologie ist die räumliche Skala bzw. der Maßstab von größerer inhaltlicher Bedeutung als in der geologischen und hydrogeologischen Modellierung. Allerdings sind räumliche Skalen und Maßstäbe dort eng mit der Zeitskala verbunden:

- Bis in den Bereich von wenigen 100 m wird die Skala als lokal bezeichnet.
- Bis etwa 10 km reicht der Landschaftsmaßstab.
- Große Einzugsgebiete werden im regionalen Maßstab bis etwa 1000 km abgebildet.
- Dann folgen der kontinentale Maßstab und schließlich der für die Hydrogeologie weniger bedeutsame, aber für die Klimaforschung wichtige globale Maßstab.

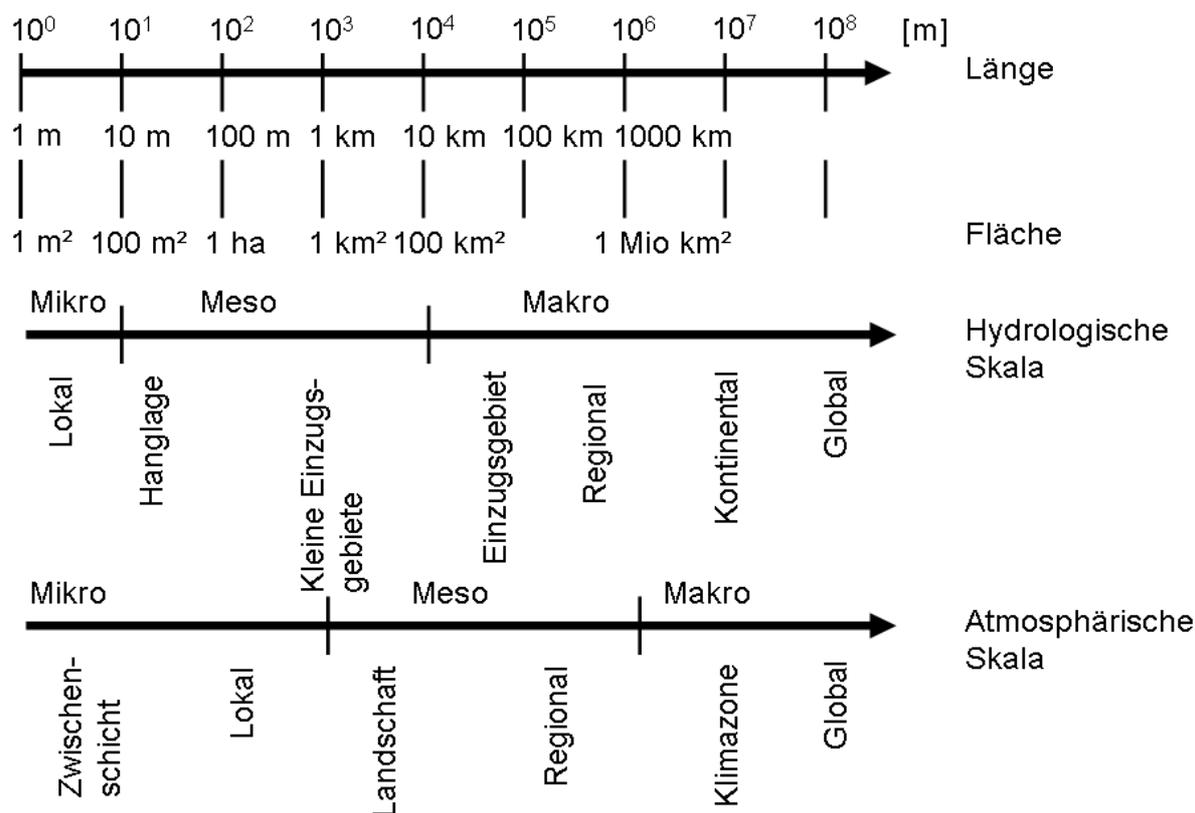


Abbildung 11: Räumliche Skalen bei der hydrogeologischen Modellierung (verändert nach BRONSTERT ET AL. 2005)

Für die Charakterisierung räumlicher Dimensionen einer Modellierung sind daneben folgende Arten von Skalen zu unterscheiden:

- Prozess-Skala
- Beprobungs-Skala und
- Modell-Skala

Diese räumlichen Skalen sollten aufeinander abgestimmt sein: Die Größe des betrachteten Gebiets, die Dichte der Stützstellen (Beprobung) oder auch der Probenabstand, die Aussagereichweite der Proben und die Diskretisierung des resultierenden Modells sind wesentlich von allen drei Skalen abhängig. Letztlich ist die Prozess-Skala jedoch dominierend für die Anpassung der Beprobungs- und der Modell-Skala.

In der Hydrogeologie wie in der Hydrologie müssen zur Abgrenzung des Modellgebiets andere Kriterien als in der Geologie genutzt werden. Hier spielen Randbedingungen, die sich in der Hydrogeologie ganz wesentlich aus dem in der Anfangsphase des Modellaufbaus konzeptionell zu entwickelnden Strömungsnetz ergeben, die maßgebliche Rolle. In die Definition der Randbedingungen können auch geologische Aspekte, wie z.B. die Verbreitung von Grundwasserleitern, mit einfließen. Meist sind jedoch hydrologische Randbedingungen wie Oberflächengewässer mit definierbaren Wasserständen und/oder Wasserzu- oder -abflüsse, wie z.B. Wasserscheiden, über die der Zufluss ins Gebiet als 0 definiert werden kann, ausschlaggebend.

Von größerer Bedeutung als der Maßstab eines geologischen wie eines hydrogeologischen Modells ist die Diskretisierung des Gebiets. Ähnlich wie in Geoinformationssystemen im 2D-Raum werden für die internen 3D-Geometrien drei Konzepte genutzt, wie z.B. in HERTER & KOOS (2006) und BRINKHOFF (2005) beschrieben:

Diskrete Volumen sind eine Domäne der statistischen Modellierungsmethoden. Sie sind vergleichbar den Rastern im GIS und bestehen lediglich aus Quadern oder Prismen, sodass sich für jede Modelleinheit lokal dieselbe räumliche Auflösung ergibt. Ihre Darstellung ist ausführlich in BAUMANN (2005) und BRINKHOFF (2005) beschrieben. Neben regelmäßigen Rastern können dabei auch sog. Quadrees und R-Bäume zur besseren räumlichen Erfassung und Darstellung genutzt werden.

Geometrische Konzepte erreichen meist eine bessere Repräsentation geologischer Körper und werden insbesondere (aber nicht ausschließlich) von den konstruktiven Modellierungsmethoden unterstützt. Sie ähneln den vektorbasierten, aber nicht topologischen Geometrien in verschiedenen GIS und in einigen Aufsätzen für CAD-Systeme. THOMSEN ET AL. (2005) zeigen die Möglichkeiten der Modellierung geologischer Körper mit geeigneten Werkzeugen, insbesondere für diese geometrischen Konzepte, aber auch für die nachfolgend beschriebenen topologischen Konzepte, auf.

Topologische Konzepte stellen Beziehungen zwischen geometrischen Primitiven her und sind daher leistungsfähiger in der Auswertung. Die topologischen Geometrien sind meist hierarchisch geordnet, d.h. eine Linie wird aus den Endpunkten (meist als Nodes bezeichnet) und zusätzlichen Stützpunkten (oft als Vertices bezeichnet) aufgebaut, ein Polygon aus Linien und ein dreidimensionaler Körper aus Kanten und Seitenflächen.

Detailliert dargestellt werden diese Datenkonzepte in GRÖGER & KOLBE (2005) sowie WU ET AL. (2005). Diverse Standards der ISO 19100er Reihe, entwickelt zu wesentlichen Teilen vom Open Geospatial Consortium (OGC), können als Regelwerke für die Darstellung der Primitive in geometrischen Konzepten herangezogen werden. Für den Datenaustausch wurde vom OGC die Geography Markup Language (GML, für 3D-Objekte ab der Version 3 aufwärts definiert) vorgeschlagen, deren Realisierung sich am Internetstandard Extensible Markup Language (XML) orientiert. Die Umsetzung dieser Standards ist allerdings selbst in den Werkzeugen der OGC-Mitglieder noch nicht sehr weit fortgeschritten, sodass immer noch weitgehend auf Konvertierungen zu Rastern oder bestenfalls Dreiecksstrukturen (sog. TIN's, Triangular Irregular Networks), die die umhüllenden Oberflächen wiedergeben, zurückgegriffen werden muss (s. Kap. 3.1.3). Die in THOMSEN (2005) beschriebenen räumlichen Operationen sind in weiten Bereichen auf geometrischen wie auf topologischen Objekten durchführbar.

Für geometrische und topologische Konzepte gibt es in den numerischen Modellierungssystemen (z.B. Sickerwassermodellierung, Modellierung der ungesättigten Zone und numerische Grundwassermodellierung) keine Notwendigkeit. Die diskreten Elemente werden hier als Quader oder Prismen behandelt.

Für die räumliche Modellierung wird die Datengrundlage auch anhand geostatistischer Verfahren bewertet. Das Variogramm ermöglicht die Bestimmung der Aussagereichweite. Sie beträgt nach BLÖSCHL (1996) ein Drittel des Range des Variogrammmodells, allgemeiner kann man jedoch den gesamten Range zugrunde legen. Daher sollten in sinnvoller Weise Variogramme für jede Schicht horizontal und vertikal erstellt werden, sodass sich daraus die minimal im Modell zu erstellende Volumengröße statistisch solide durch Multiplikation der Aussagereichweiten berechnen lässt.

Selbstverständlich können Strukturen, die kleiner als die Auflösung der modellierten geometrischen oder topologischen Körper sind, durch Raster oder unregelmäßige Dreiecke nicht wiedergegeben werden, im Gegenteil: In der Regel muss die Recht-

ecks- oder Dreiecks- (bzw. Quader- oder Prismen-) Diskretisierung mindestens doppelt so hoch auflösend sein wie die kleinsten darzustellenden Einheiten. Die Umsetzung in ein GRID (rechteckige oder quadratische Raster, im 3D-Raum Quader) oder ein TIN (unregelmäßige Dreiecke, im 3D-Raum Prismen) ermöglicht visuell zunächst unterschiedliche Darstellungen, die aber bei entsprechender Auflösung der beiden Diskretisierungsformen zu keinen nennenswerten Differenzen führt. Die Möglichkeit einer automatisierten Adaption der Diskretisierung an vorhandene Daten und wiederzugebende Strukturen existiert zwar in Form von Quadtree-Datenbäumen, wird aber in Modellierungswerkzeugen kaum umgesetzt.

Bei der räumlichen Diskretisierung sind je nach Modellierungsziel und entsprechend genutztem Modellierungssystem zusätzlich zu den geologisch zu modellierenden Einheiten auch die hydrologischen und hydrogeologischen Notwendigkeiten zu berücksichtigen. Das repräsentative Elementarvolumen kann zwar nur selten das Maß für die kleinsten Einheiten sein. Aber die Peclet-Zahl muss bei einer möglicherweise anschließenden Transportmodellierung eingehalten werden.

Mit modernen Methoden (z.B. auf der Grundlage von Voronoi- (oder Thiessen-) Polygonen) kann eine Aussage darüber getroffen werden, ob eine Diskrepanz zwischen Eingangsdaten und Aussagesicherheiten besteht.

Ebenso wie bei der räumlichen Modellierung räumliche Skalenaspekte zu beachten sind, so ist auch bei der dynamischen Modellierung die zeitliche Diskretisierung für das Modellierungsziel von besonderer Bedeutung. Oftmals sind die Ziele prognostisch definiert, womit die Schwierigkeit einer prognostischen Definition der Szenarien, insbesondere für die bei der numerischen Modellierung notwendigen Randbedingungen und/oder Parameter, einhergeht. BLÖSCHL (1996) zeigt die Probleme, die dabei entstehen können, deutlich auf: Schwer zu ermittelnde und zu berücksichtigende Anisotropien und neu zu berücksichtigende Modellgebiete sind zwei der wichtigsten Fehlerquellen für Szenarien, die selbst auf gut kalibrierten Modellen aufsetzend entstehen können. Bei den in dieser Arbeit diskutierten numerischen Modellen mit ihrer starken räumlichen Diskretisierung sind diese Probleme jedoch als geringer einzustufen als bei einigen räumlich sehr stark integrierenden dynamischen Modellierungssystemen der Hydrologie, z.B. den Niederschlags-Abfluss-Modellierungen.

Ebenso wie bei den räumlichen Skalen sind auch bei den Zeitskalen hydrologische Prozesse als Mittel zur Skalierung am besten geeignet. Zeitliche und räumliche Skalen sind dabei über die beobachtbaren und modellierbaren Prozesse gekoppelt.

BRONSTERT ET AL. (2005) geben folgende Zeitskalen für die Hydrologie an:

- Als Kurzzeitereignisse (short term) werden Ereignisse mit einer Dauer von einigen Minuten bis 1 Tag bezeichnet. Sie spielen in der Hydrologie, insbesondere bei der Bemessung von Drainage- und Kanalisationssystemen, eine wichtige Rolle. Grenzwertig sind hier auch Flutereignisse zu nennen.
- Saisonale Zeiträume mit einer Länge von Tagen bis Jahren werden als medium term bezeichnet. Für die Hydrogeologie ist diese Zeitskala von großer Bedeutung, weil in ihr eine Reihe von anthropogenen Einflüssen auf den Wasserhaushalt liegt, wie z.B. die Grundwasserentnahmen zur Trinkwasserversorgung oder die landwirtschaftliche Bewässerung, und natürliche Zyklen der Grundwasserneubildung. Letzteres lässt sich auch auf hydrologische Phänomene, wie z.B. den Durchzug von Tiefdruckgebieten anwenden.
- Langzeitereignisse (long term) mit Zeiträumen von einigen Jahren bis 100 Jahre sind sowohl für hydrologische wie für hydrogeologische Modelle von wachsender

Bedeutung, z.B. für die Bemessung von Wiederkehrintervallen von Kurzzeitereignissen oder Strömungs- und Transportprozesse im Grundwasser.

- Noch längere Zeiträume werden in der Hydrologie bisher selten betrachtet. Lediglich die Klimaforschung widmet sich in den letzten Jahrzehnten solch langen Perioden. Für die Hydrogeologie ergibt sich hier die Schnittstelle zu geologischen Zeiträumen, die große Grundwassereinzugsgebiete maßgeblich beeinflusst haben und deren Wirkung bis heute andauert. Ergänzend zu BRONSTERT ET AL. (2005) werden hier die Skalen für historische (etwa 1000 Jahre) und geologische Zeiträume (etwa 1 Mio. Jahre) angefügt. Die klimatologisch wie geologisch bedeutsamen Eiszeiten befinden sich an der Grenze beider Skalen.

In Abbildung 12 sind die Zeitskalen für die betrachteten Modelle vereinfacht in Form eines Zeitstrahls dargestellt.

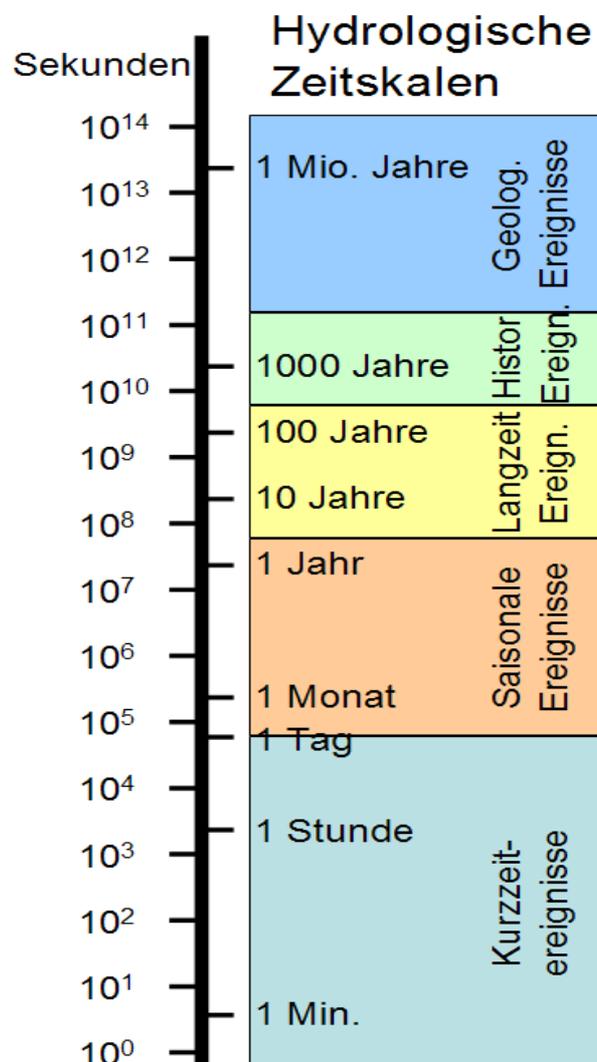


Abbildung 12: Zeitskalen für hydrologische und hydrogeologische Modellierungen (verändert und ergänzt nach BRONSTERT ET AL. 2005).

Auch für die Zeitskalen ist eine Unterscheidung in Prozess-, Beprobungs- und Modell-Skalen notwendig, wobei die Prozess-Skala dominiert.

BLÖSCHL (1996) beschreibt den Zusammenhang zwischen räumlichen und zeitlichen Prozessskalen in der Hydrologie. Aufgrund der Beeinflussung hydrogeologischer Prozesse durch geologische Prozesse wurde in Abbildung 13 eine Erweiterung notwendig. Sehr deutlich sind die Skalensprünge zwischen den kompartimentgebundenen Prozessen in der Atmosphäre und an der Erdoberfläche, den Prozessen der ungesättigten Zone, den Strömungs- und Transportvorgängen in der gesättigten Zone und den geologischen Prozessen. Es gibt zwar evidente Übergänge, wie z.B. kurzzeitige geologische Prozesse wie Vulkanausbrüche, Erdbeben, submarine Rutschungen u.a.. Aber die Vielzahl der Prozesse ist doch diesen raumzeitlichen Skalen zuzuordnen.

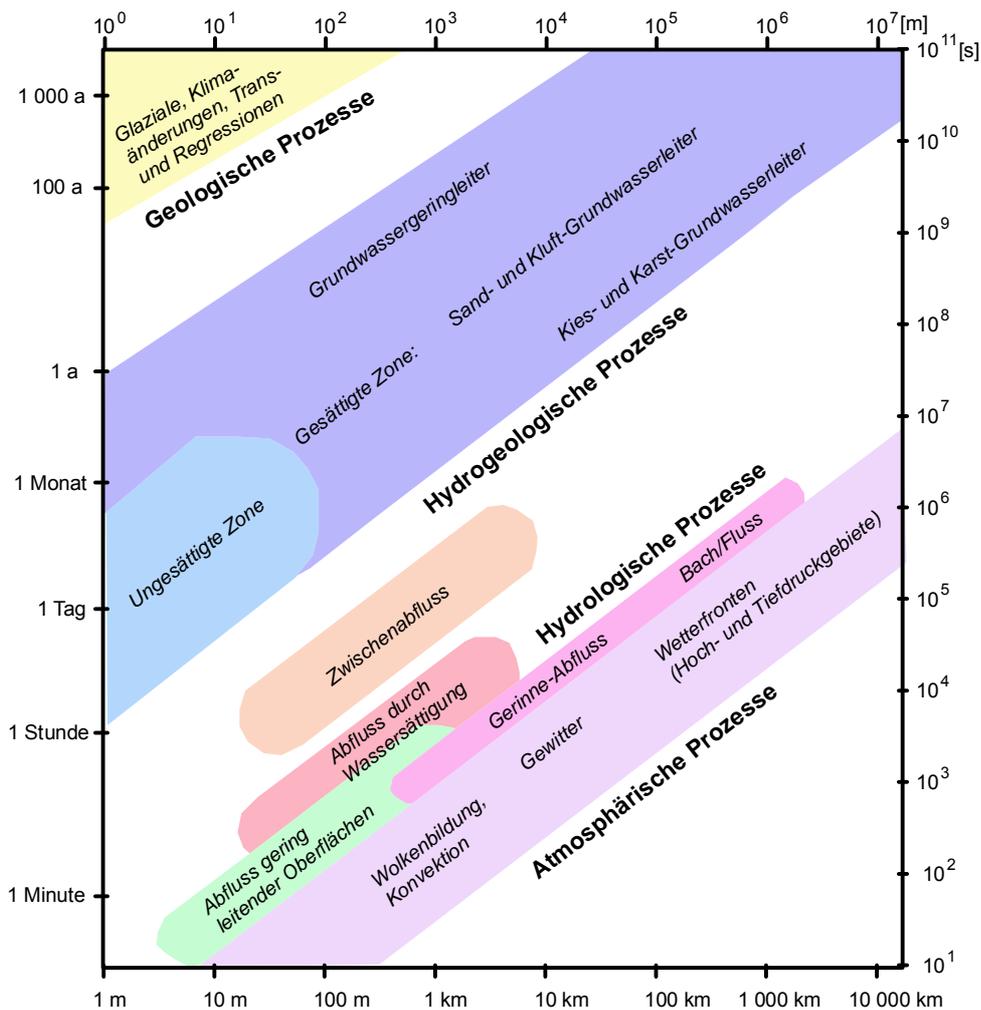
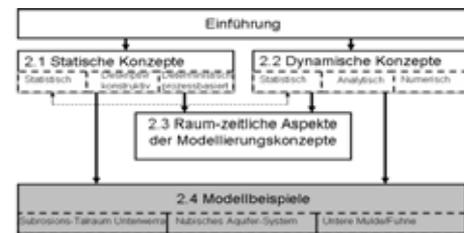


Abbildung 13: Zusammenhänge zwischen räumlichen und zeitlichen Prozessskalen in der Hydrologie und Hydrogeologie (verändert nach BLÖSCHL 1996). Es werden nur die Strömungsprozesse, kein gelöster und/oder partikulärer Transport betrachtet.

2.4 Modellierungskonzepte der Modellbeispiele

Alle unter 1.3 eingeführten Modellbeispiele wurden mit statischen und dynamischen methodischen Konzepten für verschiedene Fragestellungen bearbeitet.

Für diese Modelle wurden zunächst geologische Modelle, die eine statische Basis bilden, mit statistischen oder konstruktiven Methoden erarbeitet.



Darauf aufbauend wurden numerische Grundwassermodelle entwickelt, sodass dynamische Elemente erst mit der Belegung von Randbedingungen und der Grundwasserneubildung hinzukamen. Außerdem wurden für diesen Schritt weitere Modelle entwickelt, die für das numerische Grundwassermodell eine differenziertere Datenbasis ergaben. Lediglich das Modell Untere Mulde/Fuhne wurde in einem zweiten Schritt überarbeitet. In dem Zeitraum 1840 bis 1990 wurden durch die Bergbautätigkeit die ursprünglichen geologischen Schichten in kurzer Zeit in weiten Bereichen grundlegend verändert, was eine Erweiterung des Modellraums und ergänzende geologische Modellierungen erforderte.

2.4.1 Subrosions-Talraum Unterwerra

Im Untersuchungsgebiet des Subrosions-Talraums Unterwerra steht eine Vielzahl von Grundwassermessstellen zur Verfügung, die in etwa halbjährlichem Rhythmus hydrodynamisch und hydrochemisch untersucht werden. Diese hervorragende Datenbasis für die Modellierung und Kalibrierung führen zu spezifischen Modellierungskonzepten, die für viele Fragestellungen eine rein statistische Auswertung erlauben. Zunächst wurde ein statisches geologisches Modell mit konstruktiven Methoden generiert. Für dieses geologische Modell wurden geometrische Körper modelliert. LÄHNE ET AL. (2006) zeigen, dass die Generierung auch eines teilweise aus Festgesteinen bestehenden geologischen Modells mit konstruktiven Methoden unproblematisch ist, mit Ausnahme von bestimmten geologischen Besonderheiten, wie z.B. Vulkanschloten oder größeren Störungen, die jedoch mit modelltechnischem Geschick überwunden werden können.

Das statische geologische Modell wurde als Grundlage für die hydrogeologische numerische Modellierung genutzt, die durch die Randbedingungen und die Grundwasserneubildung dynamisch ausgeführt wurde. Zur Übernahme in das numerische Grundwassermodell wurden die geometrischen Körper in besser geeignete diskrete Quader bzw. Prismen umgewandelt.

Charakteristisch für die Modellierung des Subrosions-Talraums Unterwerra ist die Nutzung analytischer Verfahren bei der Parameterermittlung für das numerische Grundwassermodell. Pumpversuche, Slug & Bail-Tests und Infiltrationsversuche sind in hoher räumlicher Dichte durchgeführt worden und ermöglichten dadurch eine sehr differenzierte Datenbasis für verschiedene hydro- und umweltgeologische Fragestellungen. Neben der Grundwasserströmungsmodellierung können auch Modellierungen zur Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung bzw. zur Vulnerabilität des Grundwassers auf einer hoch auflösenden Datenbasis berechnet werden. Selbst für das Festgestein liegen – neben Pumpversuchsauswertungen – auch aus Durchflussversuchen im Labor ermittelte konkrete Daten zur hydraulischen Leitfähigkeit vor.

2.4.2 Nubisches Aquifer System

Für das numerische Grundwassermodell des Nubischen Aquifer Systems waren zwei Zielstellungen maßgeblich:

- Die sozioökonomischen Bedingungen in Ägypten und den Nachbarstaaten Libyen, Tschad und Sudan machen die Erweiterung der Wasserversorgung notwendig. Für einige Oasen in der westlichen Wüste Ägyptens, des östlichen Libyens und des nördlichen Sudans existieren Pläne zur Ausweitung der Nahrungsmittelproduktion und Trinkwassergewinnung durch Grundwasserförderung aus dem Nubischen Aquifersystem. Durch ein in den geplanten Fördergebieten sehr stark verdichtetes numerisches Grundwassermodell sollen die Konsequenzen einer Ausweitung der Wasserförderung aufgezeigt werden und mögliche Verbesserungen geprüft werden.
- Prähistorische und geologische Untersuchungen zeigten in Form limnischer und fluviatiler Sedimente sowie archäologischer Funde die große Verbreitung von oberflächigen Süßwasservorkommen. Die daraus abgeleiteten starken Klimaveränderungen konnten durch weitere Untersuchungen nachgewiesen werden. Über ein großräumiges Langzeitmodell sollen genauere Erkenntnisse über die Wechselwirkungen von Oberflächen- und Grundwasser gewonnen werden. Wesentliche Aufgabe war die Klärung der Genese limnischer Sedimente, Sabkhas und paläontologischer Befunde von Nilpferdknochen, Krokodilresten und Fischskeletten, die in PACHUR ET AL. (1990) beschrieben sind.

Das Nubische Aquifersystem kann in großen Teilen (Osten, Süden und große Teile des Westens) durch Grundgebirgsausbisse abgegrenzt werden. Im Norden sind zwei Möglichkeiten der Abgrenzung gegeben: In den Modellen von BRINKMANN & HEINL (1986), EBRAHEEM ET AL. (2002), EBRAHEEM ET AL. (2003), EBRAHEEM ET AL. (2004) und GOSSEL ET AL. (2004) und GOSSEL ET AL. (2006) wird die seit mehreren Jahrzehnten stabile Salz-Süßwasser-Interface als Modellgrenze genutzt. Die Weiterentwicklung des Modells von GOSSEL ET AL. (2004) und GOSSEL ET AL. (2006) wurde jedoch bis zum Mittelmeer geführt und im Nordwesten bis zur Großen Sirte erweitert. Hierdurch konnten wesentlich solidere Randbedingungen genutzt werden als die nicht sehr langfristig beobachtete Salz-Süßwasser-Grenze.

Ganz anders als für das Modellgebiet des Subrosions-Talraums Unterwerra stehen für das Nubische Aquifer System nur wenige und meist nur über Literatur zugängliche geologische und hydrogeologische Daten zur Verfügung. Lediglich in den für die erste Fragestellung betrachteten lokalen Ausschnitten der Oasenbereiche liegen auch Primärdaten aus Bohrungen, Pumpversuchen und Wasserstandsmessungen vor. Das dem hydrogeologischen Modell des Nubischen Aquifer Systems zugrunde liegende Struktur- und Parametermodell wurde mit einer Mischung aus konstruktiven Methoden und statistischen Methoden erstellt. Hierbei wurden jedoch ausschließlich diskrete Modellelemente genutzt. Eine Modellierung von geometrischen oder gar topologischen Körpern ist der großräumigen Ausdehnung und der Zielstellung einer numerischen Grundwassermodellierung nicht angemessen.

Die geologischen und hydrogeologischen Grundlagen wurden in GOSSEL ET AL. (2004) bereits eingehend erläutert. In den zentralen Teilen des Modellgebiets ist die Datenbasis, bestehend aus Profilschnitten und einzelnen Bohrdaten mit Bestimmungen von Aquiferkenngrößen, ausreichend für ein solch großräumiges Regionalmodell. In den Randbereichen ist die geologische Datenbasis, insbesondere in den zusätzlich betrachteten Bereichen im Norden des Modellgebiets, fast unzureichend und kann nur durch geostatistische Methoden im Sinne einer Extrapolation ergänzt wer-

den. Für die beiden oben beschriebenen Aufgaben wurden unterschiedliche numerische Grundwassermodelle erstellt, von denen das Langzeitmodell recht gleichmäßig im gesamten Gebiet diskretisiert wurde. Lediglich in den für die Auswertung der im Küstenbereich zu untersuchenden Salzwasservorkommen wurde eine höhere Auflösung vorgenommen. Das Modell zur Untersuchung der aktuellen und künftigen Fördermengen wurde mit einer hohen räumlichen Auflösung in den detailliert zu untersuchenden Entwicklungsgebieten der Oasen angelegt. Es sind also sowohl zeitlich wie räumlich sehr unterschiedliche dynamische, mit numerischen Methoden durchgeführte Modellierungsaufgaben, die auf der Grundlage des gleichen gemischt konstruktiv und statistisch erstellten statischen geologischen Modells aufbauen.

2.4.3 Untere Mulde/Fuhne

Im Gebiet Untere Mulde/Fuhne wurden statische Modelle für folgende Aufgaben und Zielstellungen erarbeitet:

- Multivariate Auswertung und Ranking von Schadstoffen (THIEKEN 2001).
- Räumlich hochauflösende geologische Modellierung (FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004))
- Abschätzung von Kontaminationsverteilungen

Entsprechend der sehr stark differierenden Aufgabenstellungen wurde auch in sehr unterschiedlichen Bezugsräumen gearbeitet. Die statistischen Untersuchungen sind in der Wahl der Systemgrenzen lediglich an die Aufgabenstellung und die Datenbasis gebunden. Die geologische Modellierung wurde aufgrund der im ersten Modell von FABRITIUS (2002) erkannten Strukturen um das Modellgebiet von WOLLMANN (2004) erweitert. Das hydrogeologische Modell, das Grundlage für die Ausführungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit ist, orientiert sich an den hydrologischen und - untergeordnet - geologischen Randbedingungen.

Von THIEKEN (2001) wurden aus einem großen Pool hydrochemischer Analysen des landeseigenen Monitoring-Programms mit Hilfe der Faktorenanalyse und der Hasse-Diagrammtechnik (BRÜGGEMANN ET AL. 1999) diejenigen hydrochemischen Parameter identifiziert, die für vergangene und damit auch für weitere Analysen und Beobachtungen besonders signifikant sind. Weiterhin wurden regionale und geologisch-genetische Merkmale zur Identifikation räumlicher Verteilungsmuster genutzt.

In weiteren Arbeiten wurden von RICHTER ET AL. (2004) und WYCSIK ET AL. (2004a) sowie WYCSIK ET AL. (2004b) mit geostatistischen Methoden zwei- und dreidimensionale Verteilungen von hydrochemischen Parametern berechnet. Von RICHTER (2003) wurden zusätzlich zu den rein geostatistischen Methoden auch geophysikalische Größen wie der geothermische Gradient und hydrochemische Zusammenhänge bzw. Modellvorstellungen zur Analyse hinzugezogen. Bei WYCSIK ET AL. (2004b) wurde besonders auf die Auswertung der Aussagesicherheiten, die in der räumlich sehr heterogenen Beprobung begründet ist, Wert gelegt. In diese Untersuchungen sind neben der reinen Geostatistik auch erste Ergebnisse einer numerischen Grundwassermodellierung mit eingeflossen, für die NEEF (2002) zunächst einen lokalen Gebietsausschnitt betrachtete, der aber im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf regionale Ausmaße erweitert wurde.

Für das Kerngebiet der Kontaminationsausbreitung der Megasite Bitterfeld wurden zusätzlich zu den statistischen Modellen der Umweltgeologie hochauflösende geologische Modelle erstellt, die einen vertieften Einblick in die Ursachen der Verteilungs-

muster hydrochemischer Parameter lieferten. FABRITIUS (2002) erstellte ein Modell des seit 1975 besonders vom Braunkohletagebau und dem anschließenden Grundwasserwiederanstieg betroffenen Südtails der Region. WOLLMANN (2004) konstruierte das Modell des für den Austrag der Kontaminationen nach dem Flutereignis im August 2002 besonders wichtigen Nordteils der Region. In WYCSIK ET AL. (2006) wurden die geologischen und hydrogeologischen Untersuchungen innerhalb eines Gebietsausschnitts in einen engen Zusammenhang gestellt.

Für die geologische Modellierung wurde zunächst ein geometrisches Konzept umgesetzt. Mit Hilfe des Modellierungssystems konnte daraus vereinfachend eine diskretisierte Fassung erstellt werden.

So unterschiedlich die Aufgaben und eingesetzten Methoden auch waren, sie ermöglichten erst die Entwicklung eines Gesamtbildes der regionalen Verteilungen von Kontaminationen in diesem geologisch wie bergbau- und industriehistorisch äußerst komplexen Gebiet.

Unter Einbeziehung der geologischen Modelle von FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004), die insgesamt ein Gebiet von etwa 60 km² umfassten, wurde ein regionales numerisches Grundwasserströmungsmodell mit einer Fläche von etwa 320 km² generiert. Dieses Modell ist, anders als die Detailmodelle, nicht mehr mit geometrischen Körpern realisiert, sondern liegt ausschließlich in dem vereinfachten Konzept diskreter Volumen (regelmäßige Quader) vor. Die Nutzung statistischer Methoden war hier für den außerhalb des Detailgebiets liegenden Teil des Modellgebietes unerlässlich. Die zeitliche Dimensionierung des numerischen Grundwassermodells macht die Notwendigkeit der Einbeziehung dynamischer Komponenten deutlich: Es geht bei diesem Modell nicht so sehr um die räumlich hoch auflösende Darstellung von Strömungszuständen oder der Ausbreitung von Kontaminationen und auch nicht um die Prognose zeitlich eng begrenzter Eingriffe wie z.B. Sanierungen, sondern um regionale Strömungszustände, die wesentlich von regionalmaßstäbigen geologischen Bedingungen geprägt werden, und um Langzeitbetrachtungen. Die 150 Jahre andauernde und sich immer wieder räumlich verlagernde Braunkohlenförderung in Tagebauen sowie die 100 Jahre währenden industriellen Stoffeinträge haben zu einer sehr komplexen Aufgabenstellung an geologische wie hydrogeologische Modelle geführt: Die geologischen Verhältnisse wurden durch die Tagebautätigkeit mit ihren Abgrabungen und Kippenstrukturen dynamisch verändert, was die Abbildung 14 deutlich macht.

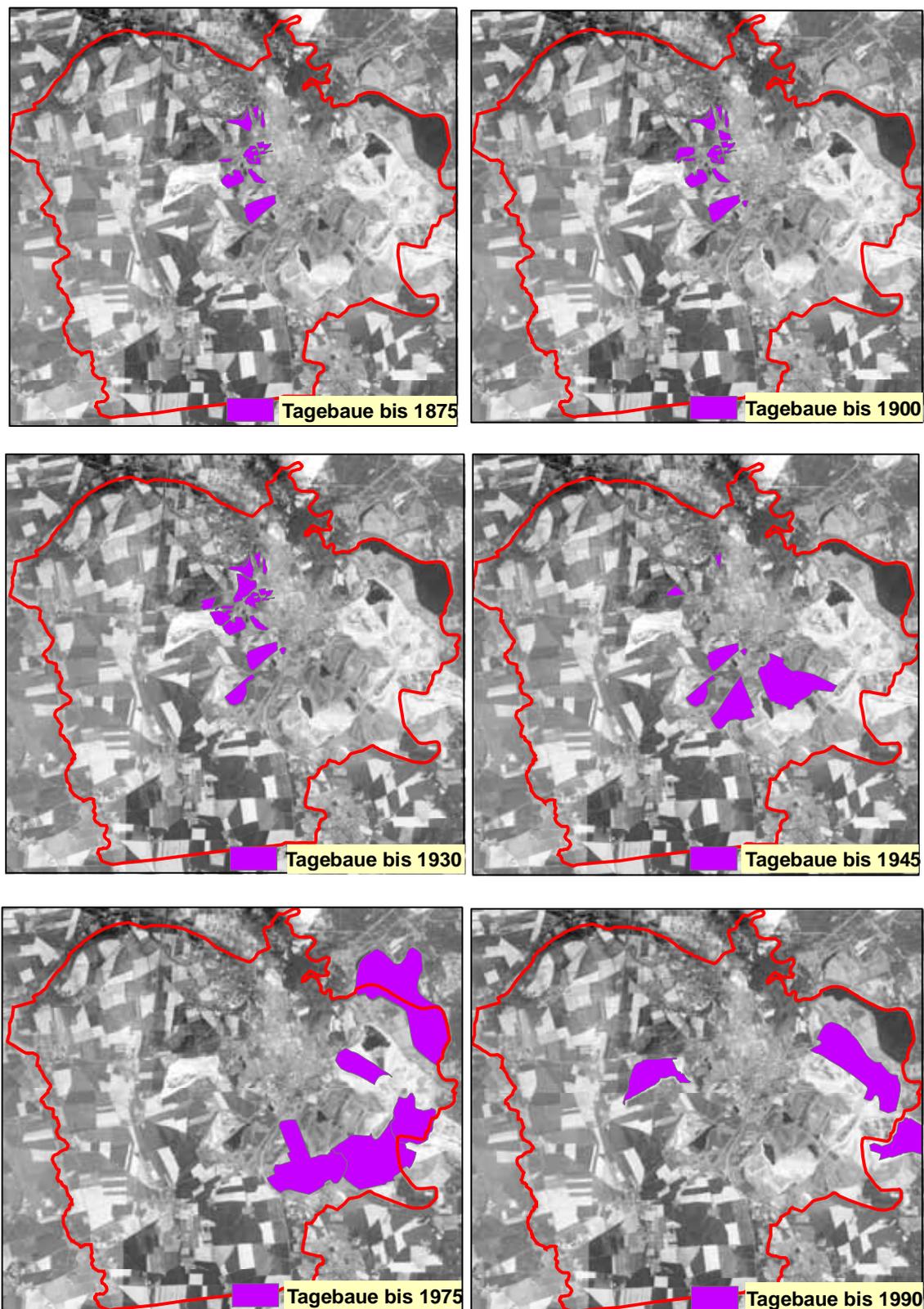


Abbildung 14: Dynamik des Braunkohlentagebaus in der Region Bitterfeld. Die verschiedenen Zeitschnitte machen die Bewegungsrichtung von den Gebieten westlich Bitterfeld über den Süden bis zum Osten der Stadt deutlich. Damit gehen Veränderungen des Deckgebirges und damit des Kippenmaterials einher. Die Tiefenlagen der Braunkohle und damit die Endteufen des Abbaus werden ebenfalls beeinflusst.

2.5 Modellierungskonzepte kurz gefasst

Die Modellierungskonzepte, auf denen Modelle basieren, können zunächst in statische und dynamische Konzepte entsprechend ihrer Zeitabhängigkeit gegliedert werden. Beide Modellierungskonzepte arbeiten mit verschiedenen Methoden, deren Einsatz entscheidend von den Zielen und in untergeordnetem Maße von den Datengrundlagen des Modells abhängt. Die verschiedenen Einsatzgebiete und Verwendungsmöglichkeiten der Modellierungsmethoden in Modellierungssystemen haben sich über die Zeit gewandelt, sodass heute bei den statischen Konzepten statistische und deskriptive Methoden und bei den dynamischen Konzepten numerische Methoden bevorzugt eingesetzt werden. Da die beschriebenen Modellierungskonzepte Grundlage der Modellierungen und Modellkopplungen sind, ergibt sich die Möglichkeit, unter dem Aspekt der Konzepte die Kopplungsmethoden systematisch zu beschreiben. In den Modellbeispielen Untere Mulde/Fuhne, Nubisches Aquifer System und Subrosions-Talraum Unterwerra wurden verschiedene Konzepte umgesetzt und die eingesetzten Methoden kurz beschrieben.

3 Modellierungssysteme

Grundvoraussetzung für die Modellierung ist die Erstellung eines konzeptionellen Modells. Diese Aufgabe kann mit der Kenntnis um die komplexen Modellierungssysteme, die im Folgenden vorgestellt werden, besser gelöst werden als ohne diese Kenntnisse. Der Fortschritt in der Kenntnis methodischer Lösungen ist genauso wichtig wie zusätzliche Daten. Beide Entwicklungen bedingen einander.

Die für die Aufgabenstellung zu nutzenden Modellierungssysteme müssen die beiden unter 2.1 und 2.2 dargestellten Konzepte umsetzen. Dabei sind die technischen Lösungen i.d.R. nur entweder auf die statischen 3D-Modellierungen oder auf dynamische Modellierungskonzepte beschränkt. Übergänge zwischen beiden beziehen sich oft auf stationäre Zustände, die einen quasistatischen Gleichgewichtszustand darstellen. Hieraus ergibt sich die Notwendigkeit, bei Kopplungen von Modellierungssystemen, wie sie in Kap. 4 beschrieben werden, diese systematische Differenz zumindest datentechnisch zu überbrücken.

In diesem Kapitel werden die Modellierungssysteme und damit die Realisationen anhand der jeweils nutzbaren bzw. zur Verfügung gestellten Methoden vertieft beschrieben. Dabei werden weder dezidierte Computerprogramme noch die Möglichkeiten der Verbindung der verschiedenen Modellierungssysteme, die in Kap. 4 thematisiert werden, beschrieben oder gar verglichen. In 3.8.4 werden lediglich exemplarisch die für die Beispiele genutzten Modellierungswerkzeuge erwähnt. Abbildung 15 bietet eine Übersicht des Kapitels.

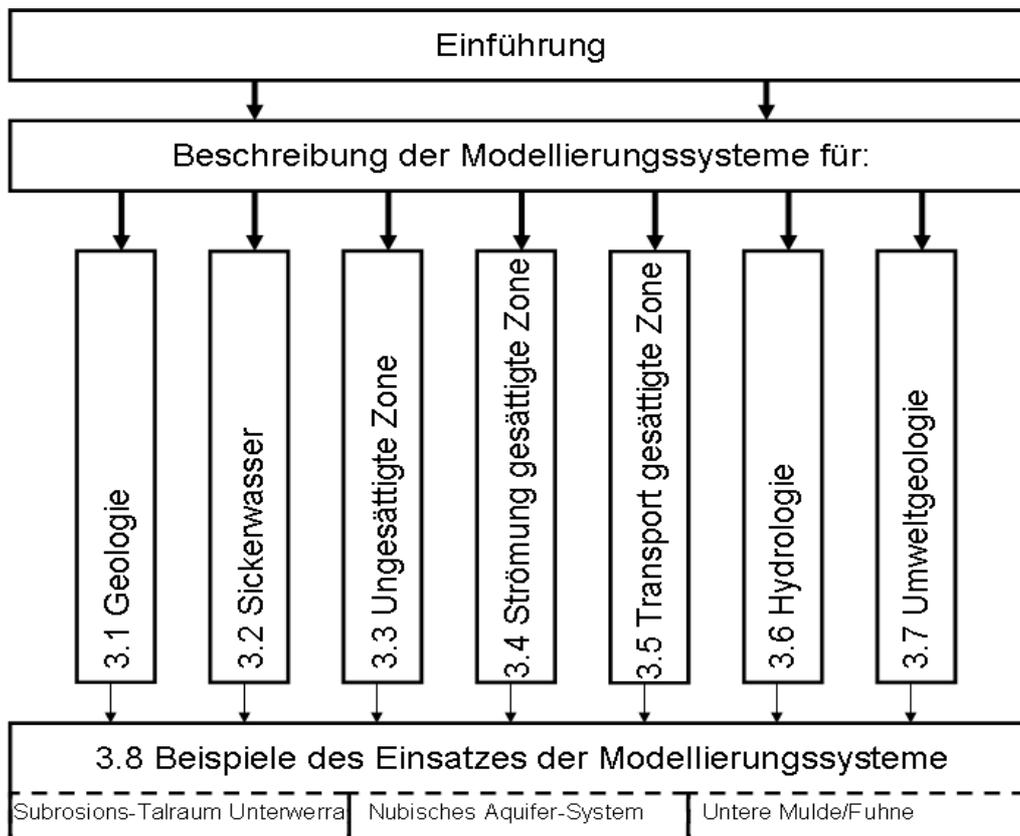


Abbildung 15: Grafische Übersicht von Kapitel 3. Zur besseren Orientierung ist diese Grafik als Miniatur in den folgenden Unterkapiteln vorangestellt.

3.1 Geologische Modellierungssysteme

Die geologischen Modelle dienen neben der reinen geologischen Interpretation zu vielfältigen weiteren Auswertungen. So werden sie beispielsweise in der Umweltgeologie, wie in WYCISK ET AL. (2002) beschrieben, zur Abschätzung von Residualkontaminationen in Adsorptionshorizonten, Sekundärquellen von Kontaminationen und potentiellen hydrogeologischen Fenstern (Verbindungen von Grundwasserleitern miteinander) genutzt.

Geologische Modellierungssysteme sind in den allermeisten Anwendungsfällen statisch. Dynamische Elemente kommen nur bei der Betrachtung großer Zeiträume oder anthropogener Eingriffe in den Untergrund, wie sie z.B. Tagebau darstellen, zum Tragen. Die Behandlung dynamischer geologischer Modelle ist wegen dieser geringen Einsatzbreite umständlich und mit der Entwicklung neuer Konzepte verbunden.

Im hydrogeologischen Kontext werden sie oft als wesentliche Lieferanten von Parameterverteilungen und Strukturen für Grundwassermodelle gebraucht. In numerischen Grundwasser-Modellierungswerkzeugen werden sie daher oft in Präprozessoren implementiert. Dieser Schritt vom geologischen Modell zum numerischen Grundwassermodell ist sehr viel komplexer als zunächst deutlich wird:

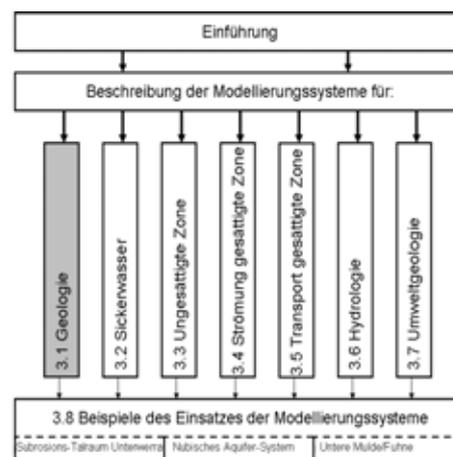
- Numerische Grundwassermodelle basieren auf Parameterverteilungen, die nicht ursächlich mit einer geologischen (stratigrafischen) Klassifikation zusammenhängen.
- Die numerischen Rechenalgorithmen stellen eigene Anforderungen an Strukturen, die von einem geologischen Modell meist nicht erfüllt werden.
- Die Auswirkungen einer zu weit gehenden Vereinfachung von Strukturen und Parameterverteilungen können gravierend sein.

Eine eingehende Betrachtung dieses Modellierungskonzeptes muss daher über eine einfache statistische Generierung von Verteilungen hinausgehen.

Geologische Modellierungssysteme sind, wie CHRISTAKOS ET AL. (2001) aus dem historischen Kontext ableiten, meist nicht für prognostische Modellierungen geeignet, sondern sie haben ihre Stärken im deskriptiven Bereich.

Geologische Prozesse können zwar sehr gut beschrieben werden. Doch werden diese Beschreibungen nicht mathematisch formuliert und sind dadurch auch nicht mit Computern modellierbar. Die fehlende Fähigkeit zur Prozessmodellierung ist auch auf die fehlende Möglichkeit zurückzuführen, messbare Eingangsdaten zu erheben. Geologische Prozesse können häufig nur über die Ergebnisse identifiziert werden. Insofern sind geologische Prozessmodelle auf eine inverse Modellierung angewiesen. Viele Prozesse sind auch nicht über die direkten Ergebnisse invers zu modellieren, sondern benötigen Proxy-Daten.

Abbildung 16 zeigt den grundsätzlichen Ablauf der geologischen Modellierung von der Erhebung verschiedenster Grundlagendaten bis zu den Ergebnissen, die für praktisch alle Bereiche der Geologie nutzbar sind. Die digitale Datenerfassung wird heute oft schon in die Geländeuntersuchungen integriert, was die folgenden Schritte der Interpretation und Modellierung vereinfacht.



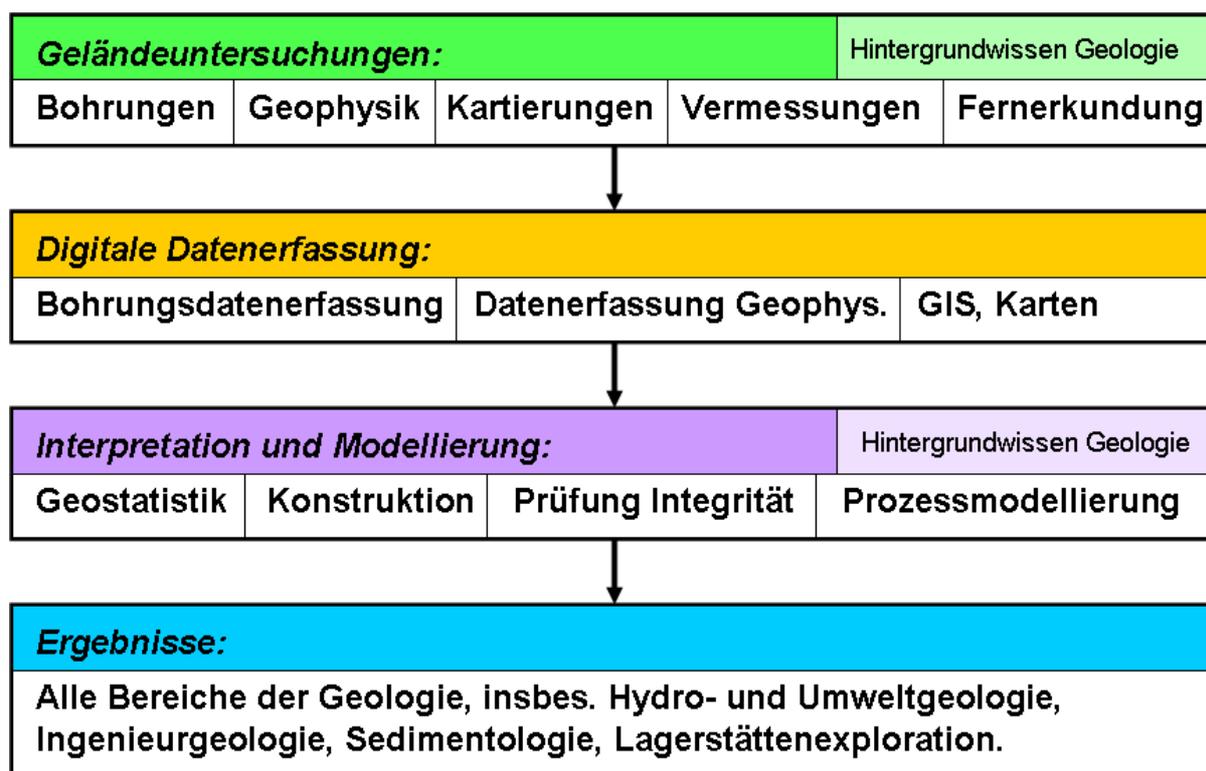


Abbildung 16: Geologische Modellierung. Der Ablauf der Modellbildung kann durch die konsequente Nutzung digitaler Mittel bereits bei der Datenaufnahme im Gelände effizienter werden. Die Nutzung geostatistischer, konstruktiver und prozessbasierter Methoden bei der Interpretation ist nicht alternativ, sondern zunehmend integrativ zu sehen.

3.1.1 Eingangsdaten geologischer Modellierungssysteme

Die Heterogenität der Datenbasis geologischer Modellierungssysteme ist bereits von HOULDING (1994) sehr eingehend beschrieben worden. An dieser Stelle werden daher nur einige Besonderheiten der sehr unregelmäßig verteilten Datenbasis hervorgehoben:

- Einer sehr geringen horizontalen Beprobungsdichte steht eine sehr hohe vertikale Analyse von Bohrungen gegenüber.
- Die Datenbasis ist bei hydro- und umweltgeologischen Modellierungsaufgaben nicht auf ein regelmäßiges Raster wie bei Lagerstättenerkundungen abstimmbare.
- Diese Bohrungsdatenbasis kann oft nur langfristig und nur mit erheblichem Aufwand verbessert werden.
- Geophysikalische Daten, wie z.B. geoelektrische oder seismische Profile oder gar 3D-Seismik, sind für die meisten hydro- und umweltgeologischen Projekte unerschwinglich und daher selten verfügbar. Weitere Hindernisse zur Nutzung dieser Verfahren bestehen in dem hohen Interpretationsaufwand der gewonnenen Daten und der Einschränkung auf bestimmte Aufgaben und geologische Bedingungen.
- Der vertikal hoch auflösenden, aber horizontal nur in großen Abständen zur Verfügung stehenden Datenbasis der Bohrungen steht eine hoch auflösende horizontale geologische Karte der oberflächennahen Schichten sowie i.d.R. ein recht hoch auflösendes (digitales) Höhenmodell (DGM) gegenüber.

Diese Rahmenbedingungen führen dazu, dass die geringe Datendichte durch geeignete Methoden nicht nur bestmöglich ergänzbar sein, sondern auch eine qualifizierte Berücksichtigung verschiedener Ebenen der Datenherkunft ermöglichen muss. Schon die Bohrdaten an sich sind oft nicht eindeutig geologisch (d.h. hier: stratigrafisch) interpretierbar. Eine wissensbasierte Ergänzung der Datenbasis, sei es auf konstruktivem oder statistischem Wege, muss darüber hinaus ebenfalls transparent, diskutierbar und korrigierbar sein. Modellierungswerkzeuge sollten idealerweise also die Trennung in mehrere Ebenen der Datensicherheit bzw. Datenqualität gewährleisten:

- sichere Daten,
- Daten mit unsicherer geologischer Zuordnung,
- Ergänzungen der Datenbasis aus Sekundäruntersuchungen, z.B. mit geophysikalischen Methoden,
- konstruktive Ergänzungen der Datenbasis,
- statistische Ergänzungen der Datenbasis.

Diese Stufen der Datensicherheit haben nichts mit den mit geostatistischen Methoden ermittelten Aussagesicherheiten zu tun.

Bei der Nutzung von Sekundär-Datenquellen können zusätzlich formale Unsicherheiten auftreten, wenn z.B. mit klassifizierten anstelle von kontinuierlichen Daten gearbeitet wird.

Als Eingangsdaten für die Modellierung haben Bohrungen zwar den großen Vorteil einer zumindest lithologisch meist eindeutigen systematischen Erfassbarkeit (zumindest bei Bohrkerngewinnung). Aber die Daten sind nur sehr lokal beschränkt auswertbar, da die Aussagereichweite sehr gering ist. Für die Bohrdatendichte kann auf der Grundlage bisher durchgeführter großräumiger Modellierungen (SOBISCH 2000 und GOSSEL ET AL. 1998) in Deutschland in einem Teufenbereich >10 m etwa 1 Bohrung je km² geschätzt werden. In Bergbaugebieten erhöht sich diese Zahl erheblich, in Festgesteinsgebieten liegt sie z.T. wesentlich darunter. Daraus ergeben sich erhebliche Datenlücken, die in manchen Anwendungsfällen durch geophysikalische Daten reduziert werden können. Für die Modellierung mit einer heterogenen Datenbasis geben WU ET AL. (2005) wesentliche Hinweise.

Die Nutzung geologischer Karten als Informationsquelle ist für die geologische Modellierung unerlässlich, da sie eine der wenigen flächenhaften Verbreitungen von Schichten bereitstellt. Diese Bedeutung wird von den geologischen Modellierungssystemen oft unterbewertet.

Die Abgrenzung geologischer Modelle richtet sich zunächst ausschließlich nach der Zielstellung. Die Beschneidung geologischer Körper in einem statischen Modell ist problemlos möglich. Geologische Grenzen sind jedoch für die Abgrenzung des Modellgebiets zu bevorzugen. Bei einer Modellierung über diskrete Elemente ist die Diskretisierung an die kleinsten darzustellenden geologischen Körper anzupassen, da diese sonst nicht mit der genügenden Genauigkeit abgebildet werden können.

3.1.2 Modellierungsmethoden

Die statistischen Modellierungssysteme wurden durch die Fortschritte in der Geostatistik deutlich ausgebaut und neben dem ökonomisch vordringlichen Aufgabenbereich der Lagerstättenuntersuchung auch auf die Anwendung der Modellierung all-

gemeiner geologischer Strukturen adaptiert (MALLET 2002). Für wissenschaftliche Fragestellungen werden dabei neben den verschiedenen Kriging-Varianten, beschrieben, z.B. in DAVIS (1986), AKIN & SIEMENS (1988), ENGLUND & SPARKS (1988), ISAAKS & SRIVASTAVA (1989), DEUTSCH & JOURNAL (1992), HEINRICH (1992) und SCHAFMEISTER (1998), auch andere geostatistische Verfahren, wie z.B. Konditionale Simulation (in SCHAFMEISTER-SPIERLING 1990), Simulated Annealing (in DEUTSCH & JOURNAL 1992) und Genetic Algorithms, eingesetzt.

Für die Nutzung konstruktiver Methoden in geologischen Modellierungssystemen gibt es weit weniger Beispiele: SOBISCH (2000) beschreibt den Einsatz für die Erstellung eines dreidimensionalen geologischen Modells des Kartenblatts Nordhorn, FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004) für zwei Modellgebiete im Bereich Bitterfeld, POHLERT ET AL. (2004) für ein kleines Modellgebiet in Leuna, SCHLESIER (2006) und POHLERT ET AL. (2006) für das Stadtgebiet von Halle/Saale und LÄHNE ET AL. (2006) für den Talraum Unterwerra.

Prozessbasierte Methoden werden für die geologische Modellierung heute noch selten eingesetzt. Lediglich für die Erdölerkundung werden vereinzelt sedimentologische Modellierungssysteme genutzt. Die Methoden sind dabei im Wesentlichen auf die klastische Sedimentologie im litoralen und fluviatilen Bereich beschränkt. Auch im tektonischen Bereich werden zur Interpretation Modellierungssysteme herangezogen, die jedoch selten prozessorientierten Charakter tragen.

Für die geologische Verarbeitung der Eingangsdaten ist die in Kap. 2 dargestellte Möglichkeit der Berücksichtigung weitergehender, interpretativer geologischer Kenntnisse, wie z.B. der Verlauf von Störungssystemen, glazialen Rinnensystemen oder großräumigen Küstenlinien, neben der Priorität der Bohrdaten und Messwerte von Bedeutung. Diese Hintergrundkenntnisse können mit Hilfe konstruktiver Methoden besser umgesetzt werden als mit statistischen Methoden, denn in den statistischen Modellierungssystemen bieten sich lediglich die Möglichkeiten der Variogrammetrie. Demgegenüber ist in den konstruktiven Systemen durch die entsprechenden visuellen Modellierungsmöglichkeiten die Integration von Fachwissen von vornherein mit berücksichtigt.

Beide Arten von Modellierungssystemen haben durch die EDV wesentliche Fortschritte erzielt. Während die Geostatistik von den zusätzlichen Rechenkapazitäten profitierte, ist für die konstruktiven Methoden insbesondere die Weiterentwicklung der Visualisierungsmöglichkeiten von Bedeutung. Dreidimensionale Darstellungen sind für die Kontrolle bei der Entwicklung eines geologischen Modells mit konstruktiven Methoden unerlässlich. Die Interaktivität der Modellierungswerkzeuge ist aber meist dann stark eingeschränkt, wenn es um nachträgliche Korrekturen und das Einbinden neuer Daten geht.

Beide Modellierungsarten sind aber jeweils ohne die andere kaum durchführbar. Während die statistischen Methoden meist durch zusätzliche Stützpunkte korrigiert werden müssen (teilweise werden detailliertere Informationen für einzelne Horizonte, wie z.B. die Geländeoberkante, zusätzlich hinzugefügt), sind die konstruktiven Methoden auf die Interpolation zwischen den durch Profilschnitte ergänzten Basisinformationen angewiesen.

Beide Arten von Modellierungssystemen haben auch noch diverse Schwierigkeiten bei der vollständigen Umsetzung ihres Konzeptes:

Die meisten praktischen Anwendungen von 3D-Interpolationen scheitern bereits an der fehlenden Interpretation und Implementation von unterschiedlichen Variogram-

men für horizontale und vertikale Längen. GOSSEL ET AL. (in Vorbereitung) zeigen ein Verfahren auf, das zur Lösung dieser Fragestellungen beitragen kann. Ihre Variogramme für verschiedene Überhöhungen machen deutlich, dass es typische Korrelationslängen für vertikale und horizontale Variogramme gibt. Die Einführung der Überhöhung verbessert die 3D-Variogramme deutlich.

Die konstruktiven Arbeitsmethoden haben das Problem, dass entlang der Profilschnitte eine sehr hohe Datendichte erzeugt wird, während in den Bereichen dazwischen angemessene Interpolationsverfahren eingesetzt werden müssen. Wichtig ist dabei, dass immer die Basis (oder die gesamte Deckfläche) des gesamten Schichtstapels interpoliert wird, sodass die Grenzfläche für das gesamte Gebiet vorhanden ist und erosive geologische Strukturen auch als solche wiedergegeben werden. Interaktives Arbeiten bei gleichzeitig schneller Erzeugung der Grenzflächen ist für diese Methode ganz wesentlich, damit Fehler frühzeitig erkannt und behoben werden können. Daher werden bei diesen Modellierungssystemen meist Triangulationen zur Interpolation verwendet. Geschieht dies automatisch, z.B. nach dem Algorithmus der Delaunay-Triangulation, so können geologische Strukturen oft nicht oder nur unzureichend wiedergegeben werden. Besser ist eine Möglichkeit zur manuellen Korrektur der erstellten Dreiecke. Die Nutzung von geostatistischen Interpolationsverfahren ergibt meist keine wesentliche Verbesserung der Modelle, da die Daten bereits konstruktiv interpretiert sind und daher eine zusätzliche geostatistische Interpretation meist überflüssig ist.

Aufgrund der Notwendigkeit des Einsatzes sowohl statistischer als auch konstruktiver Methoden wird in mehreren Modellierungswerkzeugen eine Kombination aus beiden angeboten, wobei die Anteile jeweils unterschiedlich verteilt sind.

3.1.3 Ergebnisse der geologischen Modellierungen

Ergebnis der geologischen Modellierung ist ein stratigrafisches, seltener ein lithologisches, Modell der Schichten im Untergrund. Verschiedene geologische Fazies, die sich aus unterschiedlichen Sedimentationsräumen (oder gar kontinuierlichen Übergängen zwischen diesen), Mineralzusammensetzungen und Biozönosen ergeben, werden dabei meist nicht berücksichtigt. Daraus resultieren sehr starke vertikale Inhomogenitäten bei gleichzeitiger Unterdrückung horizontaler Inhomogenitäten.

Für die Geometrien des Modells ergeben sich entsprechend des Datenmodells des jeweiligen Modellierungssystems entweder Rasterobjekte, geometrische Volumenobjekte oder topologische Volumenobjekte. Die Darstellungsmöglichkeiten dieser Objekte beschränken sich bisher meist auf das jeweilig zur Modellierung genutzte Werkzeug. Austauschmöglichkeiten stehen lediglich über Exportformate zur Verfügung. Für die Darstellung sind meist die Formate der Virtual Reality Markup Language (VRML) oder das Drawing Exchange Format (dxf) von CAD-Systemen nutzbar. Beide Formate sind für den Austausch geometrischer Volumenobjekte, wenn auch oftmals durch räumliche Transformationen leicht eingeschränkt, geeignet. Topologische Formate werden nicht erzeugt, sondern die notwendigen topologischen Operationen werden von den Werkzeugen auf die geometrischen Datenmodelle angewendet.

Die geologischen Modelle sind eine wesentliche Grundlage für erste Interpretationen, wobei in dieser Arbeit nur hydro- und umweltgeologische sowie hydrologische Aspekte näher betrachtet werden. So können beispielsweise ohne weitere digitale Modellierungen bereits erste begründete Aussagen über Grundwasserleiter- und -geringleiterstrukturen getroffen, potenzielle Horizonte für Zwischenabfluss und

Schadstofffallen erfasst und Senken für mögliche Sekundärquellen abgeleitet werden. In Verbindung mit weitergehenden lithologischen Kenntnissen können auch Volumina potentieller Adsorptionshorizonte berechnet und aus der Verbreitung von Geringleitern auf Verbindungen zwischen Grundwasserleitern geschlossen werden.

Für den Austausch mit anderen Modellierungssystemen stehen oft nur Raster- bzw. Voxel-basierte ASCII-Formate zur Verfügung. Es ist daher oft notwendig, geometrische Volumenobjekte in diskrete Volumina zu überführen. Wie im 2D-Raum der Geoinformationssysteme ergeben sich auch hier die verschiedenen Repräsentationsmöglichkeiten, die durch die weitgehende Automatisierung dieses Arbeitsschrittes jedoch oft in exklusiver Weise beschränkt sind. Dabei ergeben sich durchaus unterschiedliche Modelle, je nachdem, ob z.B. der Zellmittelpunkt maßgeblich für die Belegung der Eigenschaften ist oder die vollständige Erfassung der Zelle.

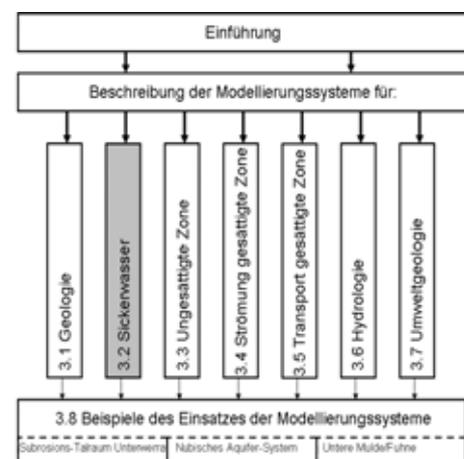
3.2 Sickerwasser-Modellierungssysteme

Sickerwasser-Modellierungssysteme beschreiben die vertikale Wasserströmung und auch oft den Transport innerhalb der Bodenzone, d.h. der obersten zwei Meter der Erdkruste. Hierfür gibt es unterschiedliche Modellierungsansätze:

- Empirische Modellierungssysteme ohne physikalische Strukturmodellierung, z.B. GLUGLA & GOLF (1987), DÖRHÖFER & JOSOPAIT (1980), SCHROEDER & WYRWICH (1990), GROSSMANN (2006), WESSOLEK ET AL. (2004). Empirische Modellierungssysteme basieren auf wechselnden Anteilen analytischer und statistischer Methoden.
- Speichermodellierungssysteme, wie z.B. PFÜTZNER ET AL. (1992), PFÜTZNER (1994), WESSOLEK (1989), HÖRMANN (2005). Speichermodellierungssysteme sind in den Bereich der numerischen Lösungen einzuordnen, wenn sie auch viele statistische Anteile beinhalten.
- Komplexe numerische Lösungen, die ausschließlich physikalisch basiert sind.

Die Eingangsparameter der Modellierungssysteme unterscheiden sich ebenso wie die internen Methoden des Modellierungssystems erheblich.

Abbildung 17 gibt den grundsätzlichen Ablauf einer Sickerwassermodellierung wieder. Die Nutzung von GIS ist für den gesamten Prozess der räumlichen Datenerfassung und Ergebnisauswertung unverzichtbar. Meist werden GIS auch in der Modellierung eingesetzt.



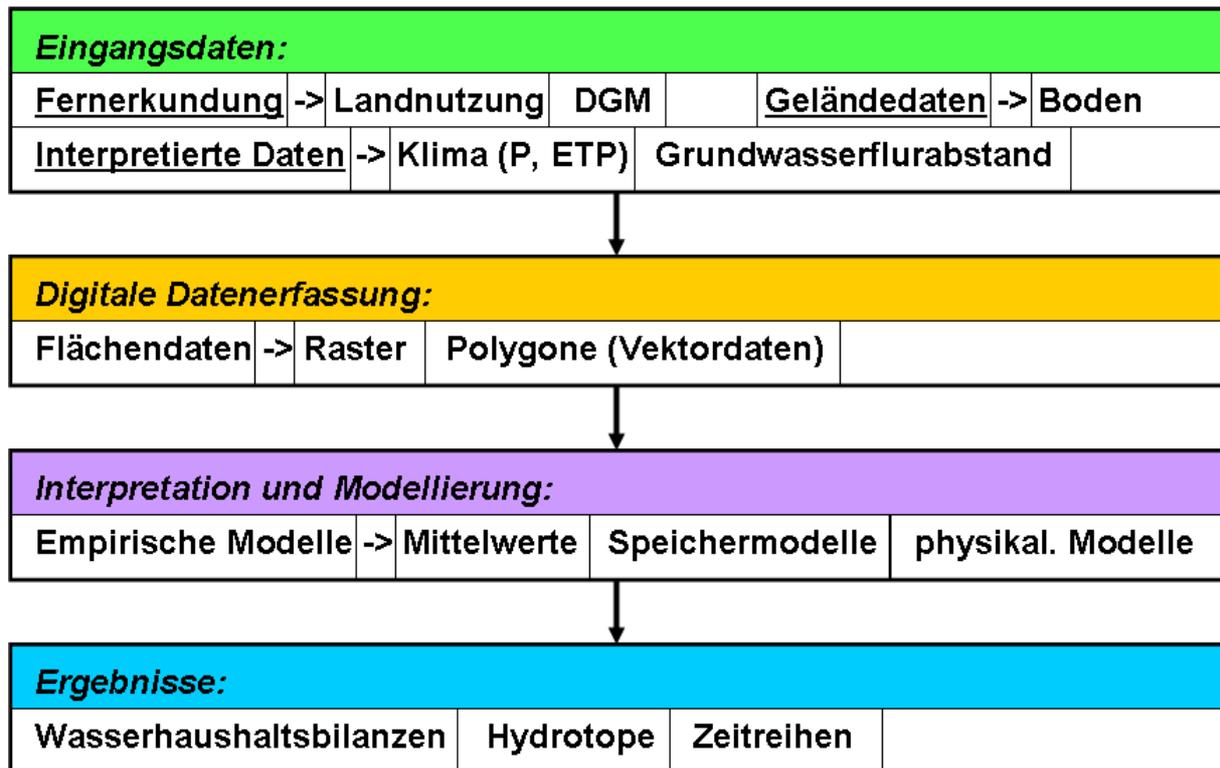


Abbildung 17: Sickerwassermodellierung. Die Eingangsdaten sind oft bereits digital vorhanden, müssen jedoch für die Modellierung in geeigneter Weise aufbereitet werden. (P = Niederschlag, ETP = Potentielle Evapotranspiration).

3.2.1 Eingangsdaten von Sickerwasser-Modellierungssystemen

Eingangsparameter aller Modellierungssysteme sind Informationen zu Klima, Landnutzung, Boden, Grundwasserflurabstand und evtl. Geländegefälle.

Die Klimadaten sind bei der Berechnung von Einzeljahren zeitabhängig einzusetzen und umfassen Niederschlags- und Verdunstungsparameter. Meist wird neben den effektiven Niederschlägen die potentielle Verdunstung als Eingangsparameter vorausgesetzt. Manche Modellierungssysteme berechnen sie aus entsprechenden Messwerten der Temperatur, der relativen Luftfeuchtigkeit, der Strahlungsbilanz und/oder Windgeschwindigkeit intern, im deutschsprachigen Raum meist nach den ggf. in den Beschreibungen der Modellierungssysteme zitierten Verfahren von THORNTON (1948), HAUDE (1952), TURC (1961) und/oder PENMAN (1948).

Die anderen Parameter sind meist ausschließlich zweidimensional ortsabhängig. Im Normalfall werden mit GIS-Methoden die entsprechenden Parameter der Landnutzung wie Bewuchs, Bebauung und Versiegelung bzw. beim Boden die Parameter nutzbare Feldkapazität (bzw. Feldkapazität und Permanenter Welkepunkt), hydraulische Durchlässigkeit, Durchwurzelungstiefe und kapillare Aufstiegshöhe erfasst. Für die Grundwasserflurabstände muss meist eine Berechnung auf der Grundlage eines digitalen Geländemodells und der interpolierten Grundwasseroberfläche durchgeführt werden. Das Geländemodell ist auch Grundlage für die Berechnung des Geländegefälles. Bei diesem Parameter wird die Maßstabsabhängigkeit besonders deutlich, da entweder bereits kleinräumige Strukturen das Ergebnis beeinflussen oder nur sehr grobe Strukturen berücksichtigt werden.

Diese Daten können in GIS mit zwei methodischen Ansätzen verarbeitet werden:

Vektorbasierte Methoden setzen Polygonstrukturen voraus und haben bei der Verschneidung von Daten den Vorteil der hohen räumlichen Genauigkeit, obwohl diese oft aufgrund der unterschiedlichen Maßstäbe und Auflösung nur scheinbar vorliegt. Der Nachteil der Verschneidung vielfältiger Datengrundlagen auf Polygonbasis liegt in der Erzeugung sog. Splitterpolygone, d.h. sehr kleiner Polygone, die sich aufgrund unterschiedlicher Maßstäbe und Datengrundlagen ergeben. Diese müssen mit GIS-Methoden in hydrologisch sinnvoller Weise nach der Verschneidung aggregiert werden. Durch die Verschneidungen ergeben sich Flächen, die als Elementarflächen bezeichnet werden. Die Aggregation dieser Elementarflächen anhand von hydrologischen Parametern erfolgt in geeigneter Weise in sog. Hydrotopen, d.h. Flächen, die aufgrund der Parameter ein einheitliches Verhalten aufweisen. Die Berechnung der Sickerwasserrate braucht dann nur noch für diese Hydrotopen durchgeführt zu werden.

Rasterbasierte Methoden sind in der Datenspeicherung zunächst sehr speicherintensiv. Die Datenverarbeitung ergibt jedoch keine Residualflächen von sehr geringer Größe. Grundsätzlich ergibt sich auch hier die Möglichkeit der Zusammenfassung zu Hydrotopen.

Das digitale Geländemodell – und damit die Eingangsparameter Geländegefälle und Grundwasserflurabstand – liegen i.d.R. als Rasterdaten vor. Sollen sie gemeinsam mit Polygondaten zum Boden und zur Flächennutzung polygonweise weiterverarbeitet werden, ist eine Klassifikation entsprechend der hydrologischen Kriterien notwendig.

Bei ebenfalls im Rasterformat vorliegenden Daten zu Landnutzung und Boden, wie sie z.B. aus der Geofernerkundung geliefert werden, ist eine Rasterdatenverarbeitung naheliegend. Sollen auch vektorbasierte Daten in die rasterbasierte Berechnung der Sickerwasserrate eingehen, ist eine Belegung der Rasterzellen mit den entsprechenden GIS-Methoden i.d.R. durchführbar. Hierbei sind jedoch die GIS-Methoden sehr genau auf ihre Einsatzmöglichkeit zu analysieren.

Aufgrund der vertikalen Ausrichtung der Modellierung gibt es keine Rahmenbedingungen für die horizontale Ausweisung des Modellgebiets. Die Diskretisierung richtet sich einerseits nach den verfügbaren Daten, muss aber andererseits auch die einzusetzenden Methoden berücksichtigen. So ist eine Auflösung in 1 m-Raster selbst dann nicht sinnvoll, wenn entsprechende Daten vorliegen, weil die Methoden für eine derartige Auflösung nicht geeignet sind. Auch die vertikale Erstreckung eines Modells richtet sich stark nach den Modellierungsmethoden. Meist wird jedoch die Bodenzone von etwa 2 m Mächtigkeit erfasst. Für die Modellierung tiefer gelegener Schichten werden die Modellierungssysteme der ungesättigten Zone eingesetzt.

Aus der Kombination von zeitabhängigen und ortsabhängigen Daten resultiert eine komplexe Datenstruktur, die mit GIS alleine meist nicht effizient verwaltet werden kann. Durch die Reduktion der Zeit-Daten, im vorliegenden Fall auf die Mittelwerte oder Jahreswerte für wenige Jahre, können Sickerwasserraten oder Grundwasserneubildungsraten als Attributdaten im GIS verwaltet werden.

3.2.2 Methoden zur Berechnung der Sickerwasserrate

Die Wahl der Methode hängt ganz wesentlich von den Eingangsparametern ab:

Die empirischen Modellierungssysteme sind mit GIS-Methoden vergleichsweise einfach zu parameterisieren. Die Modelle haben meist sehr kurze Laufzeiten. Wegen ihrer rein empirischen, wenn auch prozessorientierten Arbeitsweise sind diese Mo-

dellierungssysteme auf zeitliche Invarianz, d.h. auf mittlere Jahreswerte, ausgelegt. Ohne größere Komplikationen können jedoch zeitlich variante Jahreswerte berechnet werden, d.h. es werden die Jahressummen und –mittelwerte der Parameter für die entsprechenden Einzeljahre eingesetzt. Eine höhere zeitliche Auflösung als Jahreswerte ist sehr stark abhängig von der Möglichkeit, gerade die Landnutzungsparameter in einer adäquaten Zeitreihe implementieren zu können. So muss gerade das Pflanzenwachstum berücksichtigt werden, wenn höhere zeitliche Auflösungen als Jahreswerte berechnet werden sollen. Eine Methode ohne Berücksichtigung des Pflanzenwachstums, die daher nur eine Abschätzung tatsächlicher Sickerwasserraten liefern kann, ist in GOSSEL & WYCISK (2006) beschrieben.

Speichermodellierungssysteme arbeiten mit einer Diskretisierung in „Kompartimente“, d.h. Schichten, die als Speichergrößen implementiert werden. Über die Wasserhaushaltsgrößen wird der Austausch von Sickerwasser, kapillarem Aufstieg, Wassersättigung und Auffüllung des Speicherraums berechnet. Die Berücksichtigung von Landnutzung, Grundwasserflurabstand und Gefälle ist ähnlich wie bei den empirischen Modellen sehr anwendungsorientiert möglich. Daher sind die Eingangsparameter vergleichbar. Die Modellierungssysteme erlauben jedoch, verglichen mit den empirischen Modellierungssystemen, eine höhere zeitliche Auflösung, z.B. Monats- oder Tageswerte, da in ihnen auch zusätzliche Parameter für die Landnutzung berücksichtigt werden können. Auch die Bodeninformationen werden in beiden Systemen unterschiedlich aufgenommen: In Speichermodellierungssystemen ist die Aufteilung der Bodenzone in mehrere „Schichten“ möglich. Aus Sensitivitätsanalysen der Modellierungssysteme ergeben sich jedoch meist keine informationsadäquaten Differenzen zwischen den Ergebnissen einer höheren vertikalen Differenzierung und den Ergebnissen von Modellen mit einer sinnvoll aggregierten geringen Anzahl von Horizonten, sodass diese Informationen nur dann sinnvoll zu integrieren sind, wenn sie mit EDV-Methoden direkt aus dem geologischen Modell gewonnen werden können.

Die numerischen Modellierungssysteme, die auf physikalischen Gesetzmäßigkeiten aufbauen, sind auf eine Reihe sehr schwer zu gewinnender Eingangsparameter angewiesen. Die Stomatawiderstände von Pflanzen, der Blattflächenindex (Leaf Area Index, LAI), tatsächliche Wurzeltiefen u.ä. sind nur in sehr großen Maßstäben zu ermitteln und zeigen, dass die Landnutzungsparameter und Bodenparameter kaum erhoben und zuverlässig für größere Flächen und längere Zeiträume dem Modellierungssystem übergeben werden können. Eine räumlich differenzierte Berechnung der Sickerwasserrate oder gar der Grundwasserneubildungsrate ist mit diesen Methoden nur in Ausnahmefällen möglich. Die zeitliche Auflösung kann jedoch sehr hoch gewählt werden (z.B. Tageswerte). Sinnvolle Anwendungen physikalischer Modellierungssysteme ergeben sich weniger für die Sickerwassermodellierung als vielmehr für die Durchsickerung der ungesättigten Zone. Daher ist eine Trennung in Sickerwasser-Modellierungssysteme und Modellierungssysteme für die ungesättigte Zone notwendig.

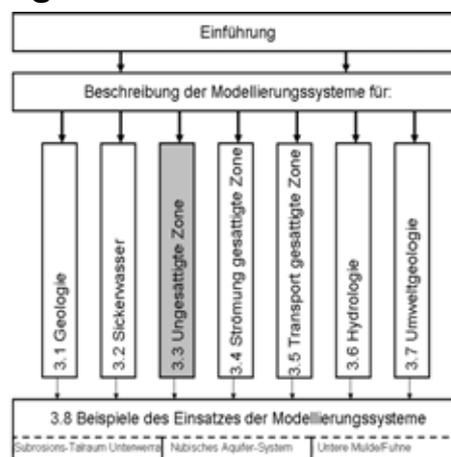
3.2.3 Ergebnisse der Sickerwassermodellierung

Die Sickerwassermodelle liefern als Ergebnis im Idealfall flächen- und zeitdifferenzierte Daten zum unterirdischen Abfluss aus der Bodenzone, die allgemein mit etwa 2 m Mächtigkeit angenommen wird. Diese Daten können meist ohne größeren Aufwand in einem GIS abgelegt und von dort aus anderen Modellierungssystemen, z.B. für die Berechnung des Wasserflusses durch die ungesättigte Zone, zur Verfügung gestellt werden. Die hierbei eingesetzten Techniken der Datenhaltung sind auf eine Reihe von Kopplungen zwischen statischen und dynamischen Daten anwendbar.

Eine Bewertung der Ergebnisse von Sickerwassermodellierungen ist deshalb schwierig, weil experimentelle Untersuchungen nur in vergleichsweise sehr kleinen räumlichen Ausschnitten durchgeführt werden können. Die Strukturgültigkeit ist zwar in allen drei Typen von Modellierungsansätzen grundsätzlich gegeben. Aber die üblichen Lysimeter sind nur wenige Quadratmeter groß und umfassen nur ausgewählte Landnutzungs- und Bodentypen. Großlysimeter, wie etwa in Eberswalde, und Naturlysimeter können wesentlich bessere Vergleichsdaten liefern. Häufig werden die Ergebnisse auch mit Abflussmessungen an Oberflächengewässern verglichen, was aufgrund der Schwierigkeiten bei der Trennung verschiedener Abflussarten nur bedingt zielführend ist. Gerade großräumige Sickerwassermodelle sind aus diesem Grunde sehr schwer zu kalibrieren. Die durchaus übliche Praxis, die Ergebnisse von Modellen, die mit verschiedenen Modellierungssystemen erstellt wurden, miteinander zu vergleichen, ist streng genommen zwar nicht zulässig, da die Ergebnisse nicht unabhängig voneinander gewonnen werden, ist aber dennoch einem unkalibrierten Zustand vorzuziehen.

3.3 Modellierungssysteme für die ungesättigte Zone

Die Modellierungssysteme für die ungesättigte Zone unterhalb der Bodenzone werden meist nicht in Betracht gezogen, weil diese Zone nicht sehr mächtig ist und in diesen Fällen eine direkte Übernahme der Ergebnisse der Sickerwassermodellierung als Grundwasserneubildung in der numerischen Grundwassermodellierung als plausibel angenommen wird. In der Tat ist dieses Vorgehen in den allermeisten Fällen gerechtfertigt, denn in der ungesättigten Zone findet lediglich eine Verzögerung und Vergleichmäßigung des Abflusses der berechneten Grundwasserneubildungsmenge statt.



Natürlich kann man auch die ungesättigte Zone durch statistische Mittel in die Sickerwassermodellierung mit einbeziehen oder dort anhängen, wie in JANKIEWICZ ET AL. (2005), SZILAGYI ET AL. (2003), CHERKAUER & ANSARI (2005) und NEUMANN (2005) beschrieben. Aber das ist nur in bestimmten Zusammenhängen sinnvoll.

Notwendig wird die Berechnung eines Modells für die ungesättigte Zone z.B. dann, wenn gering wasserdurchlässige Schichten über der gesättigten Zone den vertikalen Zutritt des Sickerwassers zum Grundwasser behindern. In diesem Fall ist mit einem Zwischenabfluss oder, wie in GOSSEL ET AL. (2001) beschrieben, schwebenden Grundwasser zu rechnen, was zu einer verminderten Grundwasserneubildung vertikal an dieser Lokalität und einer erhöhten Grundwasserneubildung an anderer Stelle führt. Für diese eher seltenen und komplexen Fälle ist folglich eine 3D-numerische Modellierung unabdingbar, da über die Strukturen der Geringleiter neben dem vertikalen Fluss auch ein horizontaler Fluss modelliert werden muss. Ähnliche Fälle sind in Tagebaugebieten gegeben, wo die Sümpfung zu großräumigen und tief reichenden Grundwasserabsenkungen führt.

Abbildung 18 verdeutlicht den Ablauf der Modellierung der ungesättigten Zone. Schon die Eingangsdaten zeigen die Komplexität der Aufgabe. Voraussetzung ist ein geologisches 3D-Modell, das für die ungesättigte Zone entsprechend der Zielstellung parameterisiert werden muss. Bei reinen Strömungsmodellen sind die Parameter bei weitem nicht so umfangreich wie bei Transportmodellen.

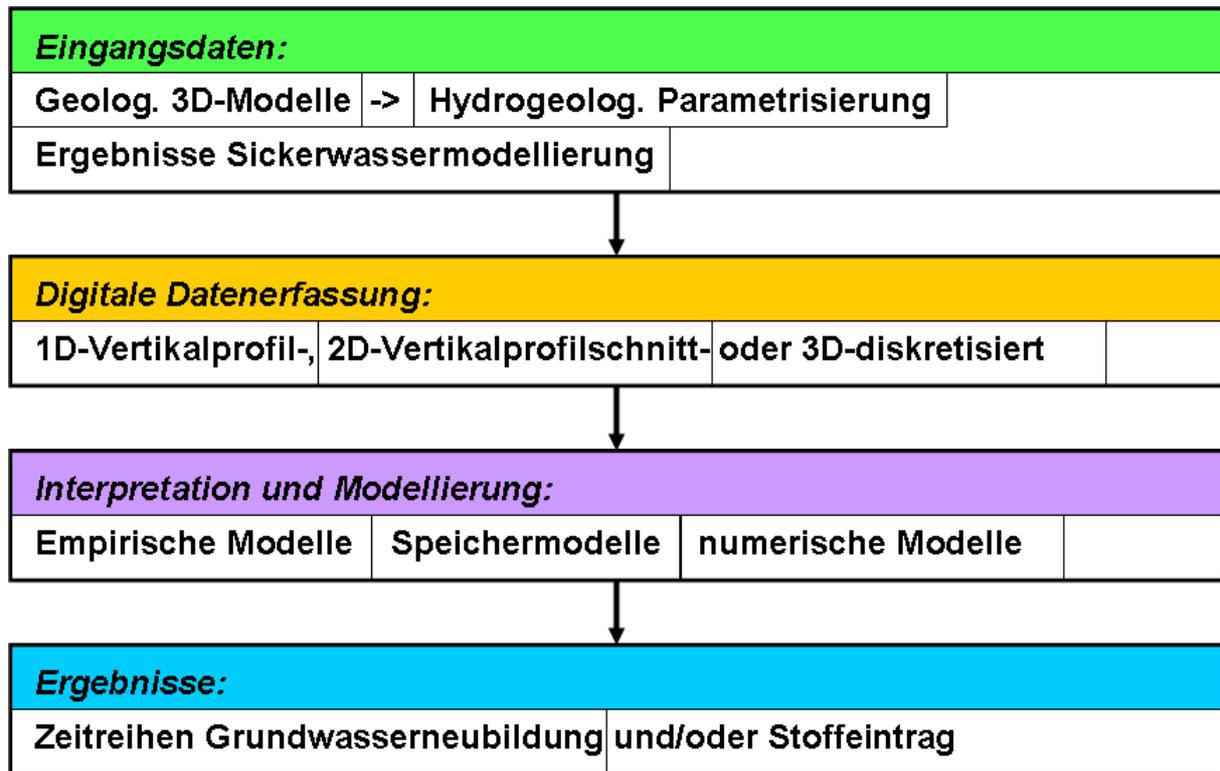


Abbildung 18: Modellierung ungesättigte Zone. Die vertikale Diskretisierung der geologischen Modelle reicht für die numerischen Methoden nicht aus, um konvergierende Modelle zu erzeugen. Die Erhöhung der Diskretisierung bringt in der 3D-Berechnung eine lineare Vervielfachung der horizontalen Auflösung mit sich.

3.3.1 Eingangsdaten für die Modellierung der ungesättigten Zone

Bei Vorliegen eines detaillierten dreidimensionalen geologischen Modells (und damit einer Modellkopplung) ist die Struktur eines numerischen Modells für die ungesättigte Zone bereits gegeben. Ansonsten gibt es für die horizontale Erstreckung des Modellgebiets aufgrund der weitgehend vertikalen Orientierung der Modellierung nur dann Einschränkungen, wenn aus dem geologischen Modell mit horizontalen Abflüssen (evtl. Zwischenabfluss) zu rechnen ist. Die vertikale Erstreckung ist mit der Definition der ungesättigten Zone vorgegeben und kann im Falle schwankender Grundwasseroberflächen eine Dynamik aufweisen. Problematisch ist die Parameterisierung für den ungesättigten Wasserfluss und –transport, da die hydraulische Durchlässigkeit von der Durchlässigkeit im gesättigten Fall und der Wassersättigung abhängig ist (MARSHALL ET AL. (1996)).

Bei den Eingangsdaten der numerischen Modellierung der ungesättigten Zone spielen neben den Parametern (hier: vertikale hydraulische Durchlässigkeit für die volle Wassersättigung und Porosität bei der Strömungsmodellierung und zusätzlich Diffusion, Dispersion, Adsorption und biol. Abbau bei der Transportmodellierung) und den Randbedingungen Sickerwassermenge und Lage der Grundwasseroberfläche auch die Anfangsbedingung der Wassersättigung eine wesentliche Rolle. Nach BRONSTERT ET AL. (2005) hat diese Sättigung mit Bodenwasser einen sehr langen Memory-Effekt, zumindest in globalen Klimamodellen (GCM). BLÖSCHL (1996) zeigt dies auch anhand von Modellen für kleine Einzugsgebiete.

Über die Gleichungen und Untersuchungsergebnisse von VAN GENUCHTEN (1980) kann eine Parameterisierung auch der Anfangsbedingungen anhand von Substratangaben vorgenommen werden, die natürlich nur erste Näherungswerte darstellen, deren Einfluss jedoch im Verlauf der Simulation schnell nachlässt.

Die Diskretisierung der ungesättigten Zone ist einerseits von dem geologischen Aufbau und andererseits von der Mächtigkeit der Bodenzone und der zeitlich variablen Lage der Grundwasseroberfläche abhängig. Bei einigen Modellierungsmethoden muss die Diskretisierung höher sein als die Auflösung der geologischen Schichten.

3.3.2 Methoden zur Berechnung des Grundwasserflusses in der ungesättigten Zone

Numerische Modellierungssysteme für die ungesättigte Zone sind meist eindimensional, da Wasserströmung und -transport wesentlich in vertikaler Richtung erfolgen. Grundlage aller numerischen Modellierungssysteme für die ungesättigte Zone ist die Richards-Gleichung, die meist mit den Methoden von van Genuchten und Mualem-van Genuchten (VAN GENUCHTEN (1980), VAN GENUCHTEN (1985), BOHNE ET AL. (1993), HOLZBECHER (1996)) parameterisiert wird (SYRING & KERSEBAUM (1988)). Damit sind diese Modellierungssysteme als Kombination aus analytischen und numerischen Methoden einzuordnen.

Wenn die ungesättigte Zone nicht parametrisch ausreichend beschrieben werden kann, ist eine statistische Implementierung eine adäquate Lösung. Hierbei wird vereinfachend anhand der Mächtigkeit der ungesättigten Zone eine zeitliche Verzögerung für den Eintrag des Sickerwassers angenommen. Dieses Verhalten trifft zwar nur zum Teil die ablaufenden Prozesse, kann aber als erste Näherung für viele Einsatzbereiche genügen. Typische Werte für die Sickerwassergeschwindigkeit liegen bei glazifluviatilen Sanden und relativ geringen Grundwasserflurabständen im Bereich von 1 m/d (GOSSEL 1999) für die Druckausbreitung/Strömung. Beim tatsächlichen Wassereintrag im Sinne eines Transportmodells muss mit sehr viel längeren Zeiträumen im Bereich von Monaten gerechnet werden. Genauere Daten können über synthetische Modellrechnungen mit eindimensionalen Modellierungssystemen ermittelt werden (SIMUNEK ET AL. (2005)). Hierbei zeigt sich, dass die rein statistische Auswertung von GOSSEL (1999) in der Realität nur für die in diesem Untersuchungsgebiet angetroffenen Mittel- bis Feinsande gilt. Sättigungskurven für verschiedene andere lithologische Abfolgen in einem eindimensionalen Profil können zur Auswertung der vertikalen Verlagerungsgeschwindigkeiten des Sickerwassers in der ungesättigten Zone unterhalb der Bodenzone genutzt werden.

Eine verbesserte Simulationsmöglichkeit ergibt sich über die Erweiterungen von Bodenwasserhaushaltsmodellen („Bucket“-Modell), s. Kap. 3.2. Hierbei muss für jede Schicht ein Speicher eingefügt werden, dessen Füllung bis zur Feldkapazität reicht. Darüber hinaus zutretendes Wasser fließt in den nächst tiefer liegenden Speicher.

Die instationäre numerische Modellierung der Wasserbewegung in der ungesättigten Zone nach der Richards-Gleichung wird in einem dreidimensionalen Modell sehr schnell instabil. In Bereichen mit mächtigen ungesättigten Zonen (> 10 m) nimmt die Wassersättigung aufgrund der im Verhältnis zum Gesamt-Porenraum der ungesättigten Zone geringen Sickerwassermenge sehr stark ab. Hierdurch fließt ab einem gewissen, von Durchlässigkeiten, Anfangsbedingungen und Sickerwassermengen abhängigen Zeitpunkt praktisch kein Wasser mehr durch diese Zone. Die Durchlässigkeiten, die nach der Richards-Gleichung von der Wassersättigung abhängig sind, sind so gering, dass keine Wasserbewegung mehr stattfindet. Die Tatsache, dass

auch in solchen Gebieten mit großen Grundwasserflurabständen eine Grundwasserneubildung registriert wird, ist offensichtlich auf bevorzugte Fließwege (preferential flow) zurückzuführen, woraus resultiert, dass diese Fließwege eine höhere Wassersättigung und damit eine höhere Durchlässigkeit erhalten. In der Rückkopplung bedeutet dies, dass in den nicht durchflossenen Bereichen der Wasserfluss unterbunden wird und das Wasser über die bevorzugten Fließwege abfließen muss. Innerhalb dieser bevorzugten Fließwege kann aufgrund der weitgehenden Wassersättigung annähernd mit der gesättigten hydraulischen Durchlässigkeit gerechnet werden. Eine Verzögerung findet allerdings durch die weiteren Fließwege des Wassers statt. Diese Prozesse können allenfalls in kleinräumigen Modellen nachgebildet werden. Für die in den Beispielen betrachteten Skalen ist der Einsatz eines stark vereinfachenden Modells daher angebracht.

Für den Transport von Stoffen in der ungesättigten Zone wird zunächst die Wasserbewegung zugrunde gelegt. Darauf aufbauend werden insbesondere die Sorption und der biologische Abbau modelliert. Beim biologischen Abbau werden jedoch meist keine Reaktionen verschiedener Wasserinhaltsstoffe erfasst. Gleichgewichtsreaktionen zwischen Gestein und Wasserinhaltsstoffen werden meist ebenso wenig berücksichtigt wie bevorzugte Fließwege oder eine Diffusion in die Gasphase.

3.3.3 Ergebnisse der Modellierung der Wasserströmung und des – transports in der ungesättigten Zone

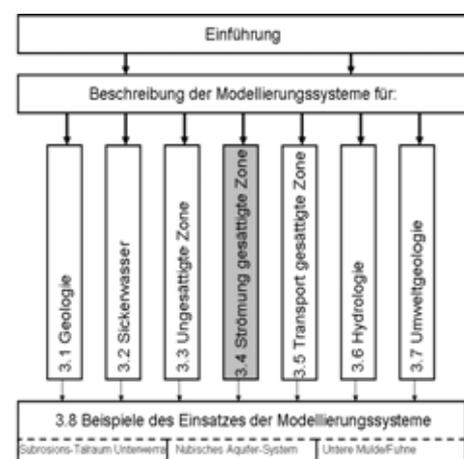
Bei der Nutzung eines Bodenwasserspeichermodells ist das Modellierungsergebnis sehr einfach: Durch die Durchsickerung der ungesättigten Zone werden im Wesentlichen Zeitverzögerungen bzw. Verschiebungen des Austrags stattfinden.

Bei Modellen, die auf der Grundlage der Richards-Gleichung arbeiten, werden stationär oder instationär die Wassergehalte für die einzelnen diskreten Elemente berechnet. Hieraus können die durch die ungesättigte Zone gesickerten Wassermengen erfasst werden. Diese Modellergebnisse bestehen nicht mehr nur aus einer Zeitverzögerung oder –verschiebung, sondern auch in einer stärkeren Veränderung der Austragskurve, da sich sogar die Parameter (z.B. auch die hydraulischen Durchlässigkeiten) während der Simulation verändern.

Ein Beispiel für die Bedeutung von Prozessen in der ungesättigten Zone geben RONEN & SOREK (2005).

3.4 Strömungsmodellierungssysteme für die gesättigte Zone

Im Bereich (des Kompartiments) der Grundwasser gesättigten Zone sind Strömungsmodellierungssysteme schon in den 1960er und 1970er Jahren entwickelt worden. Die noch älteren analytischen Modellierungssysteme, beispielsweise zur Pumpversuchsauswertung, lieferten zwar konkrete physikalische Parameter, deren Einsatz war jedoch auf wenige Spezialfälle reduziert. Die ersten generellen Modellierungswerkzeuge entstanden durch die Umsetzung mit Hilfe elektrischer und elektronischer Medien. Zunächst als Analog-Modelle mit Widerstandspapieren implementiert, die selbstverständlich noch keine Möglichkeit boten, zu einem Modellierungswerkzeug für vielfältige Modelle weiterentwickelt zu werden, wurden in den



späten 1970er Jahren die Computersysteme so mächtig, dass eine digitale numerische Bearbeitung und die Generalisierung zu Modellierungswerkzeugen möglich wurde. Heute dominieren diese numerischen Modellierungssysteme, die von der Weiterentwicklung der Visualisierungsmöglichkeiten sehr profitiert haben.

Ebenso wie die Sickerwassermodellierung ist die numerische Grundwassermodellierung zusätzlich zu den geologischen und hydrogeologischen Strukturen und Parametern auf hydrologische Größen angewiesen. Sie betreffen insbesondere die inneren und äußeren Randbedingungen und die Grundwasserneubildung. Die gesamte Vorbereitung wird oft unter dem Begriff „Conceptual Hydrogeological Model“ zusammengefasst. Damit ergibt sich hier die Notwendigkeit vielfältiger Modellkopplungen. Die Schnittstellen hierzu sind in Kap. 4 detailliert beschrieben.

Die Modellierungswerkzeuge enthalten meist eine Gliederung in Prä- und Postprozessor zur visuellen Aufbereitung von Eingangs- und Ergebnisdaten sowie den eigentlichen Rechenkern.

Der in Abbildung 19 dargestellte Ablauf der numerischen Grundwassermodellierung zeigt einen sehr komplexen Verlauf, der bereits die Abstraktion eines geologischen Modells durch die hydrogeologische Parameterisierung voraussetzt. Die Ergebnisse sind ebenfalls sehr vielfältig nutzbar. Für den gesamten Modellierungsprozess bieten sich GIS für die Datenbereitstellung an. Die in vielen Modellierungswerkzeugen implementierten Prä- und Postprozessoren eignen sich meist als Schnittstellen zur Anbindung von GIS.

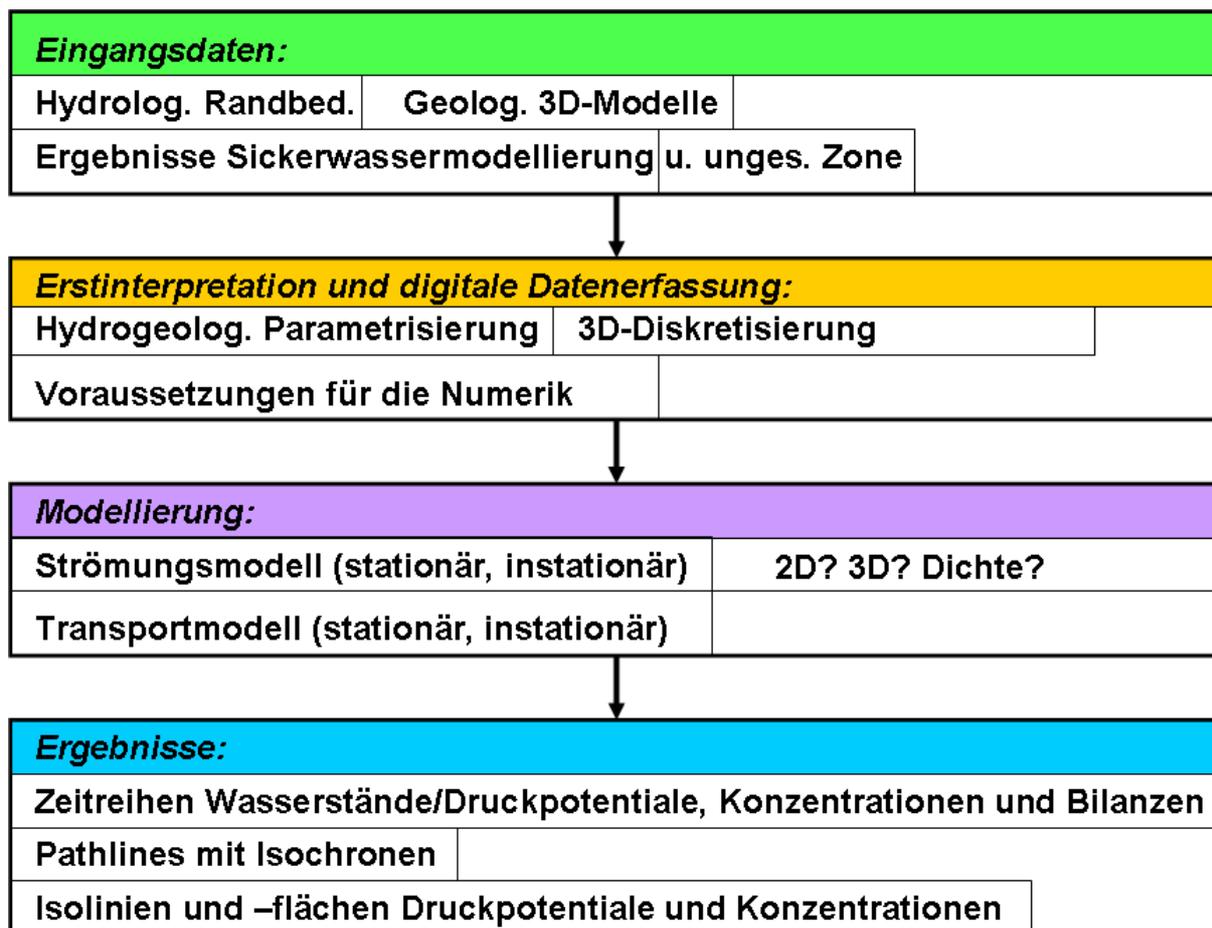


Abbildung 19: Modellierung der gesättigten Zone. Die Eingangsdaten der Modellierung müssen meist erst gesondert aufbereitet werden, um die Methoden nutzen zu können.

3.4.1 Eingangsdaten der Strömungsmodellierungssysteme für die gesättigte Zone

Die Eingangsdaten der numerischen Grundwassermodellierung sind zunächst davon abhängig, ob das Modell stationär oder instationär berechnet werden soll.

Der einfachste Fall der stationären Strömungsberechnung benötigt als Eingangsdaten Strukturen und Parameter, die idealerweise aus einem geologischen Modell abgeleitet werden können (s. Kap. 3). Wesentlich für die horizontale Dimensionierung eines numerischen Grundwasserströmungsmodells sind jedoch die Randbedingungen, die meist aus einem hydrologischen Konzept abgeleitet werden müssen oder – seltener – aus geologischen Strukturen resultieren. In der dritten Dimension dominiert dagegen die Geologie über den Schichten- bzw. Grundwasserleiter- und – geringleiteraufbau die Diskretisierung des Modells. Die zeitliche Dimension wird entsprechend des statischen Charakters des geologischen Modells von den dynamischen hydrologischen Größen (Randbedingungen, z.B. Wasserstände der Oberflächengewässer, oder Grundwasserneubildung) sowie technischen Größen (z.B. Grundwasserentnahmen) bestimmt.

Die Strukturen eines numerischen Grundwassermodells können auf vielfältige Weise generiert werden. HUBERT (in Vorbereitung) gibt eine ausführliche Darstellung und Auswertung der eingesetzten Methoden.

Die hydrogeologischen Parameter werden im Wesentlichen aus der Lithologie abgeleitet, oder es werden Verteilungen aus diskreten Messungen (z.B. Pumpversuchsauswertungen oder Slug & Bail Tests) berechnet. Bei der Ableitung aus lithologischen Beschreibungen, z.B. der Schichtenverzeichnisse von Bohrungen, empfiehlt sich eine vorläufige Interpolation auf der Basis von Indizes. Bei der Kalibrierung des Modells (s. Kap. 4) kann dann den Indizes ein leicht veränderter Wert zugewiesen und die Interpolation auf dieser Basis erneut durchgeführt werden. Zu beachten ist bei der Interpolation auch das Verhalten der verschiedenen Parameter: Hydraulische Durchlässigkeiten sollten z.B. meist (nach Prüfung auf eine Schiefe in der Verteilung) in logarithmierter Form interpoliert werden. Porositäten werden in linearer Form interpoliert, wobei hier für die Berücksichtigung der Tiefenabhängigkeit empirisch ermittelte Gesetzmäßigkeiten zugrunde gelegt werden können. Die Grundwasserneubildung kann nur zeitlich interpoliert werden, eine räumliche Interpolation, z.B. von Lysimeterdaten, ist sinnlos, da die in Kap. 3.2 dargestellten Abhängigkeiten von Landnutzung, Boden und Grundwasserflurabstand berücksichtigt werden müssen. Datentechnisch ergibt sich die Schwierigkeit, dass die Ganglinie die mittlere tägliche Neubildung für einen ganzen Monat wiedergibt und entsprechend bei einer Kopplung umgesetzt werden muss. Die Stellung der Grundwasserneubildung als Parameter ist nicht eindeutig, denn aufgrund der bei instationären Modellen möglichen Zeitabhängigkeit wird sie bei einigen Modellierungswerkzeugen als Randbedingung geführt.

Die Randbedingungen, die in instationären Modellen meist zeitabhängig implementiert werden, sind sehr unterschiedlich zu behandeln: Bei vorgegebenen Wasserständen, z.B. an Oberflächengewässern, sind lineare Interpolationen entlang der Gewässer vorzunehmen und andererseits die zeitliche Ganglinie zu berücksichtigen. Hier können einfache zeitliche Interpolationsmethoden (anders als bei der Grundwasserneubildung) eingesetzt werden. Wasserscheiden können ebenfalls wesentliche Randbedingungen sein, wenn sie stabil sind. Geologische Strukturen, wie z.B. Grundgebirgsausbisse, sind nur in wenigen Modellen nutzbar (z.B. GOSSEL ET AL.

2004). Wie in Kap. 3.8.1 sowie LÄHNE (in Vorbereitung) beschrieben, können Festgesteinsränder nicht in jedem Fall als Randbedingung dienen.

Sowohl Parameter als auch Rand- und Anfangsbedingungen der Modelle können GIS-gestützt erfasst und verarbeitet werden. GOSSEL ET AL. (2004) zeigen auf, dass hierbei nicht nur reine GIS-Funktionen, wie z.B. das räumliche Datenbankmanagement großer Datenmengen eingesetzt werden, sondern insbesondere noch die randlich der Kernfunktionen des GIS liegenden Interpolationsmethoden, Kontrollfunktionen räumlicher Datensätze und die Datenaustauschmöglichkeiten. Problematisch wird lediglich die Handhabung echter 3D-Daten, die möglichst geologischen Modellierungswerkzeugen vorbehalten bleiben sollte, und zeitvarianter Daten, wie z.B. der Grundwasserneubildung. Bei beiden kann man mit Hilfe eines durchdachten Datenmanagements auch im GIS weiterarbeiten. Aber es werden zusätzliche Datenstrukturen notwendig, die nicht originär in GIS vorhanden sind.

3.4.2 Methoden der Modellierungssysteme

Grundlage der numerischen Grundwasserströmungsmodellierung sind die Kontinuitätsgleichung und die Darcy-Gleichung. Durch die Kombination beider ergibt sich eine partielle Differentialgleichung, die die Berechnung von Grundwasserständen in einem porösen Medium erlaubt.

Zur Lösung der partiellen Differentialgleichung sind die numerischen Finite-Differenzen- (FD) und Finite-Elemente- (FE) Methoden am weitesten verbreitet. In ihnen werden Raum und Zeit so diskretisiert, dass für jedes der Elemente ein einheitlicher Datensatz räumlich wie zeitlich konstanter Werte entsteht (Finite-Volumen-Methoden sind bei weitem nicht so weit verbreitet wie FD- und FE-Methoden). Durch die Diskretisierung werden die Differentialgleichungen linearisiert, und dadurch sind diese Verfahren eigentlich nur Näherungsverfahren. Die Diskretisierung kann bei aktuellen Modellierungswerkzeugen und Computerkapazitäten jedoch so fein gewählt werden, dass sich die Vorgänge quasi-kontinuierlich abbilden lassen. Ausführliche Darstellungen zur Generierung von Modellierungswerkzeugen aus den beschriebenen Modellierungssystemen finden sich z.B. in DIERSCH (1984) und KINZELBACH (1986) sowie MCDONALD & HARBAUGH (1988). Die Diskretisierung in horizontaler Richtung erfolgt in Rechtecke, unregelmäßige Vierecke oder Dreiecke. In vertikaler Richtung arbeiten alle Modellierungswerkzeuge mit durchgehend im gesamten Modellgebiet ausgehaltenen „Schichten“ („Layers“ oder „Slices“), sodass bei dreidimensionalen Modellen Prismen oder Quader entstehen. Diese Strukturierung erleichtert zwar die Übernahme von Grenzflächen durch die einfache Wertübertragung von TINs (triangular irregular networks) oder GRIDs (regelmäßigen, rechteckigen, meist quadratischen Rastern), ist für die Übernahme von nicht vollständig im Gebiet vertretenen geologischen Einheiten jedoch hinderlich.

Die Geometrie der Elemente kann das Verhalten des Modells erheblich beeinflussen. Bei Dreiecksnetzen sollten aus numerischen Gründen möglichst wenige Dreiecke Winkel wesentlich größer als 90° aufweisen, da die Modelle nicht gut konvergieren. Für alle numerischen Modellierungssysteme gilt, dass für die Zeit- und Raumdiskretisierung Maximalgrößen der Distanzen zu ermitteln sind (Courant- und Peclet-Zahl), damit keine Divergenzen, insbesondere bei einer auf einem Strömungsmodell aufsetzenden Transportmodellierung, auftreten. Bezüglich der vertikalen Diskretisierung muss darauf hingewiesen werden, dass zu geringe „Schichtmächtigkeiten“ zu numerischen Divergenzen führen.

Sehr genau analysiert werden müssen auch interne Algorithmen. Beispielsweise führt die Mittelung von Durchlässigkeitsbeiwerten zwischen den Nachbarzellen über das arithmetische Mittel zu völlig anderen Ergebnissen als die Mittelung über das geometrische Mittel. Bei arithmetischer Mittelwertbildung werden gering durchlässige Zellen durch die Mittelung besser durchlässig, während die geometrische Mittelung zu geringer durchlässigen Bereichen neigt. Dies macht sich weniger in horizontaler Richtung bemerkbar, da dort die Diskretisierung nur leicht erhöht werden muss. In vertikaler Richtung führt eine höhere Diskretisierung dagegen zu sehr stark erhöhten Elementzahlen.

Die Reduzierung der meisten Strömungsmodellierungswerkzeuge auf die gesättigte Zone ist bei instationären Modellen mit ungespannten Grundwasserleitern problematisch. Sollten die obersten Zellen trocken fallen, ist eine „Wiedervernässung“ aus numerischen Gründen oft nicht möglich. Dies führt zu geringfügigen Differenzen gegenüber Modellen, bei denen diese Probleme durch geeignete Vermeidungsstrategien umgangen werden.

3.4.3 Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung

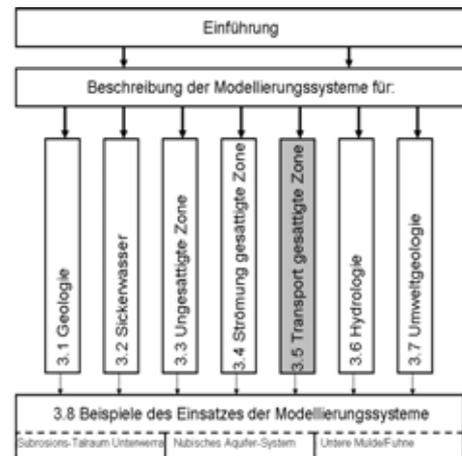
Die numerischen Grundwassermodelle werden für sehr unterschiedliche Aufgabenstellungen benötigt. Daher sind auch die Ergebnisse sehr vielfältig. Reine Strömungsmodelle (stationär oder instationär) werden meist für Wasserhaushaltsuntersuchungen bzw. für geplante Eingriffe in den Wasserhaushalt erstellt, während für qualitative Fragestellungen Transportmodelle benötigt werden. Da mit Hilfe des Modellierungssystems für jede Zelle bzw. für jedes Element oder für jeden Knoten Wasserbilanzen berechnet werden, ist eine Bilanzierung für das Gesamtgebiet oder Teile davon in jedem Werkzeug implementiert. Da für die Berechnung der Bilanzen die Wasserstände der Nachbarzellen notwendig sind, ist auch diese Größe – bei einem dreidimensionalen Modell auch für die einzelnen Modellschichten – als Ergebnis zu nutzen.

Auf der Grundlage der Gradienten zwischen den einzelnen Zellen lassen sich auch Pathlines berechnen. Die deutschen Begriffe Stromlinien und Bahnlinien treffen hier nicht zu, denn die Berechnung von Stromlinien erfolgt lediglich auf der Basis der Isohypsen (was nur in einem 2D-Modell mit den Pathlines vergleichbar ist). Die Berechnung der Bahnlinien ist deshalb nicht möglich, weil den Modellierungssystemen ein Kontinuumsansatz zugrunde liegt, der innerhalb einer Zelle (bzw. eines Elements) die Parameter als konstant voraussetzt. Die Aufteilung in „Poren“ und „Gesteinskorn“ ist somit nicht möglich. Genauer definiert werden müsste eine solche Pathline also mit der Bewegungsbahn eines Repräsentativen Elementarvolumens (REV). In dreidimensionalen Grundwasserströmungsmodellen können diese Pathlines für genau einen Strömungszustand dreidimensional berechnet werden. Instationäre Pathlines gibt es also nur in dem Sinne, dass neben dem instationären Strömungsmodell ein Transportmodell ohne zusätzliche Transportparameter berechnet und dadurch die Bewegung eines REV beschrieben wird.

Für die Darstellung der Ergebnisse scheinen GIS zunächst gut geeignet zu sein, da sie sowohl die notwendigen Interpolationsmethoden und räumlichen Bezugssysteme als auch die 2D-Visualisierungsmöglichkeiten in Form von Kartendarstellungen mitbringen. Für 3D-Darstellungen, z.B. von 3D-Stromlinien sowie 4D-Darstellungen des Ausbreitungsverhaltens von Grundwasserspiegelabsenkungen oder –anstiegen, sind GIS jedoch i.d.R. ungeeignet. Lediglich einige wenige wissenschaftliche Spezialsysteme sind zu einem solchen Datenhandling fähig.

3.5 Transportmodellierungssysteme für die gesättigte Zone

Für die gesättigte Zone sind neben den oben beschriebenen Strömungs- auch an sie gekoppelte Transportmodellierungssysteme verfügbar. Diese Systeme sind in der Lage, nicht nur advektiven Transport zu berechnen, sondern auch Diffusion, Dispersion, Adsorption und Abbau (biologischer oder radioaktiver Zerfall, über Halbwertszeiten realisiert) zu berücksichtigen. Diese Prozesse führen zu einer sehr komplexen Datenbasis, die zudem nicht nur räumliche Abhängigkeiten, sondern auch Maßstabsabhängigkeiten zeigt.



Die Ziele der Transportmodellierung für die gesättigte Zone sind sehr weitreichend – von der Gefährdungsabschätzung und Bewertung von Kontaminationen im Altlastenbereich über die Verweilzeitenberechnung im Zustrom von Grundwasserfassungen bis hin zu prognostischen Berechnungen, z.B. im Zuge von Umweltverträglichkeitsuntersuchungen.

Stationäre oder instationäre Transportmodelle können dabei an stationäre oder instationäre Strömungsmodelle gekoppelt werden. Lediglich die Kopplung eines instationären Strömungs- mit einem stationären Transportmodell ist nicht sinnvoll.

Die Eingangsparameter numerischer Transportmodelle können, wie oben angedeutet, sehr vielfältig sein. Während die Diffusion nur temperatur- und stoffabhängig zu betrachten ist – i.d.R. liegen im Grundwasser so geringe Konzentrationen vor, dass es zu keinen Beeinflussungen der Diffusion durch andere Stoffe kommt, und die Temperatur des Grundwassers ist meist ebenfalls konstant – sind die Parameter Dispersion, Adsorption und Abbau meist sehr komplex und nicht experimentell ermittelbar. Damit steht die Datengrundlage für konkrete Transportmodellierungen im scharfen Kontrast zu der Vielfalt von Zielen.

Bei der Betrachtung der Dispersion werden zunächst die korngerüstbedingte Dispersion und die Makrodispersion unterschieden (KINZELBACH (1987)). Die Makrodispersion ist sehr stark skalenabhängig, d.h. bei einem lokalen Modellgebiet und hoher räumlicher Auflösung der Parameter ist die Makrodispersion gering, bei großen Modellgebieten und geringer Auflösung hoch. Entsprechend sind die Möglichkeiten einer experimentellen Bestimmung der Dispersion: Die korngerüstbedingte Dispersion kann über geeignete Pumpversuche oder ein Langzeitmonitoring erfasst werden. Die Makrodispersion, die sich insbesondere durch die Variabilität von Durchlässigkeiten innerhalb einer Modellschicht ergibt, kann jedoch meist nur abgeschätzt werden.

Die Sorption von Stoffen, die sich in einer Retardation auswirkt, kann demgegenüber meist als relativ konstant innerhalb einer Modellschicht angenommen werden. Ausnahmen bilden hier Schichten, in denen sehr stark wechselnde Tongehalte festgestellt werden. Die experimentelle Bestimmung dieses Parameters ist meist relativ einfach im Labormaßstab oder über spezielle Pumpversuche möglich.

Der Abbau von Stoffen wird in den meisten numerischen Modellierungssystemen wie der Abbau eines radioaktiven Stoffes über seine Halbwertszeit beschrieben. Problematisch ist hierbei die Abhängigkeit des biologischen Abbaus von der Verfügbarkeit anderer gelöster Stoffe, insbesondere von Oxidationsmitteln (z.B. O_2 , NO_3^- , SO_4^{2-}).

Diese Abhängigkeit kann mit dem Ansatz einer Halbwertszeit nicht erfasst, sondern muss über Modellierungssysteme für chemische Gleichgewichtsreaktionen gelöst werden. Einige Modellierungswerkzeuge bieten hierfür entsprechende Schnittstellen an (s. Kap. 3).

Die theoretischen Grundlagen und Methoden der Transportmodellierung sind in DIERSCH (1984) sowie KINZELBACH (1987) ausführlich beschrieben. Bei der praktischen Modellierung erweisen sich die Transportmodelle als empfindlich gegenüber komplizierten Geometrien und gering auflösenden Diskretisierungen. Für die räumliche Diskretisierung ist die Peclet-Zahl einzuhalten, um eine scheinbare Dispersion, die auf der näherungsweisen Berechnung mit steilen Konzentrationsgradienten beruht, zu verhindern. Für die zeitliche Diskretisierung gilt gleiches, was über die Courant-Zahl geprüft werden kann.

Die Ergebnisse der Transportmodellierung können im 2D-Fall mit GIS visualisiert werden. Für 3D- und 4D-Darstellungen, z.B. Isoflächen einer Konzentration, im instationären Fall mit einer zeitlichen Komponente, können GIS meist nicht genutzt werden. Hier sind die Fähigkeiten der Postprozessoren der Modellierungswerkzeuge gefragt, um entsprechende animierte Filmsequenzen zu erstellen.

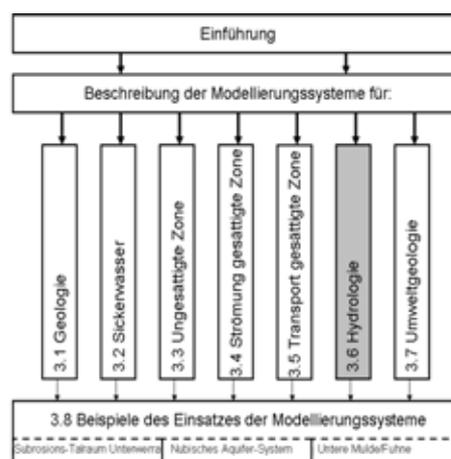
3.6 Hydrologische Modellierungssysteme: Atmosphärischer Eintrag und Oberflächenwassergerinne-Modellierungssysteme

Bei der Betrachtung hydrologischer Modellierungssysteme sind Differenzierungen vorzunehmen, die weiter reichen als bei geologischen oder hydrogeologischen Modellierungssystemen. Die Palette der Modellierungssysteme ist wegen der Breite der Aufgabenstellungen und der betrachteten Kompartimente größer:

Klassische hydrologische Modellierungssysteme, insbesondere Einzugsgebietsmodelle, sind im Zusammenhang der hydrogeologischen Modellierung nur von randlichem Interesse. Es sind meist statistische Modellierungssysteme, die entweder direkt das Niederschlags-Abflussverhalten eines gesamten Einzugsgebiets oder hydrologische Teilaspekte, wie z.B. Schneeschmelze, Reliefabhängigkeit des Niederschlags oder den Abfluss in einem Gerinne, modellieren. Die statistische Methode der Ganglinienseparation und mit ihr die Bestimmung des Basisabflusses hilft bei der Kalibrierung von Grundwasserneubildung.

Es gibt jedoch auch Systeme, die mit Modellkopplungen unterschiedlicher Art arbeiten und daher in ihrem systematischen Aufbau hier von Interesse sind. Bei diesen aus mehreren Teilsystemen zusammengesetzten Modellierungswerkzeugen werden auch die Anteile deterministischer und statischer Modellierungskonzepte in unterschiedlichem Maße eingesetzt.

Ganz wesentlich bei der Beschäftigung mit hydrologischen Modellierungssystemen ist auch der Betrachtungsmaßstab. Beispielsweise ist die Abhängigkeit der Niederschlagshöhe von der topografischen Höhe und der Exposition zur vorherrschenden Windrichtung statistisch signifikant zu einem Modell verarbeitet worden (HUTCHINSON (1995), HUTCHINSON (1998)). Diese groß- und mittelmaßstäblichen Phänomene sind in globalen Klimamodellen oder Wasserhaushaltsmodellen (DÖLL ET AL. (1998)) nicht



reproduzierbar. Demgegenüber macht BERNARD (2005) deutlich, wie kleinräumige Modelle (maximal klein-regionaler Maßstab) durch GIS-Systeme im Pre- und Postprocessing unterstützt werden. Probleme bereiten jedoch die mangelnde 3D- und 4D-Unterstützung der GIS-Systeme, die auch schon für die numerische Grundwassermodellierung dargestellt wurden. Auf der anderen Seite sind die Fähigkeiten verschiedener GIS sehr unterschiedlich. Insbesondere bieten OpenSource GIS neben ihren meist schon weiter als die kommerziellen Standard-GIS gehenden Modellierungswerkzeugen die Möglichkeit einer Erweiterung durch den Nutzer.

FÜRST (2004) nutzt für hydrologische und wasserwirtschaftliche Modellierungen insbesondere Geoinformationssysteme und erörtert ausführlich die Unterschiede sowie Vor- und Nachteile von vektorbasierten und rasterbasierten GIS. In der Praxis dürften Mischformen und häufige Wechsel von Formaten eine wesentliche Rolle spielen, wie auch in den Beispielen gezeigt. Räumliche Variabilitäten hydrologischer Modelle können nach FÜRST (2004) durch den Einsatz von GIS besser berücksichtigt werden als mit den meisten originären Modellierungssystemen. Gering dimensionale Modellierungssysteme (z.B. nulldimensionale Einzugsgebietsmodelle und eindimensionale Rohr- oder Gewässermodelle) spielen jedoch immer noch eine wesentliche Rolle bei der hydrologischen Modellierung. Für sie stellt die Nutzung von GIS keine Verbesserung dar. FÜRST (2004) klassifiziert die Modellierungssysteme für Abflussanalysen und -simulationen folgendermaßen:

- Räumlich aggregierte Modellierungssysteme zur Hochwasservorhersage (z.B. auf der Grundlage der Einheitsganglinienverfahren).
- Räumlich halb-verteilte Modellierungssysteme für die großräumige Einzugsgebietsmodellierung.
- Räumlich verteilte, prozessorientierte Abflussmodellierungssysteme.

Diese Modellierungssysteme werden in unterschiedlicher Weise durch GIS unterstützt.

Räumlich aggregierte Modellierungssysteme können insbesondere durch das Höhenmodell des Gebiets und Landnutzungs-abhängige Parameter wie die Rauigkeit unterstützt werden. Hierfür sind in manchen GIS, wie z.B. bei der Nutzung der Erweiterung Spatial Analyst in ArcView 3.x, bereits Routinen vorhanden. Bei den räumlich aggregierten Modellierungssystemen werden statistische Methoden nicht nur bei der räumlichen Aggregation eingesetzt, sondern sind auch der wesentliche Bestandteil des Modellierungskonzeptes.

Die Abgrenzung räumlich halb-verteilter Modellierungssysteme von aggregierten bzw. räumlich verteilten Abflussmodellierungssystemen fällt oftmals schwer, da die Übergänge fließend sind und unterschiedliche Kompartimente in unterschiedlicher Weise GIS-Eingangsdaten berücksichtigen können. Charakteristisch für diese Modellierungssysteme ist die Aufteilung des Raumes in verschiedene Kompartimente (Schneedecke, Interzeption an der Pflanzenoberfläche, verschiedene Bodenkompartimente), die in aller Regel durch Speicherfunktionen implementiert werden. Fläche und Volumina dieser Speichergrößen können mit Unterstützung durch ein GIS räumlich diskretisiert in die Berechnungsverfahren eingehen. Hierbei werden Konzepte, wie das der „hydrologisch ähnlichen Gebiete“ (hydrological response units, HRU) oder Hydrotöpfe, genutzt, wobei Gebiete mit gleicher hydrologischer Wirkung bezüglich eines Kompartiments als sich gleich verhaltend zusammengefasst werden. Damit wird der Rechenaufwand reduziert (s. Kapitel 3.2). Räumlich halb-verteilte Modellierungssysteme stellen somit Implementierungen klassischer stochastischer Modellie-

Modellierungssysteme mit unterschiedlichen Anteilen statistischer und deterministischer Modellierungskonzepte dar.

Räumlich verteilte Modellierungssysteme gehen bei der systematischen Analyse und Umsetzung hydrologischer Konzepte weiter in Richtung einer deterministischen, physikalisch basierten Modellkonzeption. Sie berücksichtigen neben den reinen Wasserhaushaltsgrößen auch die durch Abflussprozesse induzierten Erosions- und Sedimentationsprozesse. Aufgrund dieser Komplexität der Prozessmodellierung und der für sie notwendigen hoch aufgelösten Daten ist die Anwendung meist auf sehr kleine, ausgewählte Gebiete beschränkt.

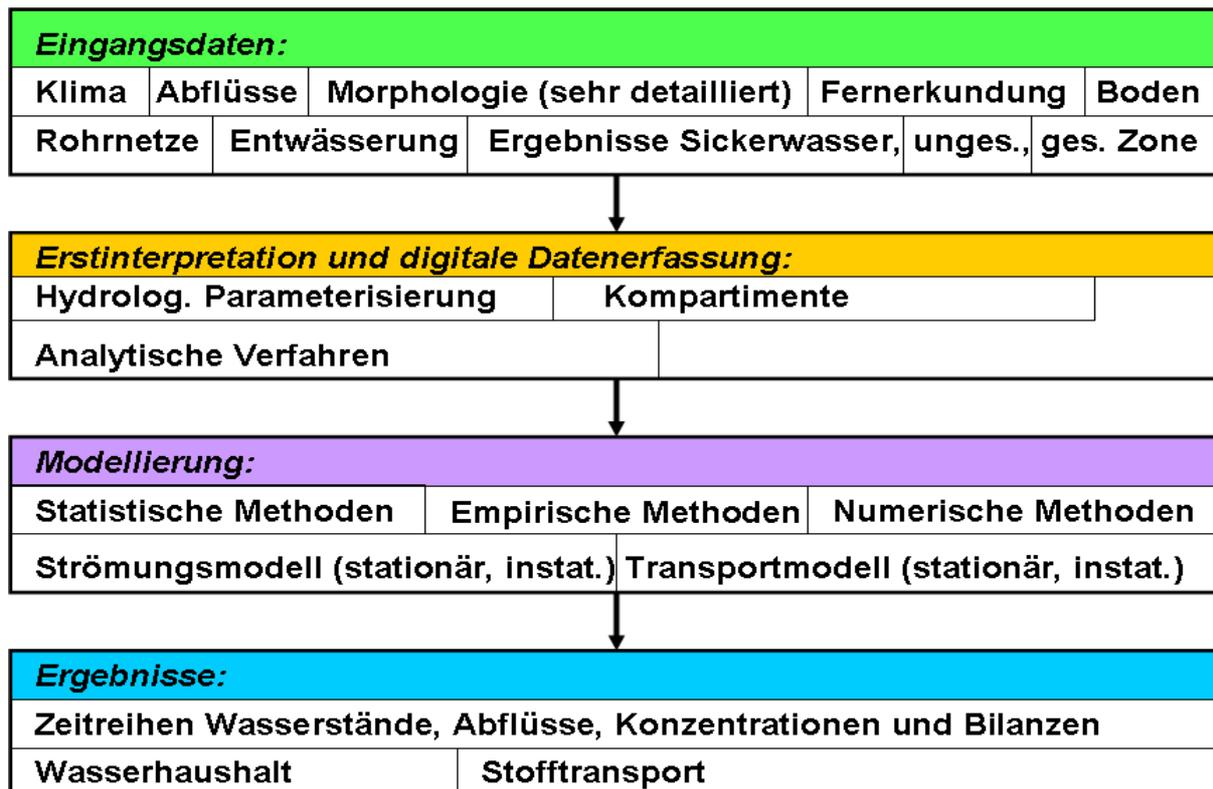


Abbildung 20: Hydrologische Modellierungen. Das Spektrum der Modellierungssysteme ist sehr groß und kann hier nur in einer Auswahl wiedergegeben werden. Entsprechend verhält es sich mit den Eingangsdaten und Ergebnissen.

Für klimatische Langzeituntersuchungen werden nach VALDES (2005) vier Arten von Modellierungssystemen eingesetzt:

- Box-Modelle, die im Wesentlichen statistisch arbeiten,
- Energie-Bilanz Modelle, die im Kern auf der Modellierung von energetischen Prozessen aufbauen,
- Klimamodelle mittlerer Komplexität (Earth System Models of Intermediate Complexity, EMICs), die neben den Energiebilanzen auch Einzelprozesse wie Zirkulationen in Ozeanen und Atmosphäre berücksichtigen, und
- Globale Zirkulationsmodelle (General Circulation Models, GCMs), die die dynamischen Grundgleichungen vollständig implementieren.

Während die ersten drei Modellierungssysteme sehr schnelle Berechnungen liefern, sind GCMs auf sehr große Rechnerkapazitäten angewiesen, was letztlich auf die hohe Zahl der Eingangsparameter, der zu berücksichtigenden Prozesse und auf die räumliche und zeitliche Auflösung zurückgeführt werden kann.

3.7 Umweltgeologische Modellierungssysteme

Modellierungen in der Umweltgeologie bieten die Möglichkeit einer zusammenfassenden und weitergehenden Analyse. Die dabei eingesetzten Modellierungssysteme sind allerdings meist nicht in Form fertig entwickelter Werkzeuge verfügbar. Ausnahmen bilden die Bewertungswerkzeuge des Risk Based Assessment für bestimmte Altlasten und Ansätze zur Bewertung der Schutzfunktion der Grundwasserüberdeckung. Vielmehr müssen mit Hilfe sehr allgemeiner Werkzeuge, wie z.B. Geoinformationssysteme, eigene Algorithmen zusammengestellt werden.

Die im Folgenden aufgeführten Beispiele von umweltgeologischen Modellierungen stellen nur einen Ausschnitt der derzeit am häufigsten diskutierten und angewendeten Einsatzgebiete dar.

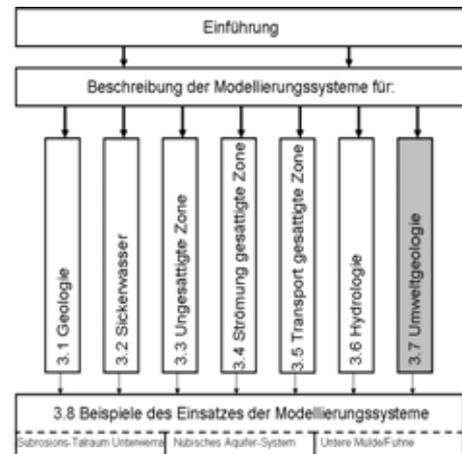
Erosions- und Sedimentationsprozesse können mit Hilfe der in der Universal Soil Loss Equation (USLE) wiedergegebenen konzeptionellen Modellierungsmethode in Modellierungssystemen umgesetzt werden. FÜRST (2004) stellt einige Ergebnisse solcher Modelle im alpidischen Raum dar, die mit Hilfe von verteilten Parametern und GIS-Methoden erzielt wurden.

Für Decision Support Systems (DSS) sind die Möglichkeiten von GIS in vielerlei Hinsicht von Bedeutung:

- Datenlieferanten
- Visualisierung (Prä- und Postprozessor)
- Datenaustausch mit und zwischen speziellen Modellierungssystemen
- Implementation einiger DSS-spezifischer Funktionen
- Implementation von Benutzerschnittstellen

Dennoch müssen auch hier die Einschränkungen der GIS bezüglich räumlicher und zeitlicher Daten berücksichtigt werden. GIS sind beispielsweise mit wenigen Ausnahmen weder in der Lage, echte volumenorientierte 3D-Daten verfügbar zu machen noch instationäre Entwicklungen adäquat abzubilden.

Wesentliche Werkzeuge zur umweltgeologischen Modellierung sind die meist ebenfalls in GIS-Systemen zur Verfügung stehenden Interpolationsverfahren. In den Geowissenschaften werden zahlreiche Interpolationsverfahren eingesetzt, auf deren Diskussion hier weitgehend mit dem Hinweis auf die Darstellungen in Kap. 2.1.1 verzichtet wird. Ebenso wie geologische Strukturen können auch die Ergebnisse von hydrochemischen Analysen interpoliert werden. Problematisch ist jedoch die Kopplung beider Ergebnisse zu einer geologisch angepassten Stoffverteilung ebenso wie die Berechnung einer hydrologisch orientierten Stoffverteilung. Eine ebenso große Schwierigkeit stellt bei nicht dynamischen Modellen die Berücksichtigung unter-



schiedlicher Zeitpunkte von Probenahmen dar, die meist über eine (unzureichende) Mittelwertbildung gelöst wird. Zur systematisch sauberen Überwindung dieses Problems sind nur Verknüpfungen mit dynamischen Modellierungssystemen denkbar, wobei jedoch evtl. mit reduzierten Ausschnitten gearbeitet werden kann. Die ggf. zu verknüpfenden Modellierungssysteme können im Prinzip aus allen Bereichen der statischen und dynamischen Modellierungen stammen, umfassen aber meist Modelle aus den Bereichen der Ökologie und Ökonomie:

- Grundwassermodellierung
- Oberflächenwassermodellierung
- Grundwasserneubildungsmodellierung
- 3D geologische Modellierung

Gerade im Bereich der umweltgeologischen Fragestellung kommen weitere vielfältige Einsatzbereiche verknüpfter Modellierungssysteme in Betracht. Für die Bereiche Naturschutz, Landwirtschaft, Ökonomie und Touristik können, wegen mangelnder vorgefertigter Modellierungssysteme jedoch meist im GIS neu umzusetzende konzeptionelle Modelle berücksichtigt werden. Sozialwissenschaftliche Modelle sind noch verhältnismäßig selten in DSS umgesetzt worden.

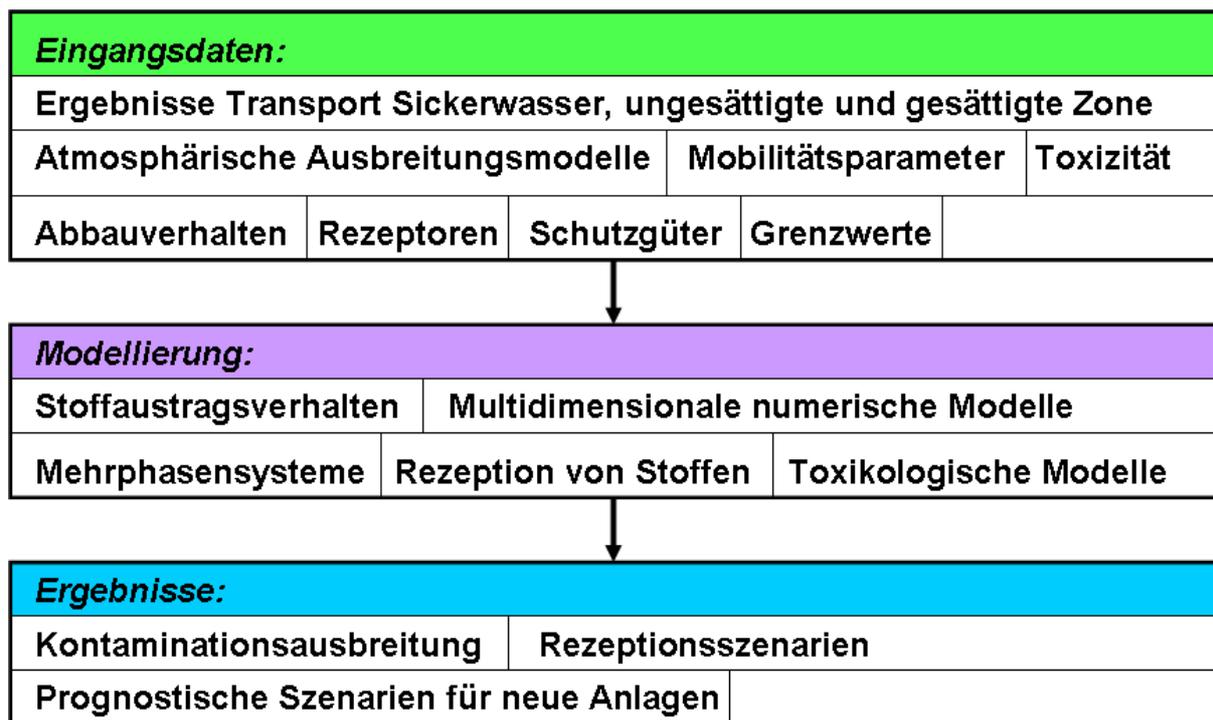


Abbildung 21: Umweltgeologische Modellierungen. Während hier die bereits bestehenden Modellierungssysteme nur vereinzelt vorhanden sind, können sowohl die Fragestellungen (und damit die Ergebnisse) als auch die zu ihrer Beantwortung notwendigen Eingangsdaten sehr vielfältig sein.

3.8 Beispiele des Einsatzes verschiedener Modellierungssysteme

Neben den ausführlichen Beispielen der folgenden Kapitel werden hier noch einige Literaturbeispiele kurz dargestellt, um das Spektrum ihres Einsatzes deutlich zu machen.

Die Frage des Einzugsgebiets von Grundwassermessstellen ist nur durch eine dreidimensionale Modellierung der gesättigten Zone zu klären. Nach ersten Untersuchungen auf diesem Gebiet, die im Rahmen des Forschungsprojektes ZEUS des FAW Ulm durchgeführt wurden, ergibt sich die Notwendigkeit, mit entweder mit analytischen Methoden einen näherungsweise und nur unter bestimmten Voraussetzungen zulässigen analytischen Ansatz

zu wählen oder direkt numerisch dreidimensional zu arbeiten. Für die Modellierungen GOSSEL ET AL. (1998) und GOSSEL ET AL. (2001) wurden diese Fragen für regionale Grundwassereinzugsgebiete weitergehend bearbeitet. Neben der Modellierung von Pathlines ist die Transportmodellierung notwendig, um Fließzeiten auf der Grundlage von Porositätswerten zu bestimmen. Dies ist sowohl für die Ausbreitung von Grundwasser-Kontaminationen durch Altlasten oder Schadensfälle als auch für die Beobachtung der Grundwasserqualität und die Abschätzung des Einzugsgebiets im Vorfeld von Trinkwassergewinnungen aus dem Grundwasser von Bedeutung, wie BENDER (2003) am Beispiel eines großräumigen Modells im Rhein-Neckar-Raum zeigt. Die Modellierung ist insbesondere bei der Bewertung von Natural Attenuation-Prozessen in Altlasten sehr komplex, wie PRECHTEL ET AL. (2003) zeigen. Auch für Umweltverträglichkeitsuntersuchungen und das Grundwassermanagement von Großbaumaßnahmen sind Modellierungen der gesättigten Zone oft notwendig.

Bei den meisten dieser Modellierungen der gesättigten Zone werden keine dezidierten geologischen Modelle erstellt, sondern bereits die auf die hydrogeologische Strukturierung und Parameterisierung fokussierte Form des „hydrogeologischen Strukturmodells. Sickerwasser- und Grundwasserneubildungsmodelle (z.B. in WEGEHENKEL & SELG (2002)) werden insbesondere für die Wasserhaushaltsberechnungen im Rahmen von Genehmigungsverfahren für Grundwasserförderung zur Trink- und Brauchwasserversorgung erstellt (JOSOPAIT (1996)). Im Rahmen der allgemeinen Umweltberichtserstattung und/oder der Öffentlichkeitsbeteiligung werden diese Ergebnisse auch publiziert.

3.8.1 Subrosions-Talraum Unterwerra

Das geologische Modell des Untersuchungsgebiets wurde mit Hilfe konstruktiver Methoden erstellt und von LÄHNE ET AL. (2006) beschrieben. In Abbildung 22 ist der Arbeitsablauf dargestellt. Er macht die Notwendigkeit der Einbeziehung des digitalen Geländemodells (DGM) deutlich. Die stratigrafische Zuordnung der Schichten wirft in dem Gebiet nur selten Fragen auf, da die wesentlichen Schichten des Zechsteins, des Buntsandsteins und des Muschelkalks gut zu unterscheiden sind. Zudem wurde das Gebiet durch oberflächengeologische Kartierungen JACOBSHAGEN (1993) sowie fazielle Spezialanalysen (WYCISK (1984)) sehr eingehend untersucht. Die geologischen Strukturen sind zunächst recht einfach aufgebaut, da die Schichten nur flexurartig gebogen und nur durch wenige größere Störungen versetzt sind. Auch die in



der Talaue in größeren Mächtigkeiten abgelagerten quartären Schichten sind klar zu gliedern und horizontbeständig.

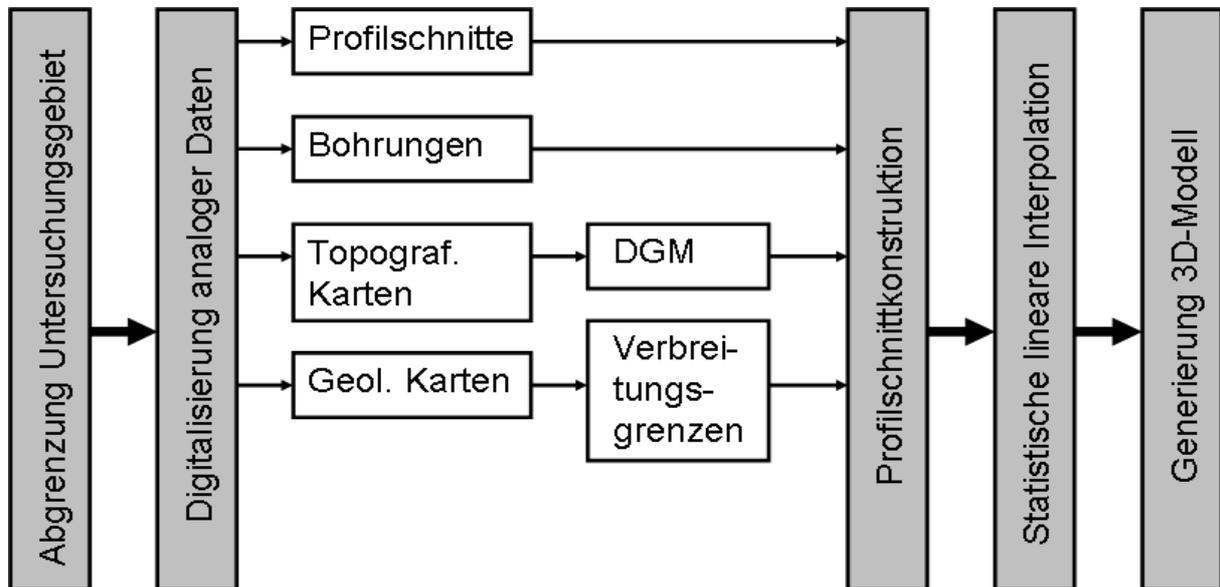


Abbildung 22: Arbeitsablauf der geologischen Modellierung des Subrosions-Talraums Unterwerra.

Analytische Methoden, die in diesem Gebiet sehr umfangreich eingesetzt werden konnten, ermöglichten die sehr genaue Ermittlung von Parametern, die für die hydrogeologische Beurteilung des Gebiets von großer Bedeutung sind. Diese Methoden können aber nur bedingt zur Lösung komplexer Aufgaben genutzt werden, da sie nur unter sehr stark vereinfachenden Voraussetzungen eingesetzt werden können. Gemeinsam mit geometrischen Auswertungen dynamischer Messdaten wie z.B. Wasserständen und hydrochemischen Daten wurden sie zunächst für erste Abbildungen der Dynamik genutzt (LÄHNE 2003). Diese Abbildung kann als Teil eines konzeptionellen dynamischen Modells eingesetzt werden. Abbildung 23 macht die außerordentliche Datendichte der Ermittlung hydrogeologischer Parameter im Talraum deutlich. Als Eingangsparameter für die numerische Grundwasserströmungsmodellierung können diese Daten rein statistisch verwendet werden, ohne auf weitere geologische Kenntnisse zurückgreifen zu müssen.

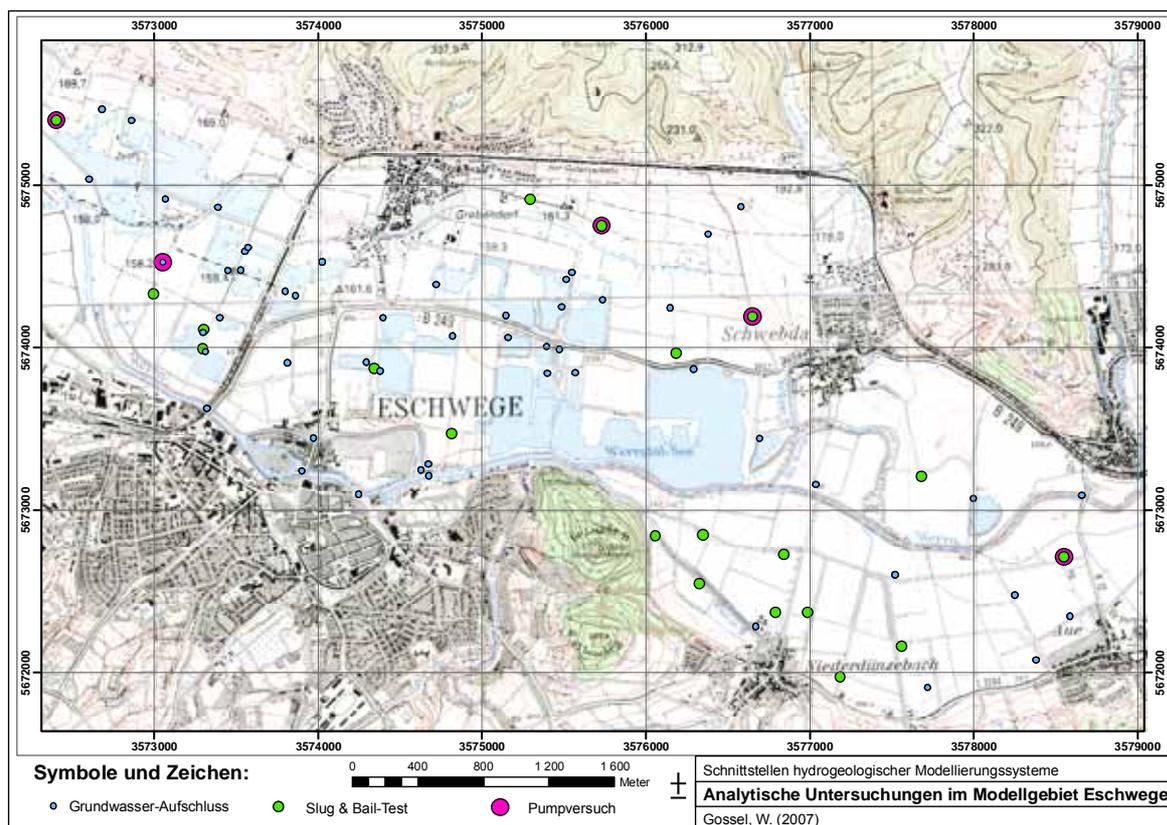


Abbildung 23: Karte der im Subrosions-Talraum Unterwerra durchgeführten hydrogeologischen Parameterermittlungen (analytische Methoden).

Charakteristisch für dieses Modellgebiet ist neben der hohen Dichte der Eingangsdaten die Einbeziehung von Festgesteinsbereichen (insbesondere Zechstein, Buntsandstein und Muschelkalk) in die numerische hydrogeologische Modellierung, da das Einzugsgebiet dieses Talabschnitts der Werra diese Einheiten mit umfasst. Hierfür konnte aufgrund der fehlenden Dominanz von Klufsystemen als bevorzugte Abflussbahnen des Grundwassers auf Modellierungssysteme zurückgegriffen werden, die den Kontinuitätsansatz zugrunde legen. Der in Abbildung 24 dargestellte Arbeitsablauf macht die Einbindung der Daten deutlich.

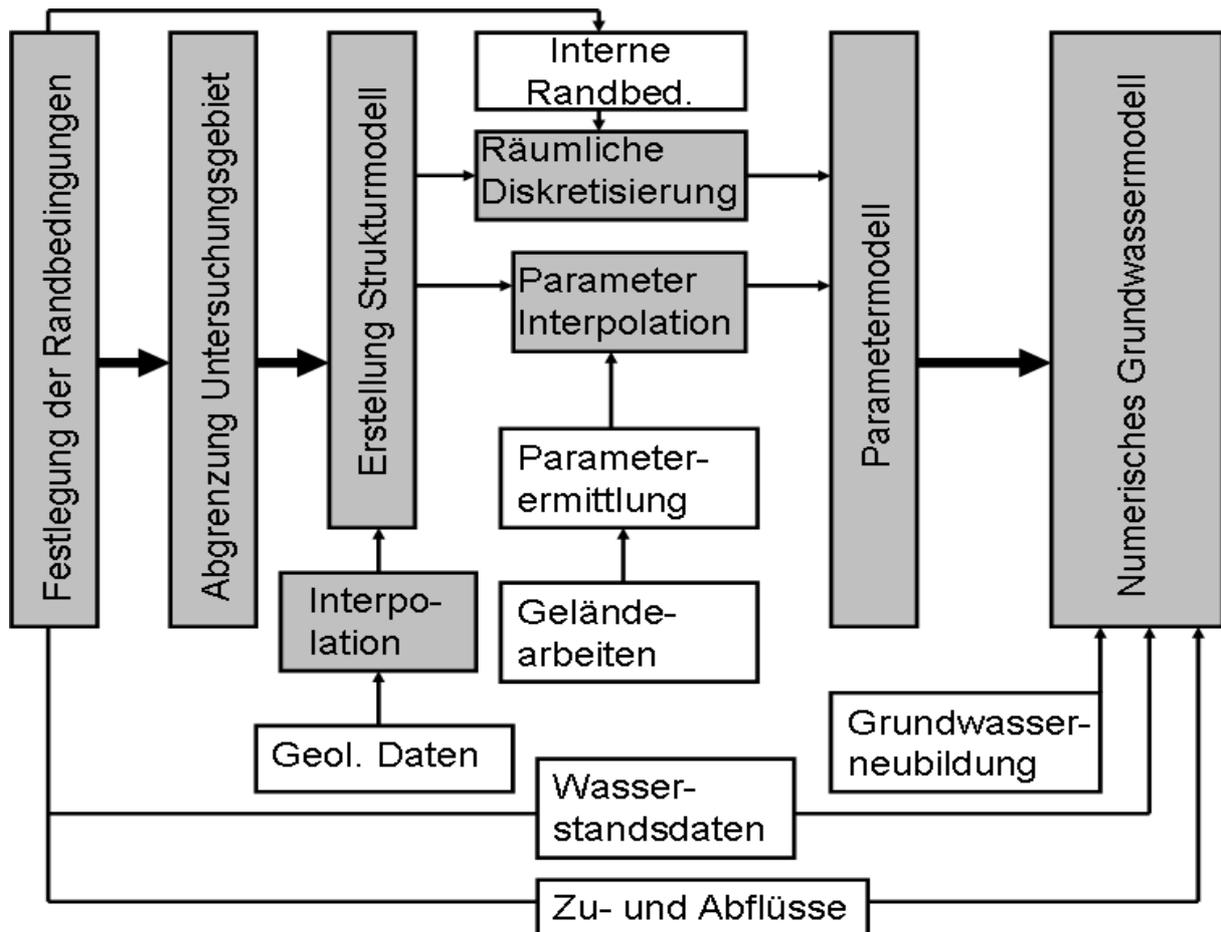


Abbildung 24: Arbeitsablauf der numerischen Grundwassermodellierung für den Subrosionstalraum Unterwerra.

Die Kopplung des geologischen Modells an das numerische Grundwassermodell stellt eine große Herausforderung dar, da die im Talraum für die Grundwasserführung maßgeblichen Lockergesteine im weiteren Einzugsgebiet nicht mehr vorhanden sind.

Die Grundwasserneubildung wurde in diesem Modellgebiet auf der Basis des TUB-BGR-Verfahrens (WESSOLEK ET AL. (2004)) berechnet. Besonders anspruchsvoll war hierbei die Modellierung einer hypothetischen Grundwasseroberfläche in den Festgesteinsgebieten, die zur Berechnung des Grundwasserflurabstandes benötigt wird. Wie in Abbildung 25 dargestellt, steht diese Aufgabe an zentraler Stelle der Modellierung.

Ein Modellierungssystem für die ungesättigte Zone wurde nicht eingesetzt.

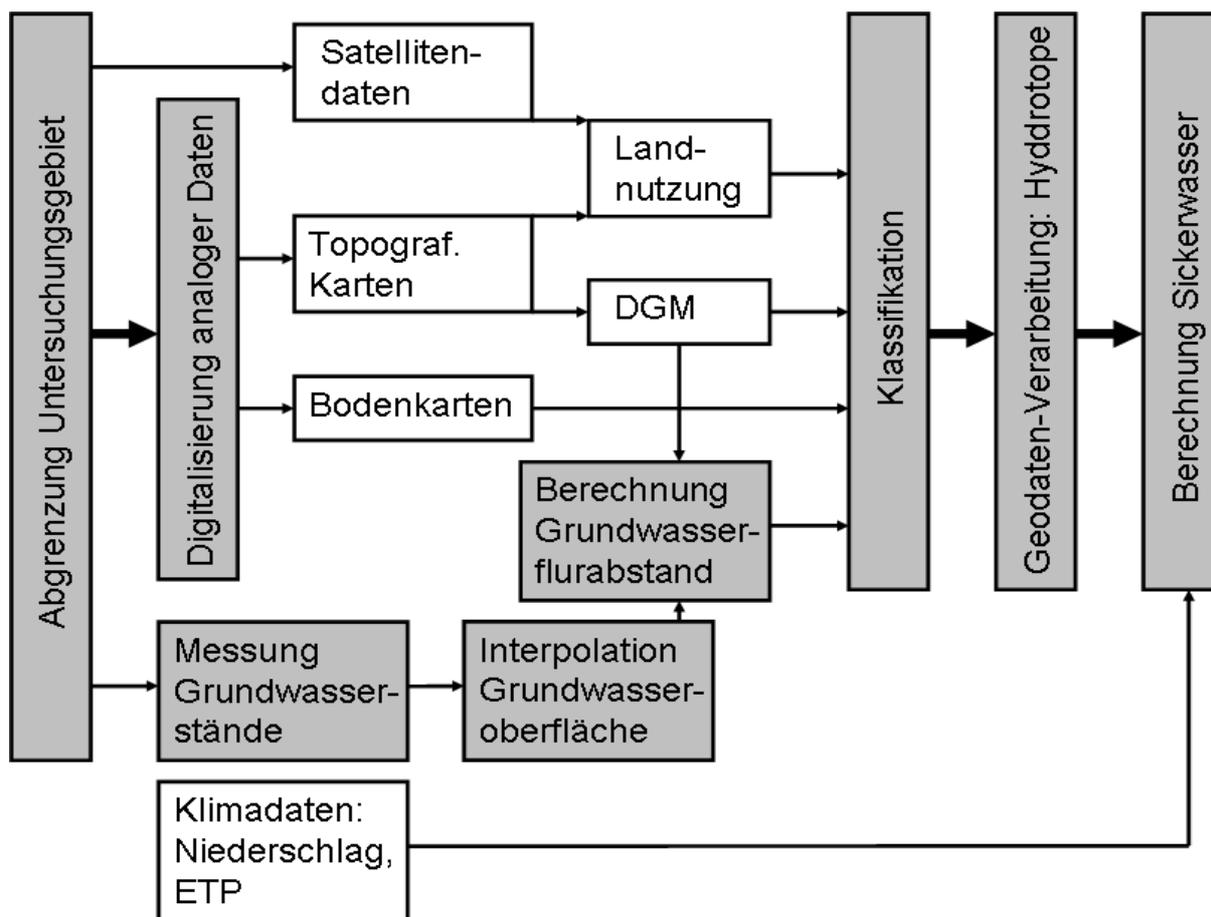


Abbildung 25: Arbeitsablauf der Grundwasserneubildungsmodellierung für den Subrosions-Talraum Unterwerra.

3.8.2 Nubisches Aquifer System

Die geologische Modellierung wurde für das Nubische Aquifer System entsprechend der Aufgabenstellung, deren Schwerpunkt auf der numerischen Grundwassermodellierung lag, sehr vereinfacht durchgeführt (s. Kapitel 2.4.2), s. auch Abbildung 26. Auf der Grundlage von Bohrprofilen und geologischen Profilschnitten, die z.B. aus BRINKMANN & HEINL (1986) entnommen und georeferenziert digitalisiert wurden, der geologischen Übersichtskarte (CONOCO 1987), der Karte des Tops des Grundgebirges (HESSE ET AL. 1987) und dem DGM (NASA 2005) wurde eine GIS-Datenbasis erzeugt. Diese enthielt ein Strukturmodell aus acht Schichten, das zunächst stratigraphisch orientiert aufgebaut wurde. Insbesondere im Norden des Modellgebiets lagen keine Bohrdaten und Profilschnitte vor, sodass mit Hilfe geostatistischer Verfahren interpoliert werden musste. Bei der Erstellung des Strukturmodells wurden die Rahmenbedingungen der numerischen Grundwassermodellierungssysteme bereits berücksichtigt, sodass die Schichten im gesamten Modellgebiet vorhanden waren.

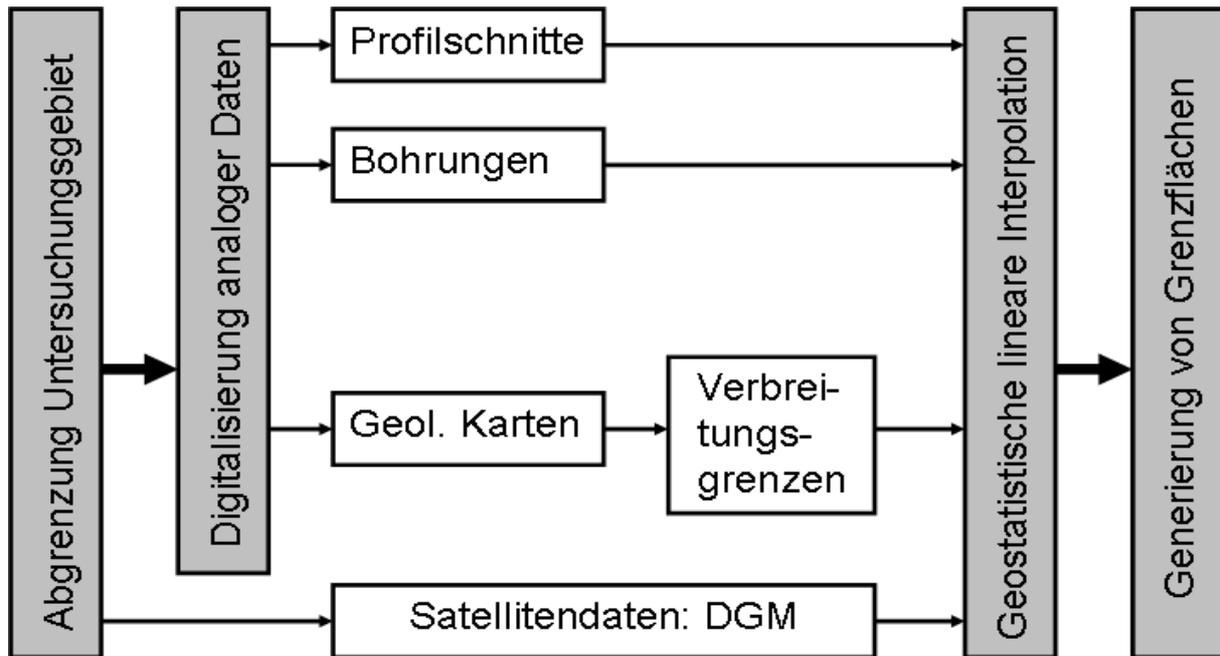


Abbildung 26: Arbeitsablauf der geologischen Modellierung für das Nubische Aquifer System.

Die Grundwasserneubildung wurde zunächst, wie in GOSSEL ET AL. (2004) beschrieben, sehr pauschal bewertet. Einerseits sind die Bedingungen in diesen ariden Klimaten mit sehr seltenen Starkniederschlagsereignissen (Wiederkehrintervalle in großen Teilen des Modellgebiets > 10 Jahre) nicht mit den in gemäßigten Breiten eingesetzten Modellierungssystemen zu erfassen. Andererseits gibt es überhaupt nur für die letzten 100 – 200 Jahre Aufzeichnungen zum Niederschlag, die zudem nur im östlichsten Teil des Modellgebiets – entlang des Nils – durch Klimastationen gestützt sind. Die Einschätzung der Neubildungssituation ist ganz wesentlich auf die Kalibrierung des Modells und auf Proxy-Daten aus geologischen und geografischen Erkundungen angewiesen. Wesentlich war bei der Grundwasserneubildungsmodellierung die Zeitabhängigkeit über den langen Zeitraum von 25 000 Jahren.

Aufbauend auf den Modellen der Geologie und der sehr vereinfacht ausgeführten Grundwasserneubildung wurde ein numerisches Grundwasserströmungsmodell entwickelt. Der in Abbildung 27 wiedergegebene Arbeitsablauf zeigt, dass auch das numerische Grundwassermodell, das über einige Pumpversuchsergebnisse und lithologische Angaben grob parameterisiert wurde (s. Abbildung 28), vereinfacht ausgefallen ist. Eine hohe Auflösung wie in den Beispielen Subrosions-Talraum Unterwerra und Untere Mulde/Fuhne war der Zielstellung nicht adäquat. Dennoch wurde ein dreidimensionales Modell erstellt, um die Wirkung der klimatischen Entwicklung auf das Grundwasser in unterschiedlichen Tiefen aufzeigen zu können. Zudem wurde das Modell für weitere Fragestellungen, wie z.B. zur Genese und Stabilität der Salz-Süßwassergrenze und Auswirkungen der Wasserspiegelschwankungen des Mittelmeeres, genutzt. Die Randbedingungen dieses numerischen Grundwassermodells waren geologisch bedingt: Im Westen, Süden und Osten sind die Grundgebirgsausbisse maßgeblich für die Ausweisung als „No-flow-boundary“. Im Norden ist das Mittelmeer und im westlichen Teil des Modellgebiets der Nil als Randbedingung mit vorgegebenem Wasserstand modelliert worden.

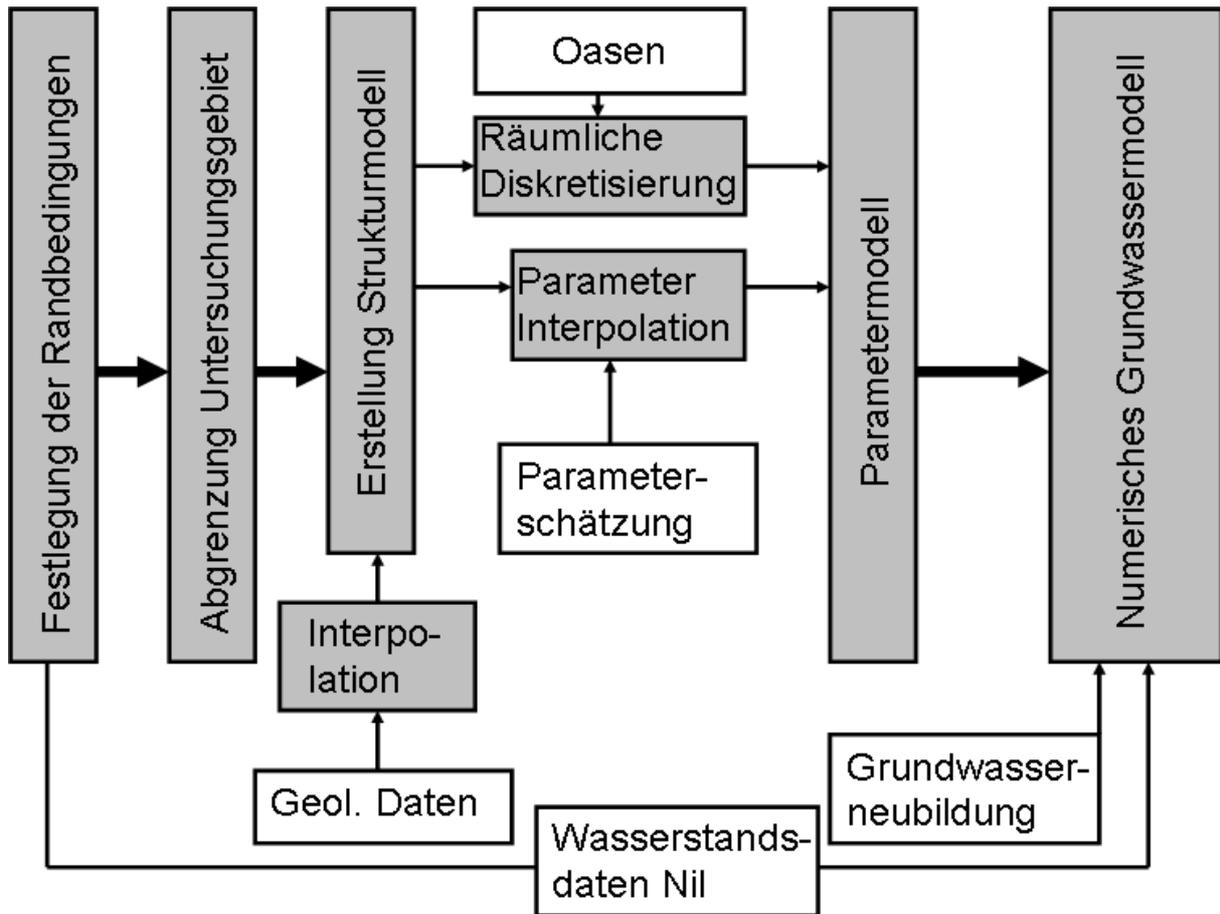


Abbildung 27: Arbeitsablauf für die numerische Grundwassermodellierung des Nubischen Aquifer Systems.

Anbindungen an hydrologische Modellierungssysteme wurden für das Regionalmodell nicht genutzt. Für die Detailmodellierungen des Nasser-Sees (SEFELNASR 2007) sind jedoch statistische Methoden für Wasserstandsganglinien eingesetzt worden.

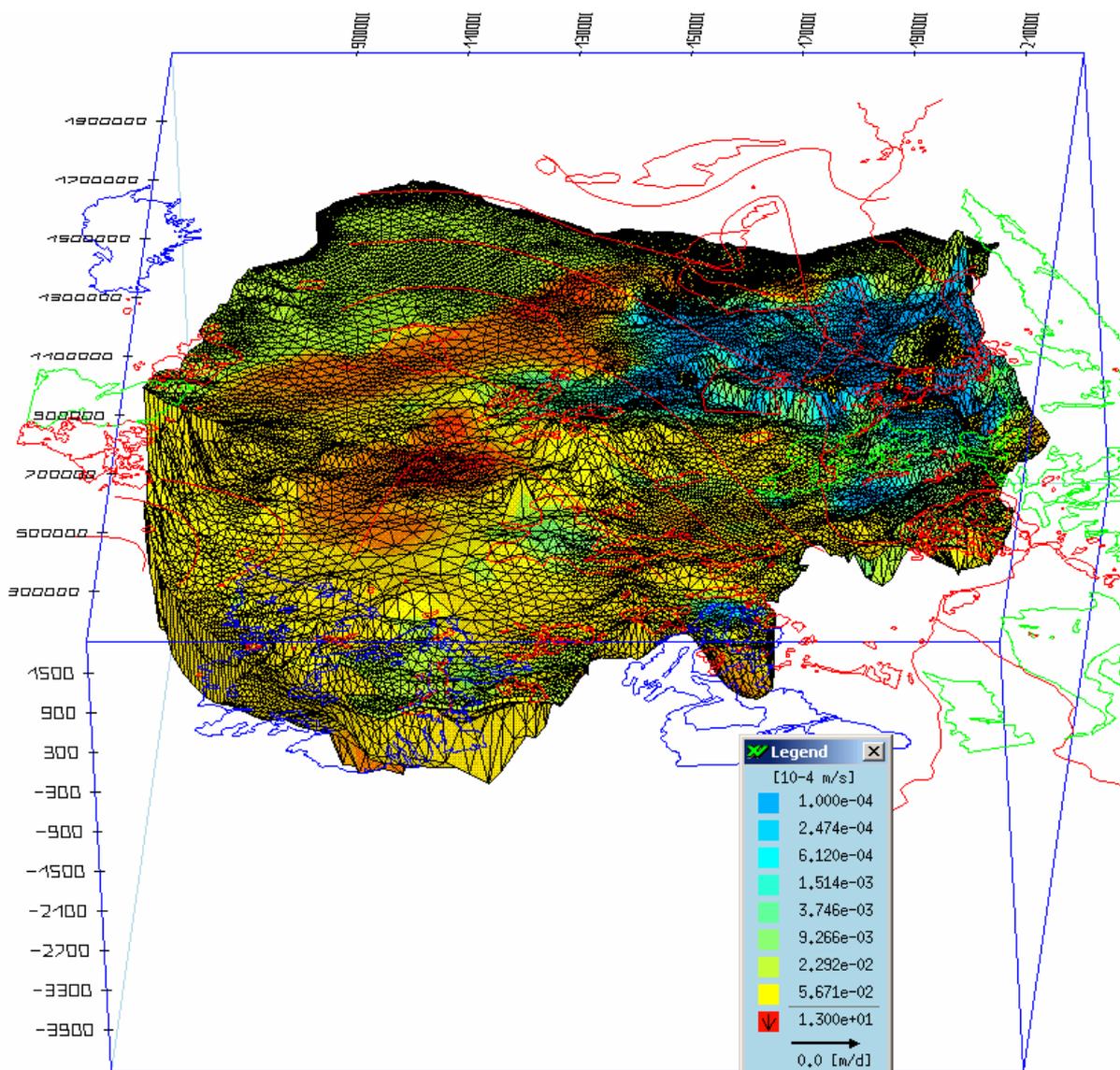


Abbildung 28: Hydrogeologisches Strukturmodell des Nubischen Aquifer Systems.

3.8.3 Untere Mulde/Fuhne

Im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne wurden die meisten der beschriebenen Modellierungssysteme eingesetzt. Hierbei war für einzelne Modellierungswerkzeuge sogar ein Vergleich möglich. Entsprechend der Gliederung der Kap. 3.1 bis 3.7 werden die einzelnen Modelle in diesem Beispielgebiet vorgestellt.

Geologische Modelle

In dem Gebiet der Unteren Mulde/Fuhne wurden mehrere geologische Modelle mit verschiedenen Modellierungssystemen und -werkzeugen erstellt, um erste Einschätzungen von Ausbreitungspfaden geben zu können und Adsorptionskapazitäten und Volumina zu berechnen. Gleichzeitig wurden die Modelle genutzt, um die Einsatzmöglichkeiten verschiedener Modellierungssysteme und -werkzeuge zu testen und die Ergebnisse zu vergleichen. FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004) nutzten konstruktive Methoden für zwei verschiedene Teilgebiete, HUBERT (2005) verband die beiden nahe beieinander liegenden Modelle und modellierte mit statistischen Methoden. Diese Modelle besitzen eine sehr hohe Auflösung von 10 m für die Modelle von FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004) bzw. 20 m für das Modell von HUBERT (2005).

Die von FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004) benutzten Modellierungssysteme basierten zwar in ihrem Kern auf konstruktiven Methoden. Zur Erstellung von Darstellungen und zum Datenaustausch wurden jedoch statistische Methoden eingesetzt. Die Profilschnitt-gestützte Konstruktion, für die in beiden Teilgebieten je etwa 100 bis 150 Bohrungen berücksichtigt wurden, kann nur einen Teil des jeweiligen Modellgebiets abdecken. Für die dazwischen liegenden Bereiche müssen statistische oder geostatistische Methoden eingesetzt werden. Im vorliegenden Fall kamen komplexe Triangulationsmethoden zum Einsatz, die dem Bearbeiter einen Eingriff in die Dreiecksvernetzung erlaubten. Die sonst übliche Delaunay-Triangulation wurde hier zwar als ein erster Vorschlag vorgegeben, aber der Bearbeiter konnte in geologisch begründeter Weise diese automatische Vernetzung ändern. Im vorliegenden Fall, dessen Arbeitsabläufe in Abbildung 29 dokumentiert sind, wurde die Modellierung eines glazialen Rinnensystems erst durch diesen Algorithmus ermöglicht. HUBERT (2005) zeigte deutlich, dass mit einer automatischen Netzgenerierung und/oder mit geostatistischen Verfahren eine solche Struktur nur mit äußerst hohem Aufwand (wenn überhaupt) zu modellieren ist.

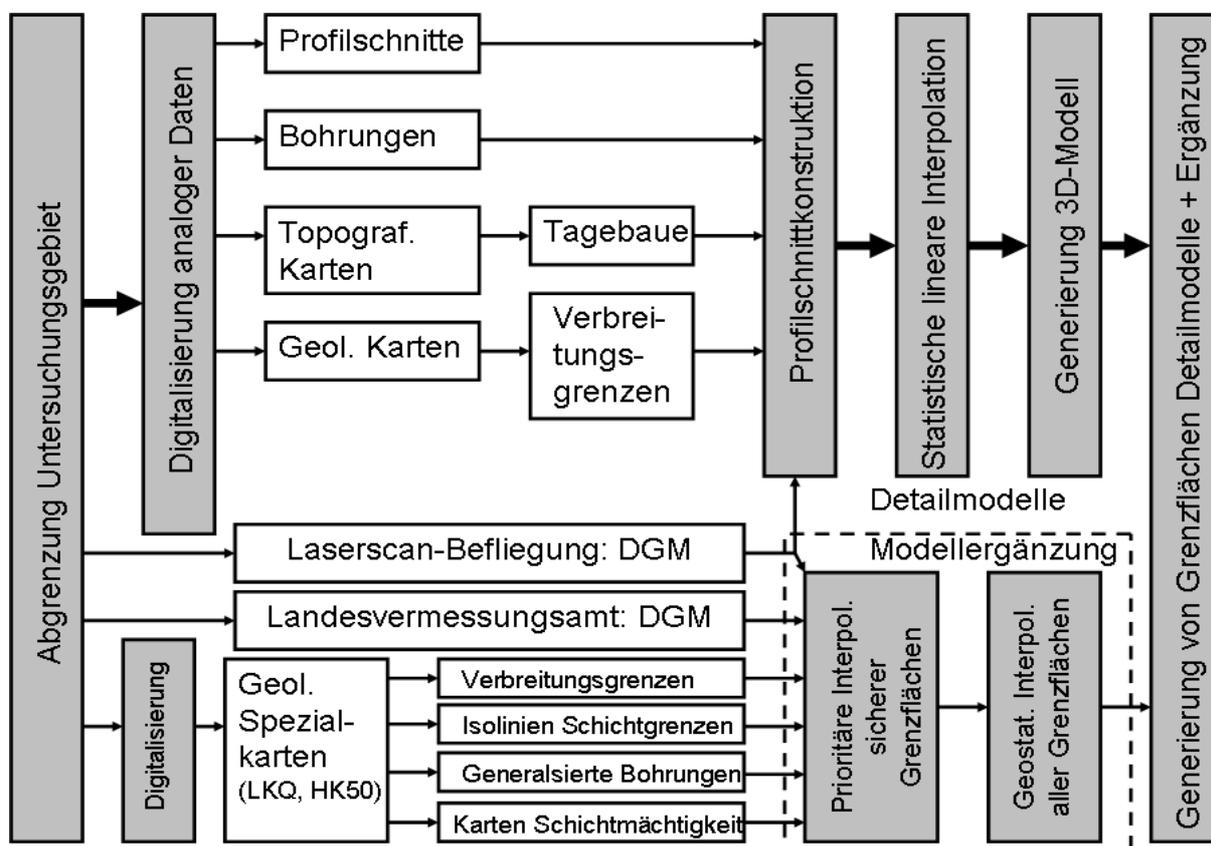


Abbildung 29: Arbeitsablauf der geologischen Modellierungen im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.

Charakteristisch für das geologische Modell ist seine rein stratigrafische Orientierung. Zwar wurden die größten lithologischen Differenzen durch eine weitere Gliederung der stratigrafischen Einheiten wiedergegeben, aber für eine hydrogeologische Modellierung ist eine aufwändige Überarbeitung notwendig.

Grundlage für das geologische Modell ist zunächst die Entwicklung einer „Schichtenfolge“, die eine konsistente Abfolge aller zu modellierenden Schichten angibt. Mit

dieser geologischen Topologie sind zwei weitere Rahmenbedingungen bereits implizit vorgegeben:

1. Jede Bohrung muss lückenlos stratifiziert werden.
2. Es ist nicht (oder nur in genau zu definierenden, seltenen Ausnahmefällen) möglich, diese Abfolge lokal zu verändern.

Damit ist es schlecht möglich, ein Modell sukzessive durch Anpassungen zu entwickeln. Gerade die nur in seltenen Fällen zuverlässig zu treffende Zuordnung glazifluvialer oder glazialer Sande ist oft nur schrittweise bei der Modellentwicklung erreichbar. Hierfür bieten sich bis zu einem gewissen Grad die statistischen Methoden als eine Vorstufe der verfeinernden konstruktiven Methoden an.

Die Komplexität des glazial geprägten geologischen Modells wird erhöht durch die über 150-jährige Tagebautätigkeit. Die Eingriffe durch die gesamten glazialen Schichten bis ins Tertiär (Lage der miozänen Braunkohle bei etwa 30 bis 50 mNN) haben durch die sehr steilen Flanken der Tagebaue („Schichtgrenzen“ im geologischen Modell) zu sehr anspruchsvollen Geometrien geführt (s. Abbildung 30 und Abbildung 31).

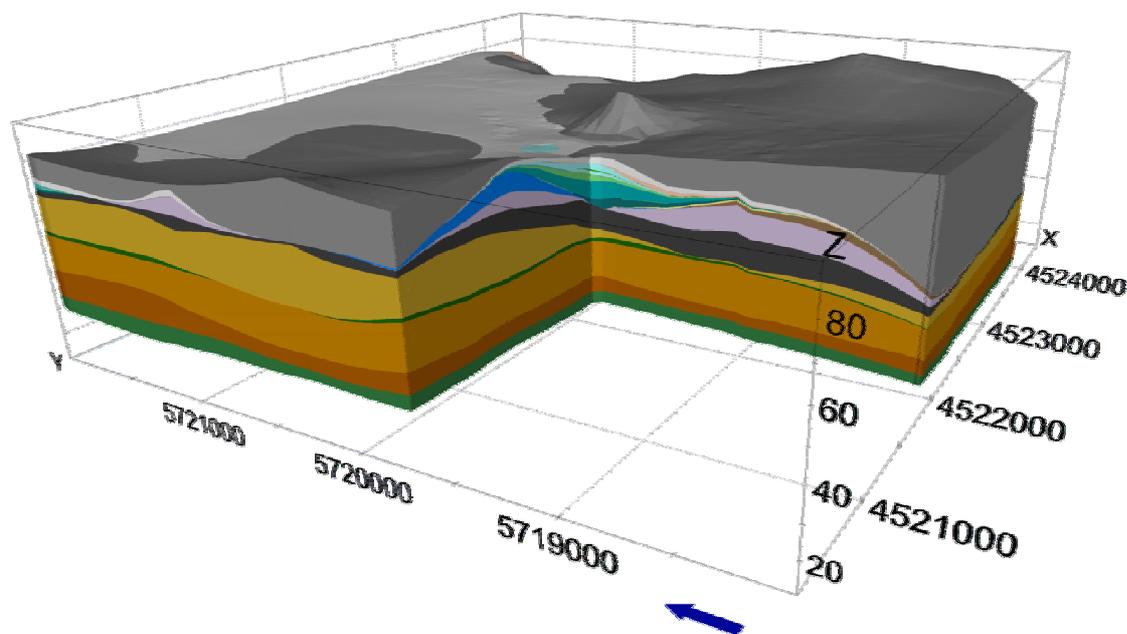


Abbildung 30: Geologisches Modell, entwickelt mit statistischen Methoden. Auf der Grundlage der Bohrungen ergeben sich zu stark vereinfachende Strukturen. Die Grenzflächen der Schichtkörper müssen durch weitere geometrische Operationen korrigiert werden. Wesentliche Datengrundlage sind z.B. das DGM und die horizontalen Ausmaße und die Tiefe der Tagebaue (aus HUBERT 2005).

Das geologische Modell macht auch die unterschiedlichen potentiellen Einsatzbereiche der verschiedenen Modellierungsmethoden deutlich: Während in den weitgehend horizontbeständigen litoral gebildeten tertiären Schichten statistische Methoden sinnvoll einsetzbar sind, können sie in den glazialen quartären Einheiten die strukturelle Heterogenität nicht adäquat wiedergeben. In Abbildung 31 wird das Ergebnis der konstruktiven Modellierung und der Unterschied zur statistischen Modellierung deutlich.

Auch die Grenzflächen der tertiären Einheiten in diesem Gebiet können durch geologische Prozesse so überprägt sein, dass eine differenziertere geostatistische Analyse und Interpolation notwendig werden. Ein Beispiel ist die saaleglaziale Rinne, die im Modellgebiet Nord-Süd verlaufend quert.

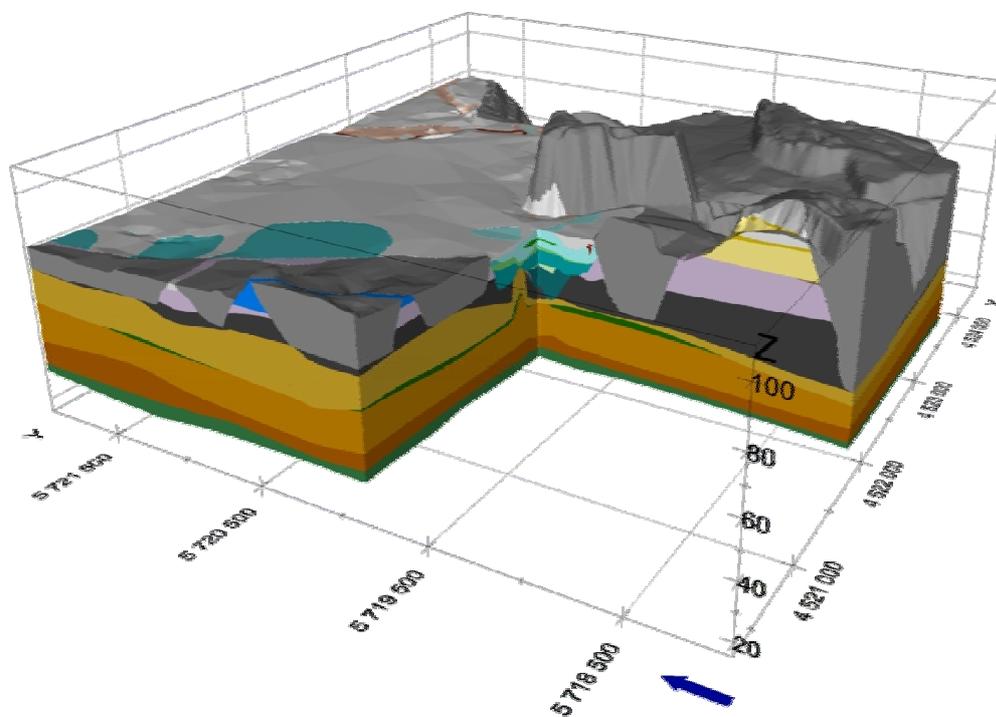


Abbildung 31: Geologisches Modell, entwickelt mit konstruktiven Methoden. Die zusätzlich für einen Horizont abgebildete Triangulation zur Interpolation zwischen den konstruierten Profilschnitten muss expertenbasiert angepasst werden, um die geologischen Strukturen sinnvoll zu formen (aus HUBERT 2005).

Die beiden räumlich aneinander grenzenden geologischen Modelle des zentralen Gebiets wurden für die hydrogeologische Modellierung zusammengefügt und zu einem regionalen geologischen Modell mit einem hoch aufgelösten Detailgebiet erweitert. Hierfür wurden im Wesentlichen öffentliche Datenquellen (EISMANN & MÜLLER (1978), MARCINKOWSKI & MÜLLER (1980), HELMERT (1984) und GROTE & KRÜGER (1984)) genutzt. Diese Karten sind zwar von sehr unterschiedlicher Qualität und nicht sehr aktuell, aber sie haben den Vorteil, dass sie meist von lokal erfahrenen Hydrogeologen bearbeitet wurden und in sich konsistent sind. Für die Nutzung dieser Datenquellen ist eine besondere Vorgehensweise bei der Modellierung notwendig, um den sichtbaren Unterschieden bei der Zuverlässigkeit der Daten Rechnung zu tragen. Der erste Schritt der Erstellung des regionalen geologischen Modells ist die Harmonisierung der dargestellten Einheiten mit den Einheiten des Detailgebiets. Die Strukturierung der Daten erfolgte in den Karten von EISMANN & MÜLLER (1978) und MARCINKOWSKI & MÜLLER (1980) wie in dem geologischen Detailmodell weitgehend stratigrafisch, in den Karten von HELMERT (1984) und GROTE & KRÜGER (1984) jedoch hydrogeologisch. Die Daten der in den Karten vorhandenen Verbreitungsgrenzen, Schichtober- und -unterflächen, ggf. Schichtmächtigkeiten und, soweit in generalisierter Form vorhanden, Bohrungen, wurden in einer GIS-basierten Geodatenbank erfasst. Sie wurden anschließend zu einem Gesamtmodell mit einer Priorisierung der zuverlässig zu bestimmenden Informationen über die geologisch oder räumlich unzu-

verlässigeren Informationen (schlecht zu bestimmende Schichtgrenzen, geringe Aufschlussdichte) zusammengefügt. Aus dem regionalen geologischen Modell wurden dann das Gebiet des zusammengefügt geologischen Detailmodells ausgeschnitten und das Detailmodell dafür eingepasst, s. Kap. 4.7.3.

Die Nutzung der verschiedenen Modellierungsmethoden für das Detailgebiet (konstruktiver Ansatz und differenzierte geostatistische Methoden) sowie für das regionale Modellgebiet (einfache geostatistische Methoden) zeigte zusätzlich zum bereits von HUBERT (2005) durchgeführten Vergleich die Stärken und Probleme der eingesetzten Modellierungsmethoden und –werkzeuge bezüglich der Aktualisierungsmöglichkeiten auf. Im Untersuchungsgebiet werden laufend weitere Bohrungen zur Altlastenerkundung und zum Monitoring der Kontaminationen abgeteuft, die ein laufendes Update der Modelle notwendig machen würden. Zusätzlich wäre es für die hydrogeologische Modellierung interessant, ein quasi dynamisches geologisches Modell für die Tagebaugeschichte im Gebiet zu erstellen. Sowohl mit den geostatistischen Methoden als auch in erhöhtem Maße mit konstruktiven Methoden ist dies nur mit erheblichem Arbeitsaufwand zu leisten. Die zunächst schneller umzusetzende Modellierung mit geostatistischen Methoden wird in diesem Gebiet durch die Notwendigkeit der Korrektur der Modelle mit DGM und Tagebaustrukturen sehr komplex. Für jede neue (Bohr)Information ist daher das gesamte Modell neu zu erstellen. Bei der Modellierung mit konstruktiven Methoden sind zunächst zusätzliche Profilschnitte anzulegen, die die neuen Informationen mit einbeziehen. Das Modell ist dann ebenfalls aufgrund der zusätzlichen Informationen neu zu berechnen. Besonders problematisch wird bei der Modellentwicklung die Korrektur von bestehenden Informationen anhand der neuen Informationen. Hierfür muss in beiden Modellierungssystemen bis auf die Ebene der Eingangsinformationen (Bohrdaten) zurückgegangen und das Modell komplett neu erstellt werden. Dies kann gerade bei der profilschnittgestützten Modellierung sehr aufwändig werden. Die Modellierungswerkzeuge unterstützen diese notwendigen Funktionen noch nicht adäquat.

Im Falle der Modellierung der Tagebaugeschichte stellt sich die Frage einer quasi dynamischen geologischen Modellierung. Mit ihrem grundsätzlich statischen Modellierungskonzept sind die Modellierungssysteme und die aus ihnen abgeleiteten Werkzeuge derzeit nicht in der Lage, eine solche Aufgabe zu erfüllen.

Sickerwassermodellierung

Für die Modellierung der Sickerwassermengen wurde die aktuellste derzeit verfügbare Methode genutzt: In GOSSEL & WYCISK (2006) wurden erste Ergebnisse im Modellgebiet mit dem Verfahren TUB-BGR WESSOLEK ET AL. (2004) beschrieben. Die Ergebnisse dieses Verfahrens wurden einerseits mit den Werten in NEUMANN & WYCISK (2003) und andererseits mit Ergebnissen nach der Methode von DÖRHÖFER & JOSOPAIT (1980) verglichen. Zudem standen mit den Abflussmessungen einiger Oberflächengewässer im Gebiet, die von NEUMANN & WYCISK (2006) durchgeführt wurden, u.a. Trockenwetterabflüsse zur Verfügung.

Das Verfahren von WESSOLEK ET AL. (2004) zur Berechnung der realen Evapotranspiration und der Sickerwasserrate durch Bildung der Differenz zur Niederschlagsmenge wurde flächendifferenziert auf die einzelnen Jahre im Zeitraum 1840 bis 2005 angewandt. Da die Klimadaten nur für die Reihe 1947 bis 1990 vorlagen DEUTSCHER WETTERDIENST DWD (2006) – auch für diese Reihe mussten Daten mehrerer Stationen, die im Umkreis von etwa 30 km liegen, miteinander korreliert und dann über Regressionen umgerechnet werden – wurden für den davor liegenden Zeitraum Da-

ten zweier Stationen in Berlin, die bereits in CHOWANIETZ & GOSSEL (1997) ausgewertet wurden, mit den Gebietsdaten für das Gebiet Untere Mulde/Fuhne korreliert und die Reihe dadurch verlängert. Berechnet wurden dabei Monatswerte der Niederschläge und der Potentiellen Evapotranspiration nach TURC (1961) sowie die Klimatische Wasserbilanz als Differenz aus beiden. Durch Berechnung des Quotienten aus potentieller und realer Evapotranspiration für die einzelnen Jahre konnte eine Umrechnung der monatlichen potentiellen Evapotranspiration auf die reale Evapotranspiration vorgenommen werden. Dabei werden selbstverständlich Fehler in Kauf genommen, die sich aus einer Reihe langjährig und saisonal veränderlicher Eingangsgrößen ergeben:

- Unterschiedliche Landnutzung, insbesondere auf den Ackerflächen, beeinflusst in erheblichem Maße die Evapotranspiration. Die Abfolge der Feldfrüchte kann jedoch im historischen Rahmen über 150 Jahre nicht rekonstruiert werden.
- Die Grundwasserflurabstände sind ebenfalls nicht konstant. Hier wirken sich einerseits die Tagebausümpfung und andererseits saisonale Periodizitäten aus. Hier wurden zunächst die aktuellen Flurabstände zugrunde gelegt.
- Die Bodenschicht wird durch die Tagebaue in erheblichem Maße und großräumig verändert. Als konstante räumliche Verteilung wird die jeweilige Bodenkarte (für große Teile des Gebiets wurde die geologische Karte 1 : 25 000 genutzt) übernommen.
- Versiegelungsmaßnahmen spielen, verglichen mit den anderen genannten Einflussfaktoren, eine untergeordnete Rolle, sind aber für den gesamten betrachteten Zeitraum nicht unerheblich.

Die Berücksichtigung saisonaler Einflussfaktoren ist durch ein empirisches Verfahren, wie z.B. das genannte oder weitere in DEUTSCHER VERBAND FÜR WASSERWIRTSCHAFT UND KULTURBAU (1996) genannte Verfahren, nicht genügend abbildbar. Hier könnten Bodenwasserhaushaltsmodelle mit einer oder mehreren Speichergrößen Verbesserungen erbringen, z.B. ein sehr einfaches Modellierungssystem mit nur vier Speichern, das in HÖRMANN (2005) beschrieben ist. Im vorliegenden Fall sind jedoch die Einflussfaktoren aus der Landnutzung sowie die langfristigen Änderungen des Bodenaufbaus so schlecht zu rekonstruieren, dass eine detaillierte Modellierung mit Bodenwasserhaushaltsmodellen wenig sinnvoll erscheint.

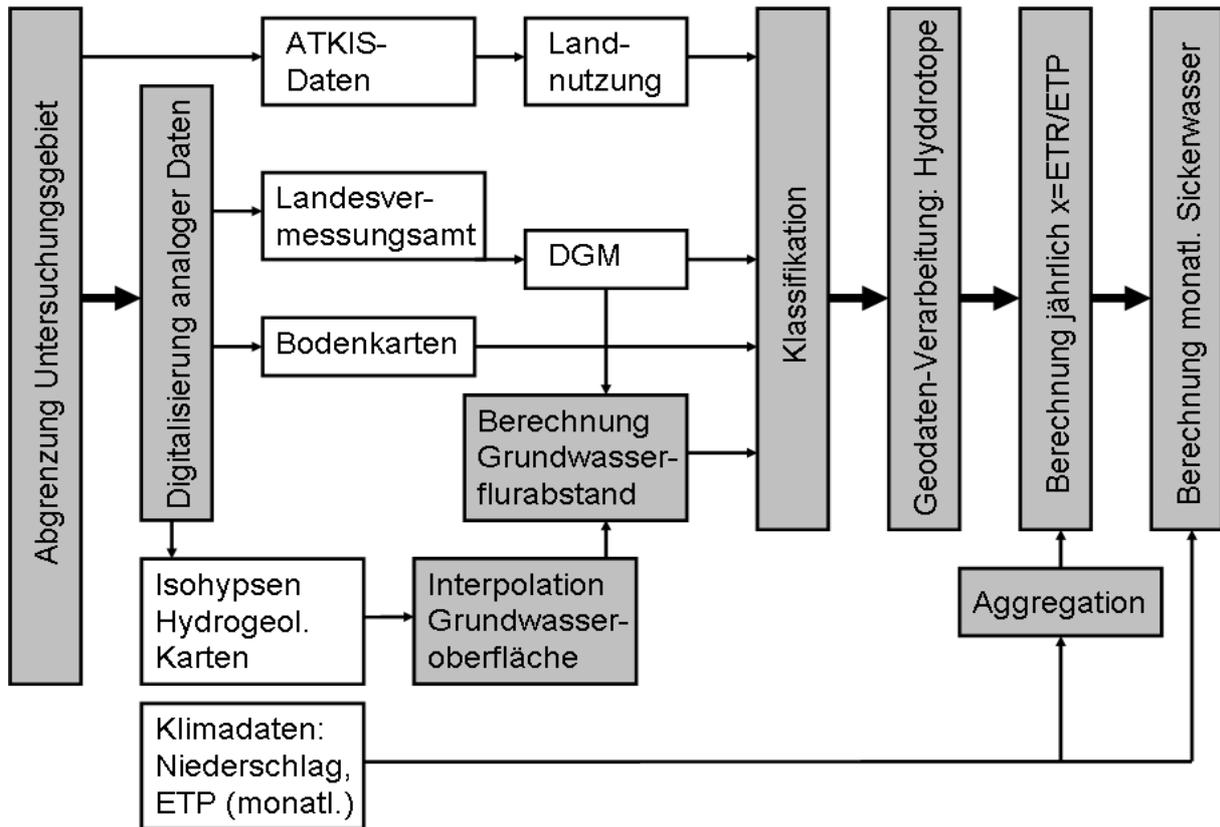


Abbildung 32: Arbeitsablauf der Sickerwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.

Wesentlich für die Umsetzung des Verfahrens sind GIS, mit denen die notwendigen Verschneidungen der ausschließlich zweidimensionalen Informationen durchgeführt werden. Dabei können die Funktionserweiterungen leicht programmiert werden. Die Informationen über Bodenparameter, Landnutzung und klassifizierten Grundwasserflurabstand wurden aus den entsprechenden Karten digitalisiert. Der gesamte Arbeitsablauf der Sickerwassermodellierung ist in Abbildung 32 wiedergegeben.

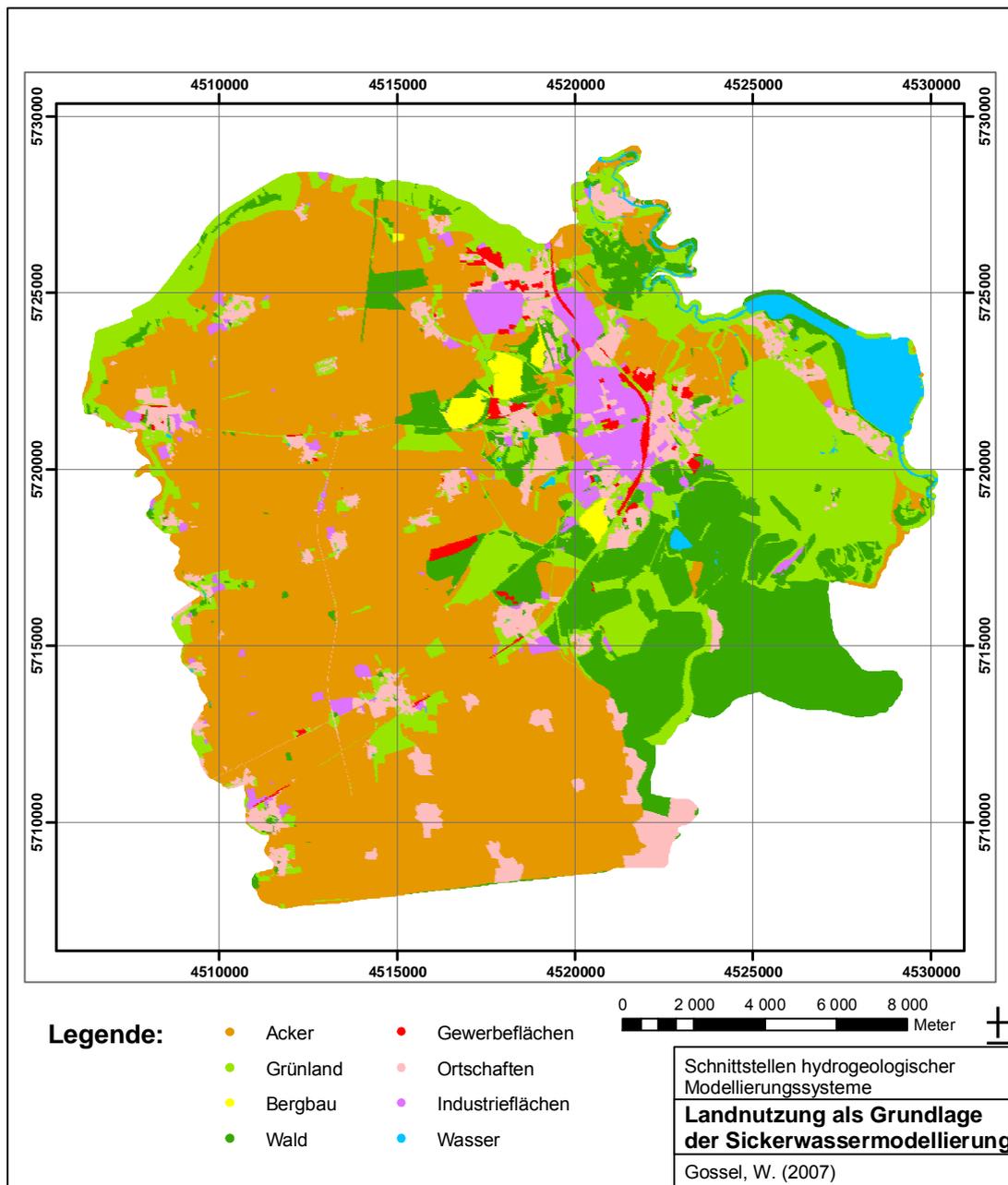


Abbildung 33: Räumliche Eingangsdaten der Sickerwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne. Die Daten zu Landnutzung, Boden und Grundwasserflurabstand wurden in klassifizierter Form im 25 m-Raster verarbeitet.

A: Landnutzung

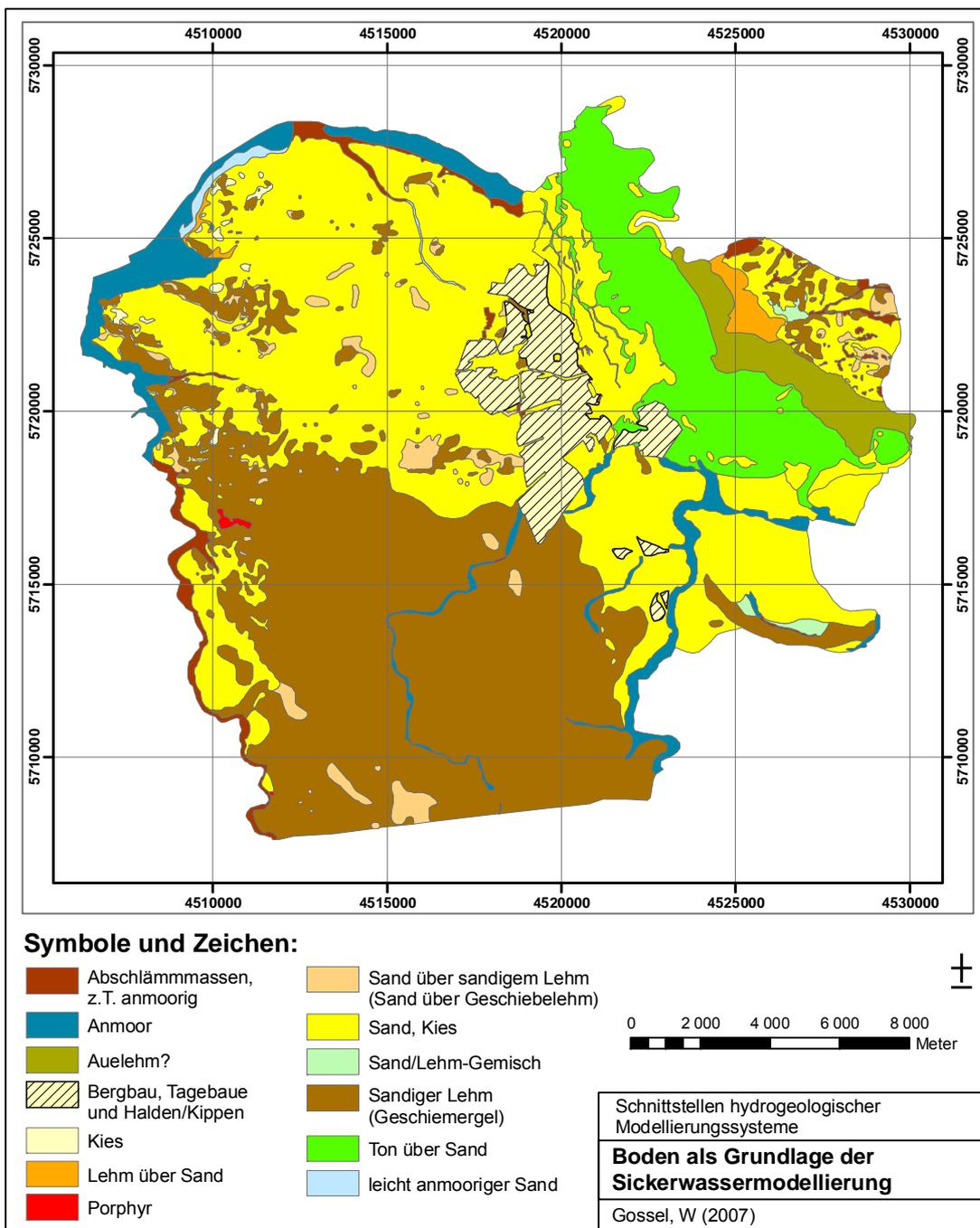


Abbildung 33: Räumliche Eingangsdaten der Sickerwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne. Die Daten zu Landnutzung, Boden und Grundwasserflurabstand wurden in klassifizierter Form im 25 m Raster verarbeitet.

B: Boden

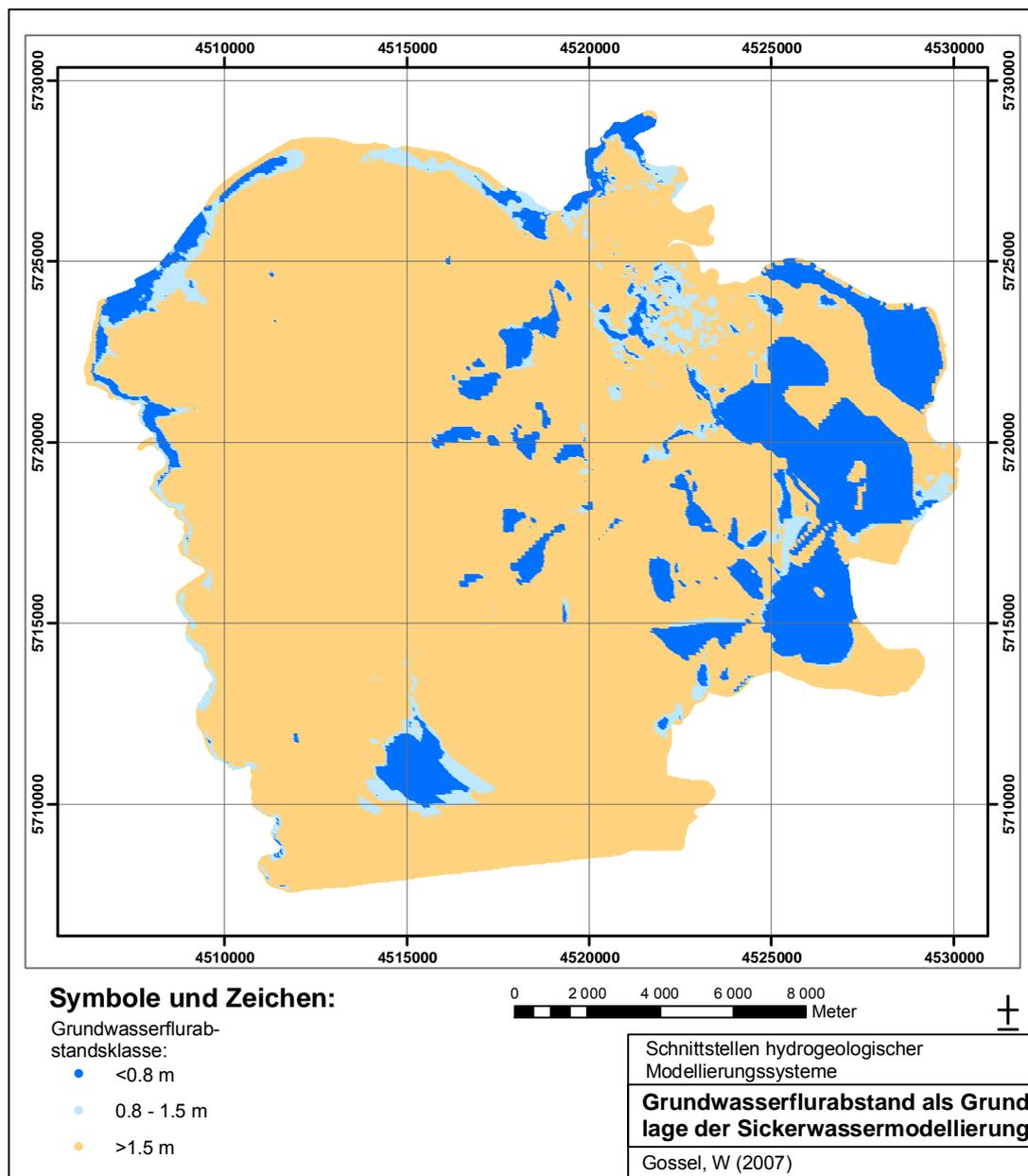


Abbildung 33: Räumliche Eingangsdaten der Sickerwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne. Die Daten zu Landnutzung, Boden und Grundwasserflurabstand wurden in klassifizierter Form im 25 m Raster verarbeitet.

C: Grundwasserflurabstand

Als Beispiele für die Ergebnisse sind in Abbildung 34 die mittleren Sickerwassermengen in ihrer räumlichen Verteilung und in Abbildung 35 als zeitabhängige Ganglinie wiedergegeben.

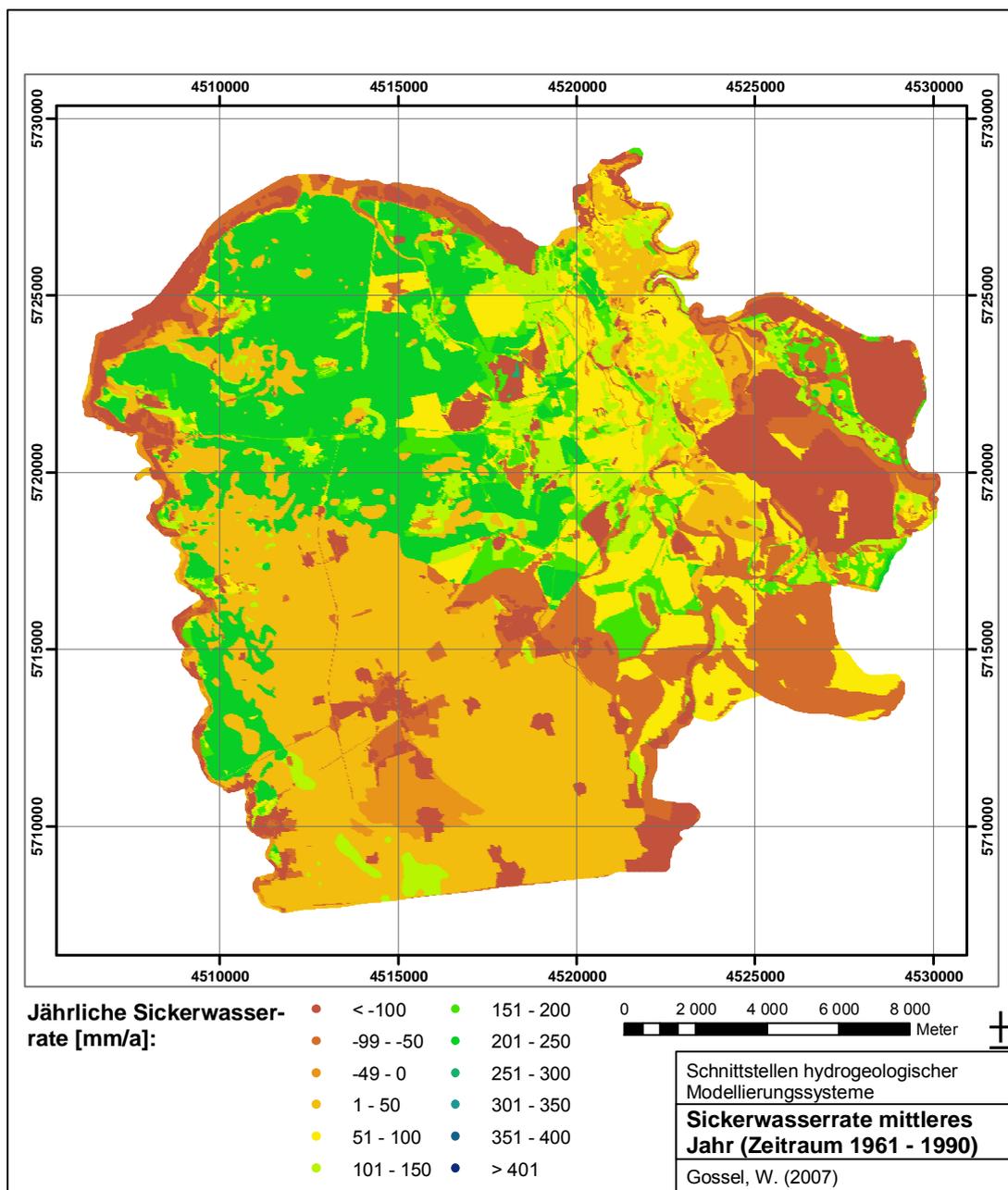


Abbildung 34: Räumliche Verteilung der Sickerwassermenge für a) ein mittleres, b) ein trockenes und c) ein nasses Jahr. Die Berechnungsmethode von WESSOLEK ET AL. (2004) wurde für die weitere zeitliche Auflösung in Monatsmittelwerte modifiziert.

a) Mittleres Jahr des Zeitraums 1961 - 1990

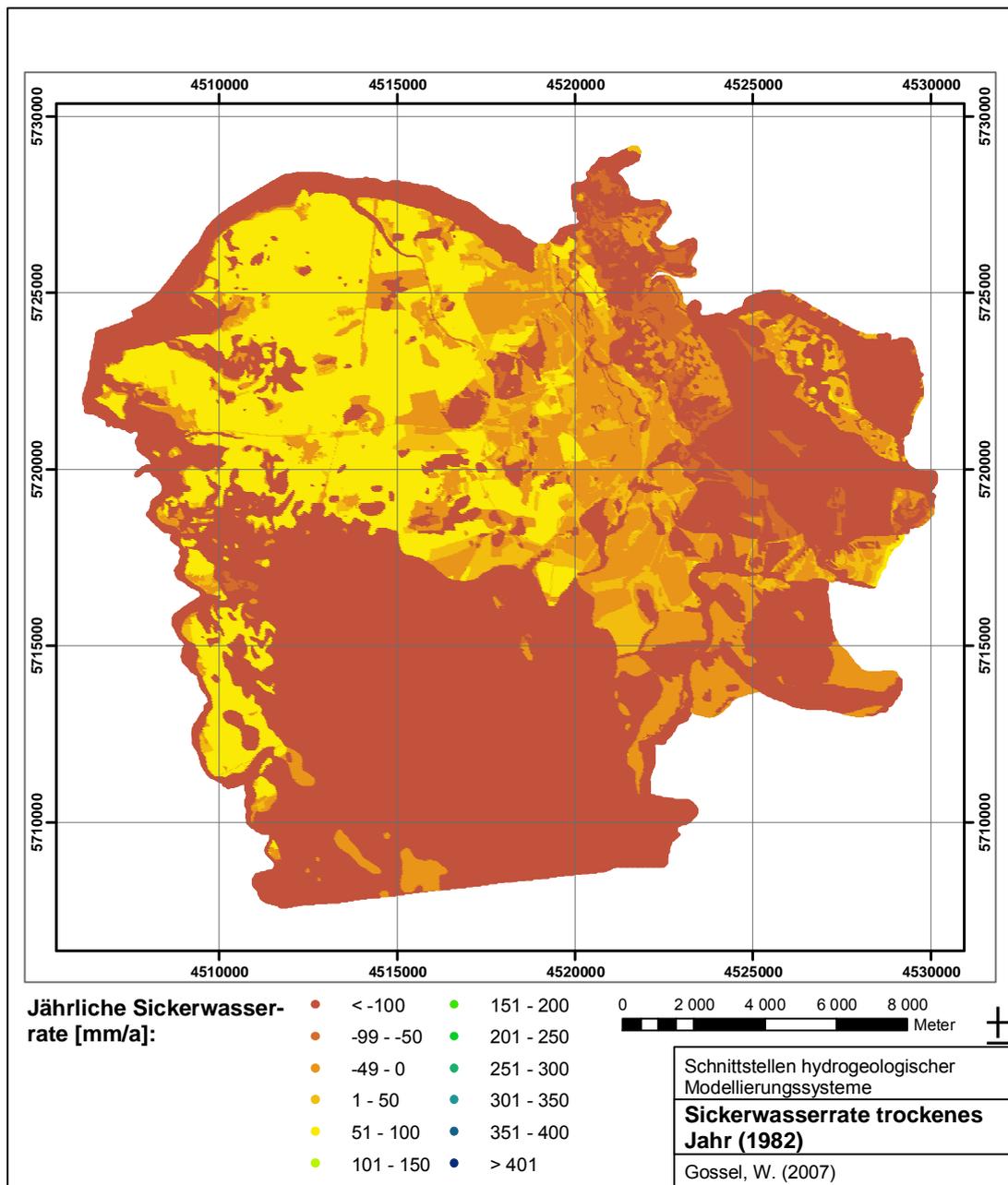


Abbildung 34: Räumliche Verteilung der Sickerwassermenge für a) ein mittleres, b) ein trockenes und c) ein nasses Jahr. Die Berechnungsmethode von Wessolek et al. (2004) wurde für die weitere zeitliche Auflösung in Monatsschritte modifiziert.

b) Trockenes Jahr (1982)

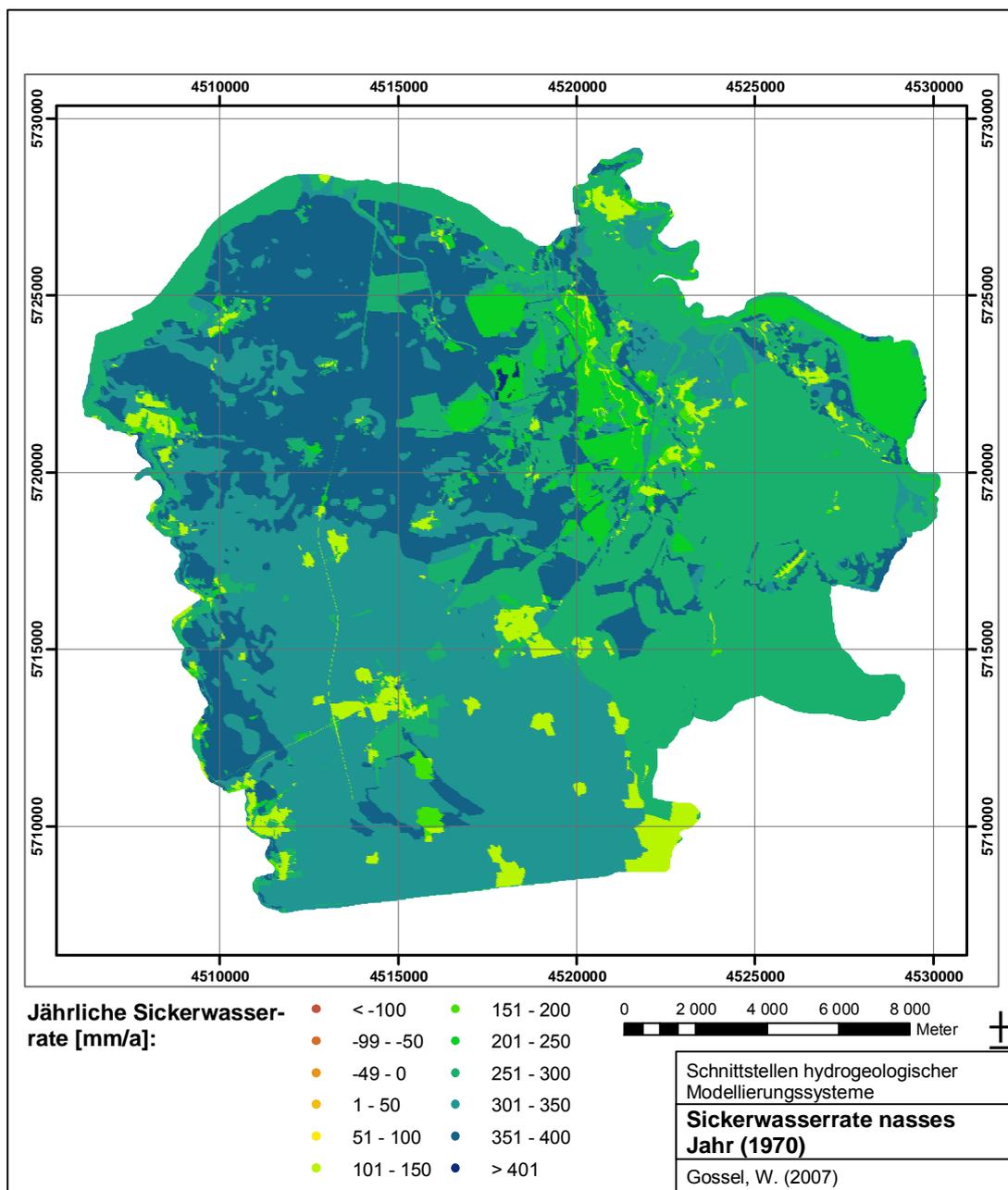


Abbildung 34: Räumliche Verteilung der Sickerwassermenge für a) ein mittleres, b) ein trockenes und c) ein nasses Jahr. Die Berechnungsmethode von Wessolek et al. (2004) wurde für die weitere zeitliche Auflösung in Monatsschritte modifiziert.

c) Nasses Jahr (1970)

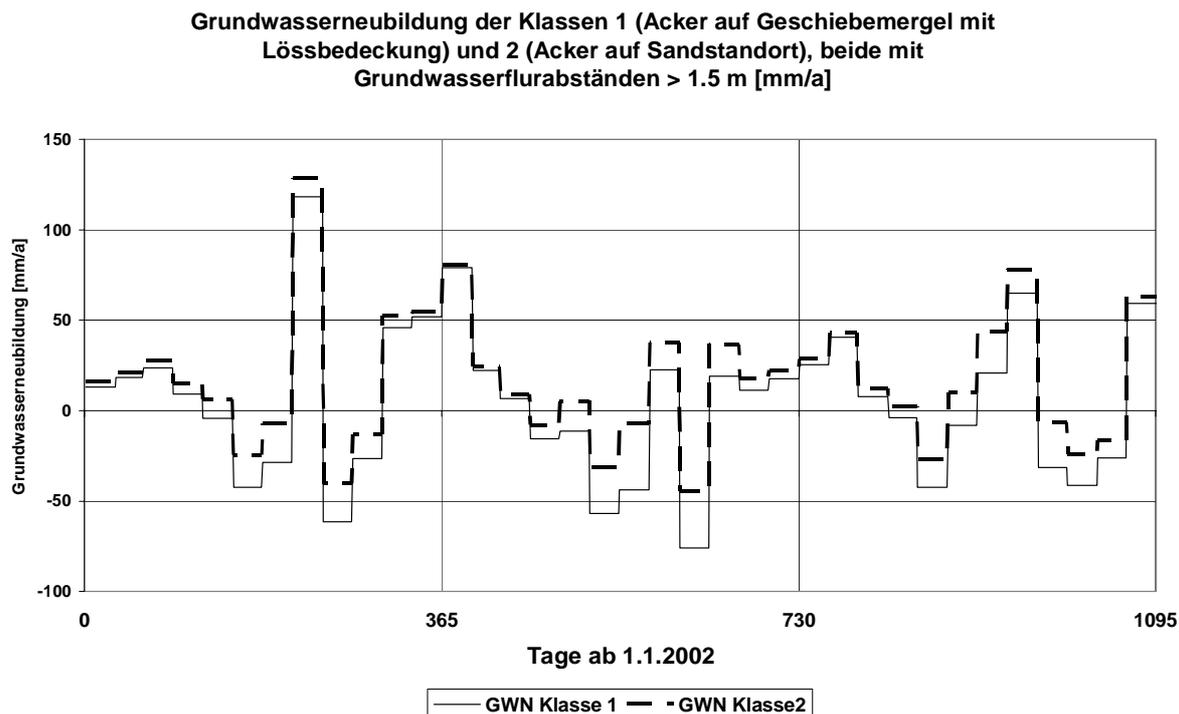


Abbildung 35: Ganglinie der monatlichen Sickerwassermenge zweier Hydrotope in den Jahren 2002 bis 2004.

Bei der Ergebnisauswertung ist zu beachten, dass ähnlich wie in CHOWANIETZ & GOSSEL (1997) und in NEUMANN (2005) festgestellt, die zeitliche und die räumliche Variabilität nahezu gleich groß sind. Eine Vernachlässigung der zeitlichen Dimension durch Zugrundelegung von Jahresmittelwerten für den gesamten Zeitraum ist unter diesem Aspekt kritisch zu bewerten. Die im Gebiet vorhandene Dynamik des Wasserhaushalts wird dadurch nicht adäquat wiedergegeben.

Modellierung der ungesättigten Zone

Das Modell der ungesättigten Zone wurde im Rahmen der durchgeführten numerischen Grundwassermodellierung angekoppelt. Dabei wurden für die Modellierung des Wasserhaushalts zwei verschiedene Methoden eingesetzt:

- Die sehr stark simplifizierende Methode des vertikalen Zustroms von Sickerwasser zum Grundwasser mit einer Verzögerung von 1 Tag pro m ungesättigte Zone bedeutet bei der zeitlichen Auflösung von 30 Tagen, dass lediglich für Grundwasserflurabstände > 30 m relevante Zeitverschiebungen implementiert werden müssen. Die betreffenden Gebiete sind entsprechend klein.
- Für die dreidimensionale Modellierung der ungesättigten Zone sind Mächtigkeit und struktureller Aufbau vom geologischen Modell sowie vom numerischen Modell übernommen worden. Die Eingangsparameter sind bei diesem Modellierungsansatz unter Ansatz der Mualem-vanGenuchten-Funktion vom Grundwassermodellierungssystem zu übernehmen. Lediglich die Anfangsbedingungen sind zu setzen. Die Kopplungen zwischen numerischem Grundwassermodell und Modell der ungesättigten Zone sind in Kap. 3 näher beschrieben.

Die Kleinräumigkeit der Bereiche mit mächtiger ungesättigter Zone stand in ungünstigem Verhältnis zu dem instabilen Verhalten.

Numerische Grundwasserströmungsmodellierung

Primäres Ziel des numerischen Grundwasserströmungsmodells Untere Mulde/Fuhne ist die in dieser Arbeit darzustellende Untersuchung von Schnittstellen und Koppelungsmöglichkeiten zu geologischen und hydrologischen Modellierungssystemen in Form einer Prinzipstudie. Sekundäre Aufgabenstellung war die Modellierung der Auswirkungen des über 150 Jahre im Großraum Bitterfeld betriebenen Braunkohlentagebaus auf die Grundwasserfließverhältnisse. Aufgrund dieser beiden Ziele ist eine dreidimensionale Modellierung notwendig. Der Ablauf der durchgeführten Arbeiten ist in Abbildung 36 grafisch wiedergegeben.

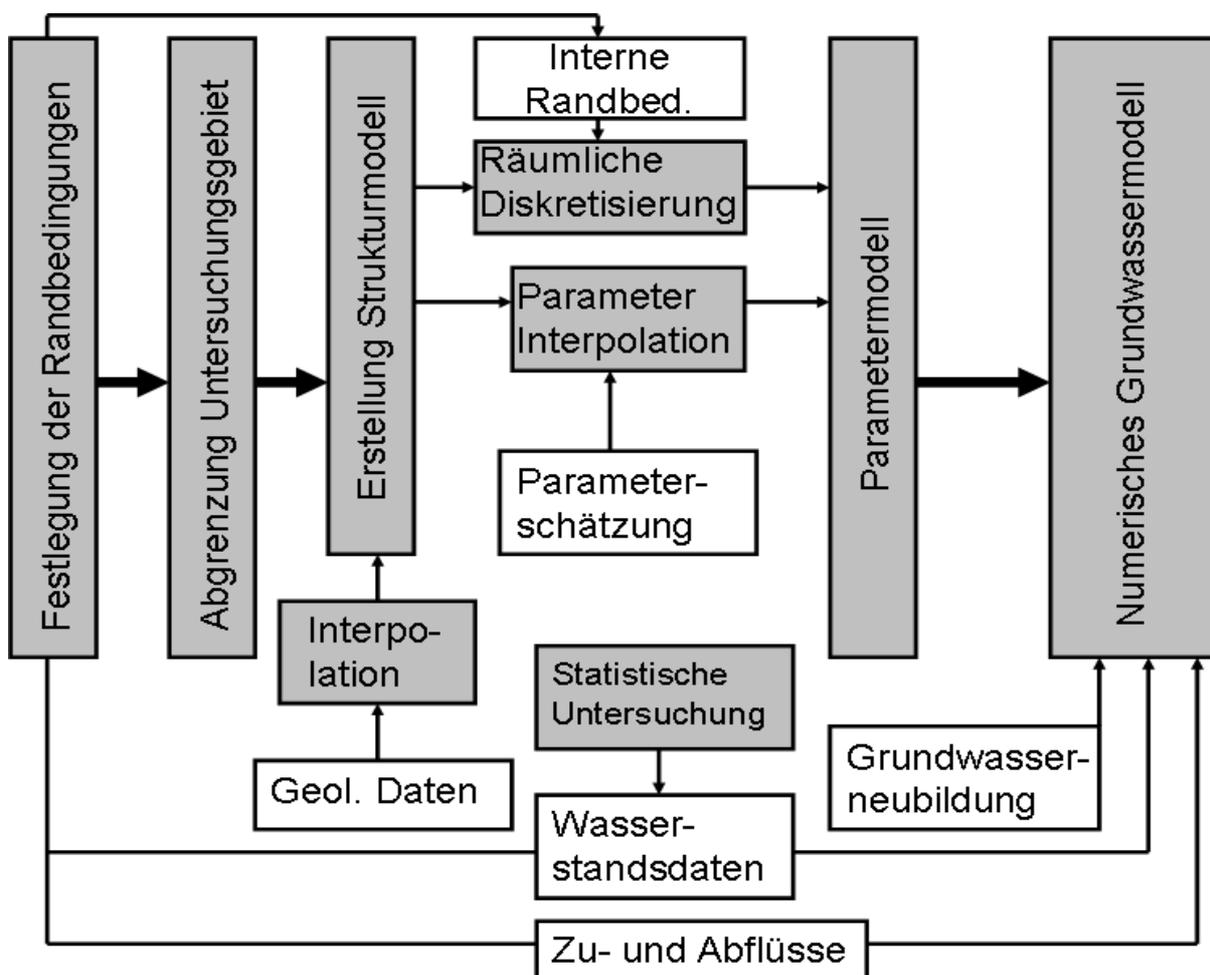


Abbildung 36: Arbeitsablauf der numerischen Grundwassermodellierung im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.

Das numerische Grundwasserströmungsmodell wurde als Finite-Elemente-Modell auf der Basis des regionalen geologischen Modells (s.o.) mit dem eingepassten Detailmodell erstellt. Für die räumliche Dimensionierung wurden mit Ausnahme der südlichen Randbedingung ausschließlich hydrologische Randbedingungen in Form entlastend wirkender Flüsse und Bäche genutzt. Im Westen des Modellgebiets stimmen hydrologische und geologische Randbedingungen durch Grundgebirgsauftragungen weitgehend überein. Das geologische Modell musste jedoch in geeigneter Weise angepasst werden, denn geologische Modelle enthalten insbesondere in fluvial, glazial und periglazial geprägten Gebieten ausgeprägte Schichten, linsenförmige Einheiten

und Rinnen, die in ihrer Komplexität ohne Informationsverlust in das numerische Grundwassermodell zu übertragen sind, obwohl dort alle Schichten aus modelltechnischen Gründen vollständig im Modellgebiet vorhanden sein müssen. Weiterhin ist eine Parameterisierung auf der Grundlage der stratigrafischen Einheiten nicht sinnvoll, sondern die Parameter sollten eine begründete räumliche Verteilung aufweisen. Hierfür wurden insbesondere die lithologischen Bohrinformationen sowohl im Detailgebiet, wo sie sehr differenziert vorlagen, als auch aus den Kartenwerken in geeigneter Weise übernommen. Bei den Tagebaugebieten musste der Kompromiss der Übernahme des Status quo getroffen werden, da die historischen Unterlagen über die Tagebauaktivitäten nur in wenigen Zeitschnitten in Form von topographischen Karten vorlagen. Die Schichtgeometrien des geologischen Modells mussten gerade in diesen Gebieten sehr stark überarbeitet werden, um numerische Probleme an den steilen Tagebauflanken zu vermeiden. Zu diesem Zweck wurden die Schichten in ihrer Höhenlage meist durch den Tagebau hindurch modelliert und die Parameterisierung durch Zuweisung der hydraulischen Durchlässigkeit des Kippenmaterials angepasst. In Abbildung 37 ist das regionale Grundwassermodell in einer Übersicht dargestellt.

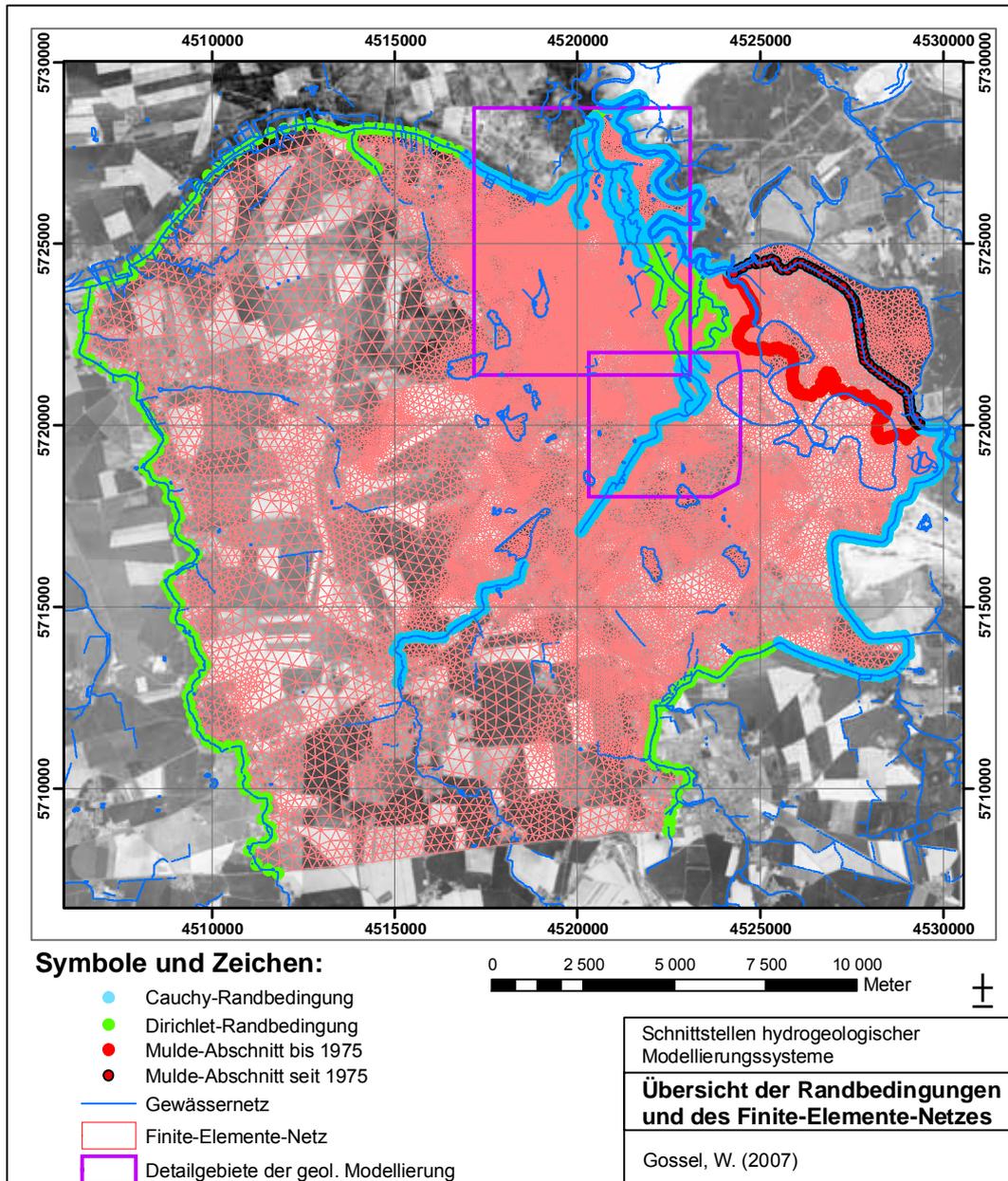


Abbildung 37: Übersicht des hydrogeologischen Regionalmodells. Grundlage ist ein Finite-Elemente Modellierungssystem, in dem die horizontale Diskretisierung sehr variabel gestaltet werden kann. Die Randbedingungen wurden im Norden, Osten und Westen mit zeitlich variablen Wasserständen (Dirichlet-Randbedingung) vorgegeben, im Süden wurde eine Wasserscheide (von Neumann Randbedingung) genutzt. Zusätzlich wurden diejenigen Bäche, die eindeutig an das Grundwasser angeschlossen sind, als interne Randbedingungen mit variablem Wasserstand übernommen.

Die Grundwasserneubildung ist neben der wichtigen Funktion als Wasserhaushaltsgröße auch als Eingangsparameter für die numerische Modellierung von Grundwasserströmung und -transport von Bedeutung. Sie wurde entsprechend der Zielstellung mit einer monatlichen Auflösung flächendifferenziert übernommen.

Für die Randbedingungen wurden für einen Teil der Oberflächengewässer auf statistischer Basis Ganglinien generiert. Sie spiegeln in generischer Weise das periodische Auftreten von Hochwasser in der Mulde und den tributären Bächen im Nordosten des Gebiets wider (s.u.). Im Norden und Westen sowie Südosten des Gebiets

wurden vereinfachend konstante Wasserspiegel vorgegeben, da in den dortigen Flachlandflüssen keine derart ausgeprägten Hochwässer auftreten wie an der Mulde.

Das Modell wurde in 10 Einzelmodelle gegliedert, um die Tagebauentwicklung (s. Abbildung 38) und die Flussverlegung der Mulde Ende 1975 adäquat implementieren zu können. Hierbei müssen die Wasserstände des Vorgängermodells jeweils an das nachfolgende Modell übergeben werden, was eine insgesamt sehr lange Rechenzeit zur Folge hat. Als Startpunkt wurde ein stationäres Modell ohne Tagebaueingriffe und mit mittleren Wasserständen der Gewässer gerechnet, wobei natürlich der ursprüngliche Verlauf der Oberflächengewässer, der aus entsprechenden Karten zu entnehmen ist, zugrunde gelegt werden musste.

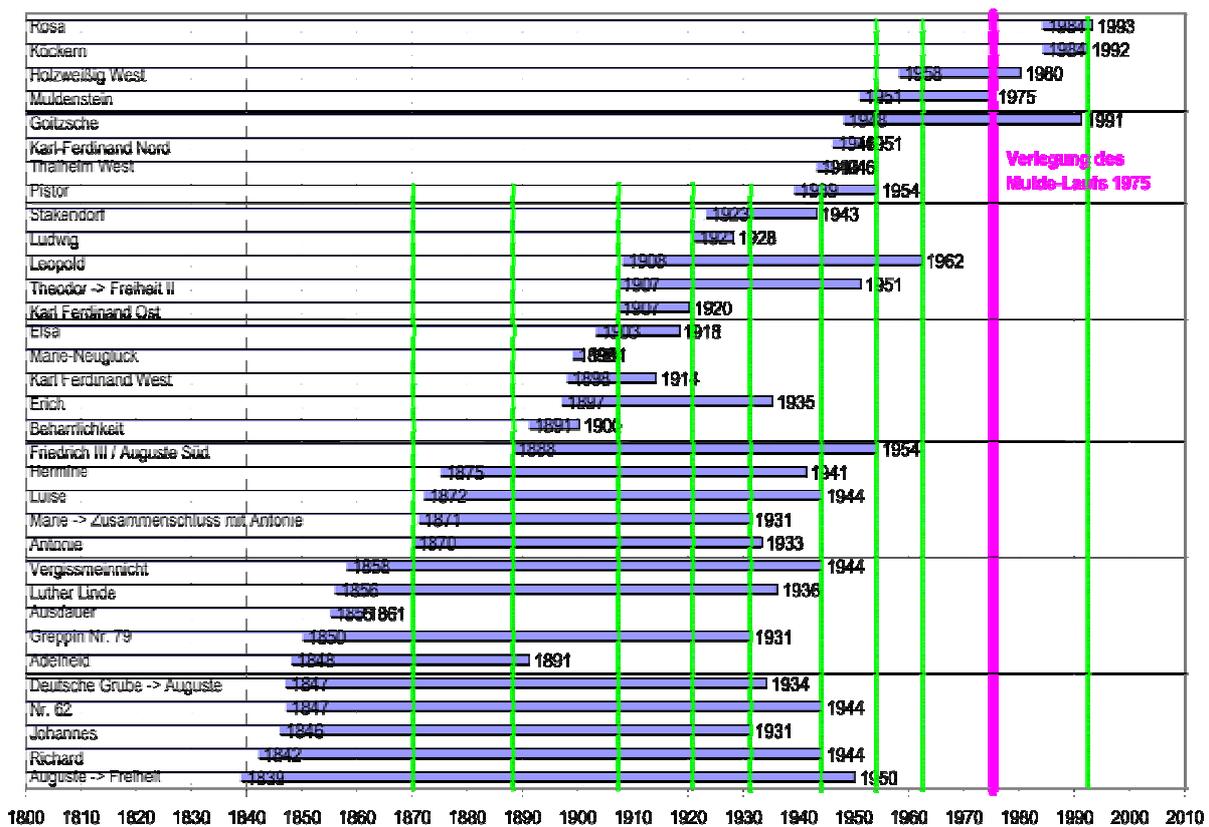


Abbildung 38: Tagebauentwicklung im Großraum Bitterfeld. Für die Modelle wurden die grün gekennzeichneten Zeitschnitte gewählt, um die Randbedingungen optimal anpassen zu können.

Den Übergang vom Strömungs- zum Transportmodell bilden die „Pathline“-Berechnungen. Hierbei werden die dreidimensionalen Bewegungsbahnen eines repräsentativen Elementarvolumens dargestellt. Insofern passen die Begriffe Stromlinien (lediglich zweidimensional auf dem Grundwassergleichenplan basierend) und Bahnlinien (Bewegung eines Wassermoleküls ohne Berücksichtigung des Kontinuumsansatzes) nicht. Diese Pathlines werden der Einfachheit halber und wegen der notwendigen Aufteilung in zeitlich aufeinander folgende Modelle nur stationär berechnet. Abbildung 39 zeigt deutlich anhand von fünf Zeitschnitten die sehr unterschiedlichen Strömungszustände, die sich aus den Sümpfungsmaßnahmen der Tagebaue ergeben.

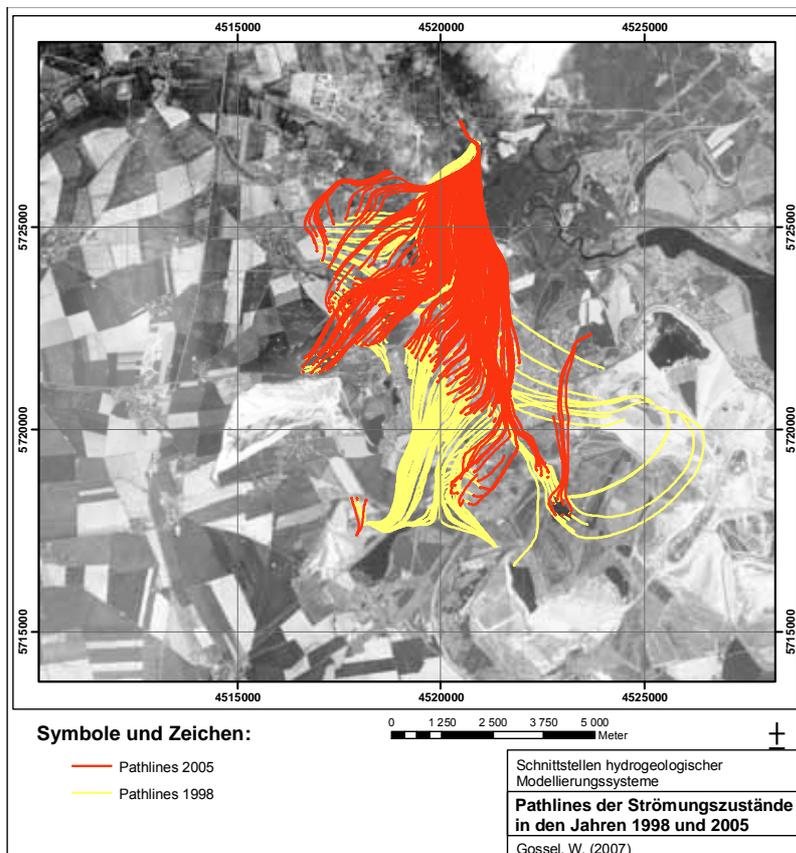
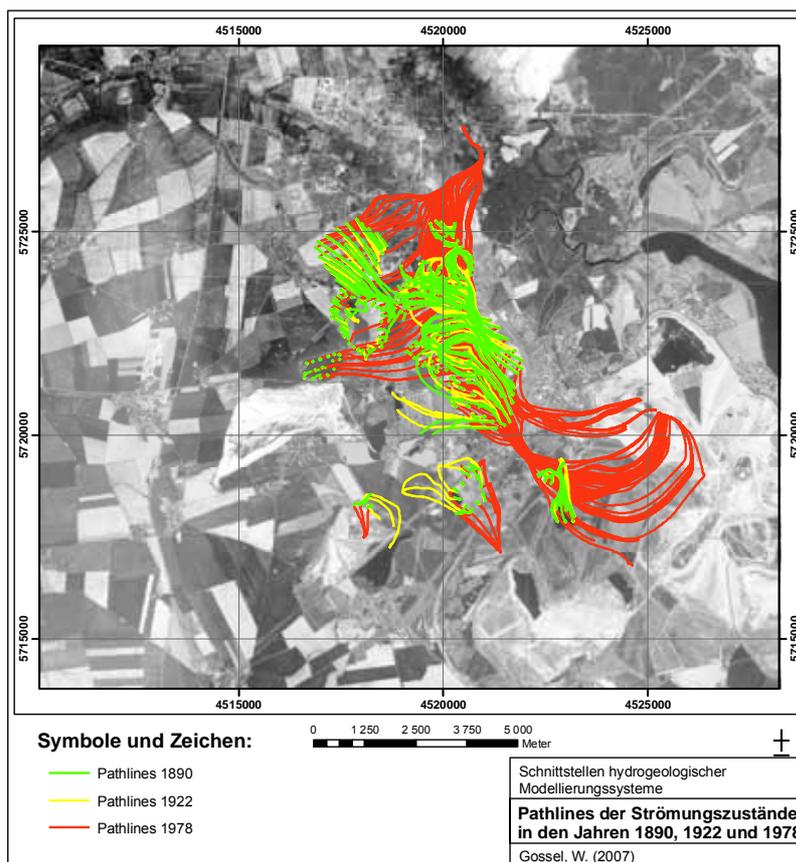


Abbildung 39: 2D-Projektion der Pathlines der Strömungszustände a) 1890, 1922 und 1978, b) 1998 und 2005. Die Startpunkte der Berechnung wurden für alle Zeitpunkte gleich gesetzt.

Die Modellierung der starken Grundwasserabsenkungen und des nachfolgenden Wiederanstiegs bereitet den meisten Modellierungswerkzeugen große Probleme. Zur Vermeidung numerischer Instabilitäten (Zellen sind nicht mehr (teil-)gesättigt und können beim Wiederanstieg auch nicht neu gesättigt werden) müssen verschiedene Strategien eingesetzt werden, von denen hier nur die Veränderung der Strukturen des Modells während des Modelllaufs unter Beibehaltung der Parameter und die Erfüllung mit einer äußerst geringen Restwassermenge genannt seien.

Numerische Grundwassertransportmodellierung

Der numerischen Transportmodellierung im gesättigten Bereich lag das oben beschriebene numerische Grundwasserströmungsmodell zugrunde. Es wurde um die Transportparameter Diffusion und Dispersion, in einem zweiten Schritt auch um die Adsorption erweitert. Auf eine Modellierung mit biologischem Abbau wurde verzichtet, da hierfür die Datengrundlagen fehlen. Auch hierbei handelt es sich also um eine Prinzipstudie, bei der es weder um eine Modellierung aller Prozesse noch um eine möglichst große Nutzbarkeit für technische Fragestellungen geht. Die Notwendigkeit einer prognostischen Modellierung ist daher eingeschränkt.

Die Modellierung ohne Adsorption gibt das Verhalten eines idealen Tracers wieder. Die zeitliche Teilung des Modells macht eine Übergabe der Stoffverteilungen von einem Modellabschnitt zum nachfolgenden notwendig.

Hydrologische Modelle

Die hydrologischen Einflussgrößen im Modellgebiet wurden fast ausschließlich auf der Grundlage statistischer Methoden modelliert.

Niederschlag

Monatliche Niederschlagssummen lagen heterogen für mehrere Stationen vom DWD (2005) für die Reihe 1947 bis 1990 vor. Ab 1990 wurden tägliche Messungen der nur etwa 10 km außerhalb des Modellgebiets liegenden Klimastation Schkeuditz (DEUTSCHER WETTERDIENST DWD 2007) aggregiert, wobei die Zulässigkeit der Nutzung dieser Datenreihe für das Modellgebiet durch eine Korrelation über einen Zeitraum von 20 Jahren geprüft wurde. Problematischer gestaltete sich die Datenreihe vor 1947. Aus dem Modellgebiet lagen keine Messwerte vor. Daher wurden die Monatssummen der Jahre 1947 bis 1990 mit denen der in CHOWANIETZ & GOSSEL (1997) zusammengetragenen Werte aus Berlin verglichen (Jahresreihen 1947 bis 1990 der Station Dahlem, FU Berlin). Der Korrelationskoeffizient zeigte eine hohe Übereinstimmung, sodass für den Zeitraum 1850 bis 1947 mit den auf der Grundlage der Korrelationsgeraden korrigierten Berliner Daten gearbeitet werden konnte.

Potentielle Evapotranspiration

Wie bereits beschrieben, wurde die Potentielle Evapotranspiration nach dem Verfahren von TURC (1961) berechnet. Hier sind die Datenreihen derselben Messstationen genutzt worden wie bei den Niederschlägen.

Wasserstandsganglinie der Mulde

Die Mulde ist die dominierende Randbedingung im Osten und Nordosten des Gebiets. Durch ihren Ursprung im Erzgebirge weist sie wegen der Schneeschmelze im Einzugsgebiet eine sehr hohe Dynamik im späten Winter auf. Tägliche Wasserstandswerte liegen für den Zeitraum 1996 bis 2005 (LHW 2005) vor. Daraus wurde

mittels Zeitreihenanalyse eine signifikante periodische Ganglinie generiert. Die Spitzen im Februar/März wurden über Mittelwerte der Zeitpunkte auf diese Ganglinie aufgesetzt. Diese konstruierte Jahres-Zeitreihe wurde für den gesamten Modellierungszeitraum mangels besser geeigneter Daten zugrunde gelegt. Einige Kritikpunkte an dieser Vorgehensweise können nicht übergangen werden:

- Die Charakteristik des Einzugsgebiets der Mulde hat sich in diesem sehr langen Zeitraum sicher stark verändert.
- Eine engere Bindung an die Klimadaten ist nicht erfolgt, weil entsprechende Korrelationen mit den vorhandenen Daten des Modellgebiets (selbstverständlich) keine sinnvollen Ergebnisse zeigten.
- Wasserbauliche Maßnahmen haben das Abflussverhalten des Flusses in dem sehr langen Zeitraum stark verändert.

Trotz dieser Einschränkungen der Gültigkeit der Modellannahmen haben sich erstaunliche Übereinstimmungen zwischen Messwerten und Modellergebnissen herausgestellt. So kann die Dynamik der Bäche im Nordosten des Gebiets durchaus mit der Speisung aus der Mulde über den quartären Grundwasserleiter erklärt werden, ohne dass ein (nicht beobachteter) Rückstau von der Mulde aus angenommen werden muss. Diese Dynamik der Mulde wirkt sich nur auf einen Teil der Bäche aus; andere sind davon unbeeinflusst.

Gemessene und modellierte Wasserstandsganglinie Mulde

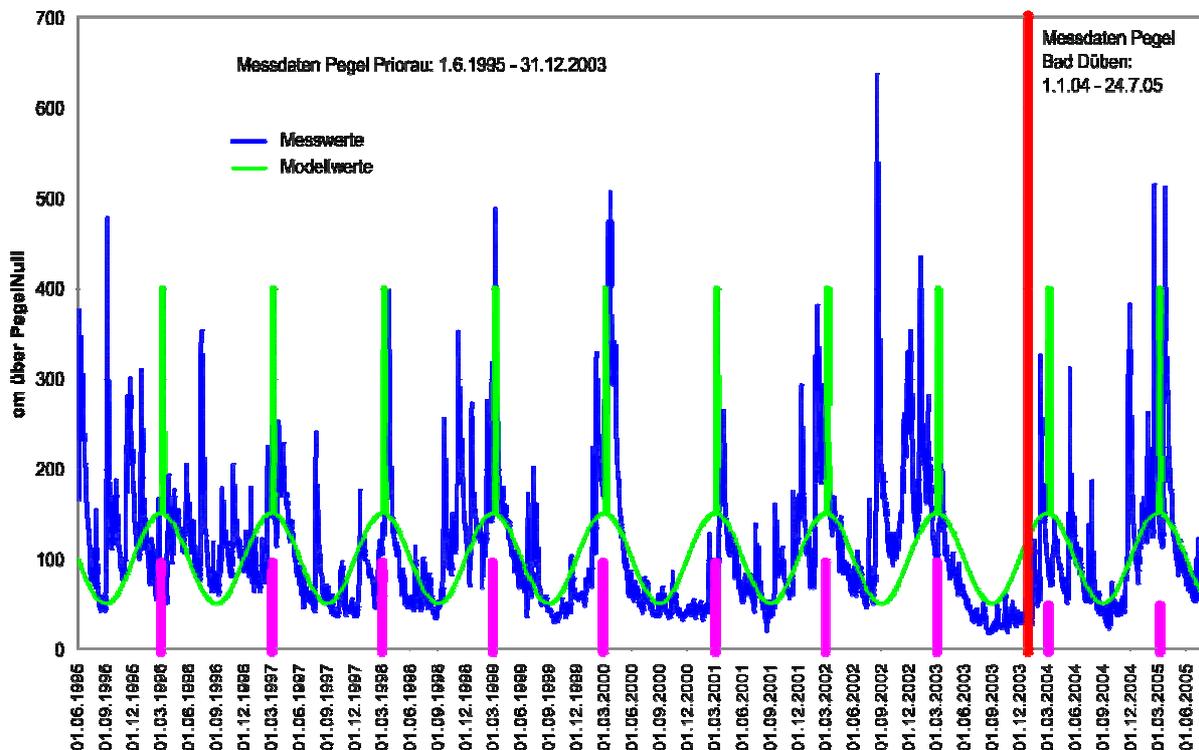


Abbildung 40: Wasserstandsganglinien der Mulde. Der Vergleich der gemessenen und modellierten Ganglinien zeigt, dass das Modell die Werte nicht im Detail, sondern nur im generellen Verlauf wiedergibt. Die violetten Linien sind zu den Zeitpunkten der Frühjahrshochwässer im März positioniert. Der Korrelationskoeffizient für die Datenreihe von 3707 Mess- und Modellwertepaaren liegt bei 0.31, das 99%-Vertrauensintervall ist damit erfüllt.

Oberflächenwasserabfluss einiger Bäche im Nordosten des Modellgebiets

Im Rahmen eines Projektes wurden im Zeitraum Februar 2005 bis April 2006 14tägig die Abflüsse und die Belastungen mit bestimmten Kontaminanten an einigen Bächen im Nordosten des Modellgebiets gemessen, um die Dynamik des Stoffaustrags aus dem Grundwasser in die Oberflächengewässer zu erfassen (NEUMANN & WYCISK 2006). Diese Messungen ermöglichten die Modellierungen der Randbedingungen in diesem Teil des Modellgebiets und machten die Abhängigkeiten zwischen der Mulde und diesen Vorflutern deutlich. Echte Oberflächenwassermodellierungen (Gerinne-modellierungen) wurden nicht durchgeführt.

Umweltgeologische Modellierungen

Im Modellgebiet wurden sehr viele umweltgeologische Untersuchungen durchgeführt, die sich meist auf die Altlastenproblematik bezogen (WEIß ET AL. 2002). Modellierungen wurden jedoch nur in den seltensten Fällen durchgeführt. Die folgenden Ausführungen beziehen diese Untersuchungen daher nicht mit ein.

Für die statistischen Untersuchungen von THIEKEN (2001) wurden Statistikwerkzeuge, wie sie auch in anderen Wissenschaftsbereichen genutzt werden, eingesetzt. Faktoren- und Clusteranalysen sind weit verbreitet und lieferten für die Fragestellungen sehr weitgehende Ergebnisse. Die in BRÜGGEMANN ET AL. (1999) umgesetzte Hasse-Diagramm-Technik ermöglichte die Kategorisierung und Ordnung von (Schad-) Stoffmustern und Regionalverteilungen.

Die 2.5D-Interpolationen physikochemischer und chemischer Grundwasserparameter von RICHTER (2003) und RICHTER ET AL. (2004) wurden mit Standardtools der Geostatistik unter Beachtung der Datenanalyse durchgeführt. Im Unterschied zu WYCISK & GRATHWOHL (2005) kamen keine echten 3D-Interpolationsmethoden zum Einsatz. Die aus den geologischen Modellen abzuleitenden strukturellen Differenzierungen nach hydrostratigrafischen Kriterien wurden bereits übernommen. So konnten für die beiden dominierenden Grundwasserleiter getrennte Verteilungen berechnet werden. Zusätzlich wurden weitere Modellvorstellungen berücksichtigt wie z.B. die geothermischen Gradienten und Mittelwerte bei der Ermittlung von Temperaturanomalien im Gebiet. Ein erster Einstieg in die Berechnung von echten 3D-Verteilungen stellten die in WYCISK & GRATHWOHL (2005) wiedergegebenen Schadstoffverteilungen dar. Sie wurden mit geostatistischer Spezialsoftware erstellt, die allerdings ohne Berücksichtigung hydrogeologischer Strukturen und hydrodynamischer Parameter arbeitet.

3.8.4 Beispiele für die Implementation von Modellierungssystemen in Werkzeugen

Die Modellierungssysteme sind heute in einer nahezu unübersehbaren Fülle von Werkzeugen umgesetzt. Die im Folgenden genannten Werkzeuge wurden mehr oder weniger für die Beispielmuster eingesetzt. Die Darstellung kann aus mehreren Gründen keine Bewertung für ihren Einsatz bei der Lösung von oft sehr spezifischen Modellierungsaufgaben vornehmen:

1. Die Werkzeuge befinden sich in einem sehr raschen Wandel. Etwa jedes Jahr werden von den Entwicklern neue Bausteine hinzugefügt, komplette Überarbeitungen vorgenommen, alte Formate oder Bestandteile herausgenommen. Dieser sehr rasche Wandel würde zu einer lediglich Schnappschuss-artigen

(Fehl-)Bewertung führen, die weder den Werkzeugen noch der vorliegenden Arbeit gerecht würde.

2. Die Fülle der Werkzeuge mit ihren jeweiligen Spezifika ist – zum Vorteil ihrer Nutzer – unübersehbar groß geworden. Es haben sich zwar sogenannte Marktführer etabliert, doch die Kraft zur Veränderung zeigen insbesondere die OpenSource-Werkzeuge auf. Es sind sehr viele Werkzeuge mit sehr spezifischen Methoden entwickelt worden, die mehr oder weniger schnelle und „findbare“ Lösungen für die verschiedenen Aufgabenstellungen während einer Modellierung bieten. Eine „Bewertung“ einer Auswahl würde diesem umfangreichen Angebot bei weitem nicht gerecht.
3. Es ist nahezu unmöglich, selbst grundlegende Werkzeuge wie GIS von einem Tag zum nächsten zu wechseln und zu „testen“, da jedes dieser Werkzeuge eine Einarbeitungszeit von mehreren Monaten bzw. bei komplexen Modellierungswerkzeugen von Jahren benötigt. Ein Vergleich kann unter diesem Gesichtspunkt nur die Schwächen und Vorlieben des Bearbeiters bei der Umsetzung einer Aufgabe, nicht aber die Vor- und Nachteile eines Werkzeugs bewerten. In Zeiten von OpenSource-Werkzeugen ist zudem die Frage nicht mehr die des Vorhandenseins von Eigenschaften oder Methoden sondern des ergänzenden Programmierens und selbsttätigen Verbesserns des Werkzeugs. Auch kommerzielle Produkte weisen oft Programmierschnittstellen auf, über die gewünschte Zusatzfunktionen implementiert werden können.

Aus diesen Gründen werden nur einige der eingesetzten Werkzeuge hier genannt, um die Lösungswege deutlich zu machen und um zur Entwicklung neuer Eigenschaften, Methoden und Schnittstellen zu ermutigen.

Zum Beispiel wurden neben einigen OpenSource-GIS, wie z.B. QuantumGIS©, SAGA© und GRASS© auch die Werkzeuge der Firma ESRI®, insbesondere ArcView®, aber auch ARC/INFO®, genutzt. Allein für ArcView® 9.x werden auf den Servern von ESRI derzeit (Mai 2007) etwa 1000 VBA-Scripte von ESRI-Nutzern bereitgestellt, die jeweils spezifische Ergänzungen darstellen. Eine ähnliche Größenordnung gibt es in der Programmiersprache Avenue für ArcView® 3.x, wobei manche Scripte erst in den Kommentaren dokumentiert sind. Einzelne Aufgaben, gerade im Bereich des Datenaustausches, können mit diesen Scripten gelöst werden – die Alternative ist die eigene Programmierung über die definierten Schnittstellen. Auf der anderen Seite sind die ESRI®-Werkzeuge auf die Verarbeitung von Flächendaten ausgerichtet und nicht für die Entwicklung von dreidimensionalen geologischen Modellen gedacht. Dennoch können Daten in beide Richtungen mit geologischen Modellierungswerkzeugen ausgetauscht werden, so dass ein integrativer Ansatz realisierbar ist.

Für die numerische Grundwassermodellierung wurden im Wesentlichen die Werkzeuge Visual Modflow® (Waterloo Hydrogeologic 2002) (ein Prä- und Postprozessor des freien Rechenkerns MODFLOW© (USGS 2000)) und Feflow® (WASY GmbH 2005) genutzt.

Die geologische Modellierung wurde mit den Werkzeugen GeoObject 2® (Insight Geologische Softwaresysteme GmbH 1998), GSI3D (Lithosphere GmbH 2006) und EVS/MVS® (CTech Inc. 2006) durchgeführt, aber für einige Modellierungsaufgaben reichten die Fähigkeiten von Visualisierungsmodulen bei den Interpolationswerkzeugen und GIS aus.

Im hydrologischen Bereich wurden die Sickerwassermodellierungen durchweg mit selbst geschriebenen Programmen (in den Programmiersprachen VB®, VBA® und C

bzw. C++) ausgeführt. Die Oberflächenwasser-„Module“ wurden ebenso selbst geschrieben, da es sich um statistische Aufgaben und nicht um die Berechnungen der Gerinnenströmungen handelte.

Für die ungesättigte Zone wurden beide Wege beschrrieben: Einfache Module wurden selbst geschrieben. Für komplexe Aufgaben und zum Vergleich mit den Ergebnissen der einfachen Methoden wurden Werkzeuge wie die WHI Unsat-Suite® (Waterloo Hydrogeologic 2002) und Hydrus1D© (SIMUNEK ET AL. 2005) eingesetzt.

Umweltgeologische Modellierungen werden nur in Ausnahmefällen durch spezielle Modellierungswerkzeuge, wie z.B. RBCA (RBCA Toolkit for chemical releases, GSI Environmental, 2007), RAM (Risk Assessment Model, ESI Environmental Simulations International Ltd, 2005) oder RISC (RISC4, ESI Environmental Simulations International Ltd, 2002) unterstützt. Meist reichen für diese Aufgaben Standard-GIS mit leichten Erweiterungen aus.

3.9 Modellierungssysteme in der Zusammenfassung

Die hier betrachteten Modellierungssysteme der Hydrogeologie stammen insbesondere aus den Bereichen Geologie, Sickerwassermodellierung, ungesättigte Zone und Strömungsmodellierungen der gesättigten Zone. Transportmodellierungen, hydrologische und umweltgeologische Modellierungssysteme werden nur am Rande betrachtet. Verfügbare Datenquellen und Eingangsdaten der Modellierungssysteme müssen aufeinander abgestimmt werden, was durch die Vielzahl der Modellierungssysteme erleichtert wird. Unter den Modellierungsmethoden werden bevorzugt deterministische Arbeitsweisen dargestellt, da bei ihnen Verhaltens- und Strukturgültigkeit in der Regel gewährleistet sind. Für Kopplungen von Modellierungssystemen ist es von besonderer Bedeutung, welche Methoden bevorzugt eingesetzt werden, da sich insbesondere statistische Methoden flexibler in Kopplungen einsetzen lassen als konstruktive Methoden.

In den Modellbeispielen wurden je nach Modellierungsaufgabe verschiedene Modellierungssysteme eingesetzt, was in Abbildung 41 zusammenfassend dargestellt ist.

Modellierungssystem, Kompartiment	Geologie	Sickerwasser	Ungesättigte Zone	Grundwasser	Hydrologie
Modellgebiet					
Subrosions-Talraum Unterwerra	konstruktiv	empirisch	-	Finite Elemente	statistisch und konstruktiv
Nubisches Aquifer System	geostatistisch	statistisch	-	Finite Elemente	statistisch und konstruktiv
Untere Mulde/Fuhne	konstruktiv und geostatistisch	empirisch	(Finite Elemente)	Finite Elemente	statistisch

Abbildung 41: Einsatz von Modellierungssystemen und -methoden in den Untersuchungsgebieten.

Bei den geologischen Modellierungssystemen sind die auf statistischen und deskriptiven Methoden aufbauenden Systeme bevorzugt worden, bei den Sickerwassermo-

dellierungen empirische Methoden. Für die nur in einem Fall für spezielle Bereiche getrennt zu modellierende ungesättigte Zone wurde der Einsatz von empirischen und numerischen Verfahren getestet. In der gesättigten Zone dominieren deterministische numerische Verfahren sowohl für die Strömungs- als auch für die Transportmodellierung. Hydrologische Modelldaten sind ausschließlich über statistische Modellierungen berücksichtigt worden.

4 Interaktionen von hydrogeologischen Modellierungssystemen

In Kapitel 3 wurden die Modellierungssysteme, die zur Modellerstellung notwendigen Daten und ihre methodischen Grundlagen dargestellt. Die in Kapitel 3.8 beschriebenen Beispiele zeigen, dass der Einsatz jedes einzelnen Modellierungssystems zu erheblich verbesserten Analysen führt und zur Klärung theoretischer und praktischer Fragestellung beiträgt. Die Beschreibungen der Arbeitsabläufe machen jedoch auch deutlich, dass komplexe und z.T. zeitaufwändige Arbeiten zur Erstellung eines Modells notwendig sind. Hydrogeologische Modellierungssysteme werden daher meist einzeln genutzt, da sie jeweils sehr hoch spezialisiert sind und die Modellierungswerkzeuge eine längere Einarbeitungszeit benötigen. Hierbei steht die Betrachtung einzelner Kompartimente, wie in Kapitel 2 beschrieben, im Vordergrund. Dennoch liegt die Notwendigkeit einer Berücksichtigung von jeweils angrenzenden Modellierungssystemen nahe. Besteht diese Verbindung nur in der direkten Belegung mit Parametern oder Randbedingungen, ist die Modellierung selbst meist nicht komplex, da sie einen zwar umfangreichen, aber von der Vielzahl der Parameter und Randbedingungen meist überschaubaren Datensatz umfasst. Bei der Kopplung von Modellierungssystemen erhöht sich die Komplexität stark, was zu der Frage der adäquaten Lösung eines (hydrogeologischen) Problems führt. Während HILL (2006) die Notwendigkeit einer einfachen, simplifizierten Modellierung und damit auch den Einsatz möglichst einfacher Modellierungssysteme und –werkzeuge hervorhebt, sieht GOMEZ-HERNANDES (2006) in der Komplexität, wenn auch auf bestimmte Teile der numerischen hydrogeologischen Modellierung bezogen, eine Chance für die Entwicklung realitätsnäherer Modelle. Die Sichtweise entscheidet besonders in der Phase der Entwicklung des konzeptionellen Modells und könnte somit leicht in den Bereich philosophischer Betrachtungen geschoben werden. Da jedoch auch die weitere Bearbeitung und die Nutzung bzw. Auswahl verschiedener Modellierungssysteme davon abhängt, müssen beide Entwicklungslinien komplexer Modelle hier eingehend dargestellt werden. Bereits die Definition von Komplexität macht gewisse Schwierigkeiten: SEPPELT (2003) leitet die Komplexität aus vier Größen ab:

1. Thermodynamische Offenheit des Systems.
2. Einbeziehung verschiedener Komponenten, d.h. von Modellierungssystemen verschiedener Kompartimente, aber auch – wie z.B. bei der Grundwasserströmungs- und –transportmodellierung – innerhalb eines Kompartiments.
3. Nicht-Linearität der Verknüpfungen von Modellierungssystemen.
4. Hohes Maß an Heterogenität in Zeit und Raum.

HILL (2006) quantifiziert die Komplexität anhand der Vielzahl von Parametern und Randbedingungen, die zur Modellierung benötigt werden.

GOMEZ-HERNANDES (2006) wählt die Unsicherheiten bzw. Unbestimmtheit der Parameter und Randbedingungen als Ausgangspunkt für die Bestimmung der Komplexität eines Modells.

Die Frage der Komplexität stellt sich grundsätzlich bei der Problemdefinition und Problemlösung und muss vor dem Hintergrund der vielen Möglichkeiten, die hydrogeologische Modellierungssysteme heute bieten, unter Berücksichtigung neuer Arbeitstechniken grundsätzlich angegangen werden.

Die in Kapitel 1.2 wiedergegebene Definition der Modellierung legt nahe, dass zunächst eine möglichst umfassende und genaue Beschreibung des Modellziels und der zu modellierenden Prozesse erfolgt. Die Verfügbarkeit von verifizierten (d.h. auf korrekte Umsetzung der in den Modellierungssystemen formulierten Grundlagen geprüften) Modellierungswerkzeugen für eine Vielzahl von Prozessen erleichtert diese Aufgabe. Für Prozesse, die nicht in Modellierungswerkzeugen umgesetzt sind, gibt es „Baukästen“, die Hilfestellung für die Ergänzung leisten (SEPPELT (2003)). Diese Vorgehensweise ist charakteristisch für die anwendungsbezogene Forschung. Bei grundlegenden wissenschaftlichen Fragestellungen sind die Ziele der Modellierung jedoch noch recht offen, was in der Natur des Forschungsansatzes liegt. Ein Ergebnis kann per definitionem in keinem Fall vorweggenommen werden. Geht man von dem zielorientierten anwendungsbezogenen Denkansatz aus, ergeben sich andere Techniken zur Modellierung, die direkt mit der Fragestellung der Komplexität und der Interaktion von Modellierungssystemen in einer Modellierungsstruktur zusammenhängen.

Eine zielorientierte Arbeitstechnik wird, von diesem Ziel ausgehend, versuchen, zu definieren, was zur Erreichung dieses Ziels nötig ist – und was nicht. Umgesetzt auf die Aufgabenstellung der hydrogeologischen Modellierung wird sich aus dem Ziel ergeben, welche Modellierungssysteme miteinander verbunden werden müssen, um eine Gesamtaussage zu erreichen. Natürlich wird auch diese Aufgabe mit der Maßgabe „so viel wie nötig, so wenig wie möglich“ gelöst werden müssen. Einfache Modellierungssysteme werden in jedem Fall den komplexen Modellierungssystemen vorgezogen. Je nach Aufgabenstellung kann allerdings auch die Verknüpfung von einfachsten Modellierungssystemen bereits sehr komplex werden oder es ist bereits im Kern der Aufgabe die Nutzung eines komplexen Modellierungssystems begründet. Dieser Ansatz der Projektbearbeitung wird im Bereich der Informatik als „Top-Down-Programmierung“ bezeichnet. Diese Arbeitsweise ist ein wenig statisch.

Ein entwicklungsorientierter Forschungsansatz mit zieloffener Arbeitsweise, wie ihn die gesamte Wissenschaftsgeschichte nach POPPER (1994) darstellt, geht falsifizierend und eliminierend von möglichst einfachen Lösungsmöglichkeiten eines Problems aus. Immer wenn eine Lösungsmöglichkeit falsifiziert wird – eventuell durch neue Problemstellungen – wird eine bessere Lösungsmöglichkeit gesucht. Übertragen auf die Modellierung und die Interaktion kommt dabei eine Vorgehensweise heraus, die vielleicht eher iterativ zu nennen ist. Es wird mit einem zunächst einfachen Modellansatz und Modellierungssystem gestartet, und je nach Notwendigkeit werden weitere Modellierungssysteme hinzugenommen. Die Parallele zu den neuen Entwicklungen von Arbeitstechniken in der Informatik ist erstaunlich: Hier wird das „eXtreme Programming“ (XP) mit Erfolg für bestimmte Aufgabenstellungen eingesetzt.

Beide Arbeitsweisen haben also in der hydrogeologischen Modellierung ihre Entsprechung und werden auch in der Interaktion von Modellierungssystemen umgesetzt. Insofern wirken sich auch die Diskussionen von HILL (2006) und GOMEZ-HERNANDES (2006) fruchtbar auf die Kopplung von Modellierungssystemen aus, da sie beide Aspekte und die letztendliche Notwendigkeit des Einsatzes interagierender Modellstrukturen für die Modellierung komplexer Aufgaben hervorheben, nur eben auf unterschiedlichen Wegen dorthin gelangen.

Die Aufgaben und Forschungsansätze sind natürlich sehr vielfältig, sodass auch die möglichen Kopplungen zwischen den Modellierungssystemen unterschiedliche Aspekte hervorheben. Bei den hier vorgestellten Kopplungen hydrogeologischer Modellierungssysteme werden geologische Modellierungssysteme, Sickerwassermodellie-

rungssysteme, Modellierungssysteme für die ungesättigte Zone und numerische Modellierungssysteme für die Grundwasserströmung betrachtet.

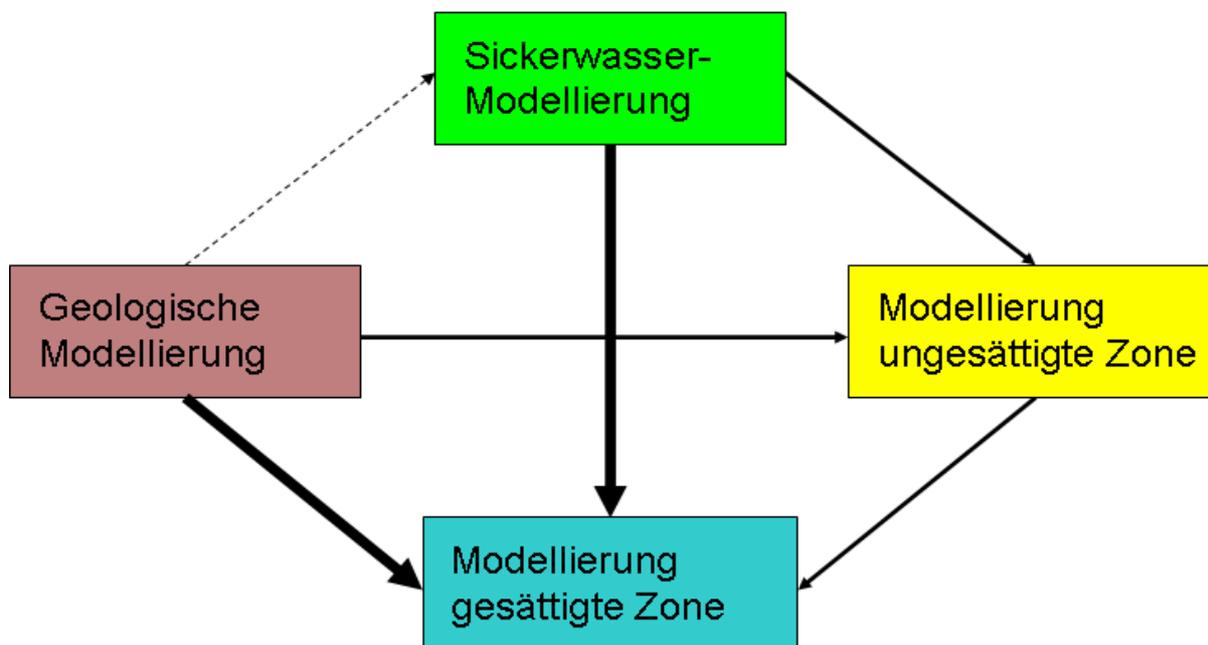


Abbildung 42: Übersicht der betrachteten Modellierungssysteme. Die Verbindungen zwischen den Modellierungssystemen können sehr unterschiedlich gestaltet sein und sind hier nur schematisch dargestellt.

Diese im engeren Sinne hydrogeologischen Systeme weisen definierbare Grenzen zu den Modellierungssystemen der Atmosphäre („Klimamodelle“), der Oberflächengewässer, der Hydrochemie sowie zur Landnutzung auf, die hier nur kurz angesprochen werden. Die Systematik der Schnittstellenbeschreibung für diese Modellierungssysteme lässt sich durch Generalisierung sowie weitgehende Analogien in gewissem Umfang auch auf diese Schnittstellen übertragen.

Die Verknüpfung mehrerer Modellierungssysteme zum Zweck einer komplexen hydrogeologischen Modellierung könnte im Idealfall wie in der Informatik in der Objektorientierten Programmierung geschehen: Jedes Modellierungssystem trägt zur Arbeitsteilung bei. Das System ist dadurch (nicht nur für diese Aufgabe) wieder verwendbar. Durch die Verknüpfung bekannter großer Modellierungswerkzeuge miteinander wird die Gesamtaufgabe übersichtlicher. Zudem sind die Modellierungswerkzeuge verifiziert und erprobt.

Die Verknüpfung von Modellierungssystemen ist jedoch meist nicht einfach durchzuführen, da die Modellierungssysteme nur bestimmte Informationen – Parameter oder Randbedingungen – voneinander übernehmen. Zum Teil sind aufwändige Überarbeitungen des einen Modells für die Weiterarbeit mit einem anderen Modellierungssystem notwendig. Wegen der Komplexität der Aufgabe ist es sinnvoll, die Systematik dieser Schnittstellen einerseits theoretisch und andererseits auch anhand praktischer Beispiele darzustellen.

Wie in Kap. 2 bereits dargelegt, sind statische von dynamischen Modellierungskonzepten grundsätzlich zu unterscheiden. Die dynamischen Modellierungssysteme für die Sickerwassermodellierung, die Modellierung der ungesättigten Zone und der Grundwasserströmung sind auf konzeptionelle Modellvorstellungen zum hydrogeologischen Aufbau, die am besten auf detaillierten geologischen Modellen basieren, an-

gewiesen. Eine einfache Übernahme ist jedoch praktisch nur in den seltensten Fällen möglich.

Eine Systematik der verschiedenen Kopplungen von Modellen wird zunächst inhaltlich vorgenommen:

- HOLZBECHER ET AL. (2005) bezeichnen eine Modellkopplung als „inter-compartmental“, wenn verschiedene Kompartimente modelliert werden.
- Die Kopplung wird als „intra-compartmental“ bezeichnet, wenn dasselbe (hydrogeologische) Kompartiment betrachtet wird.
- Die Verknüpfung räumlich und/oder zeitlich unterschiedlicher, vom Modellierungssystem gleichartiger Modelle wird als horizontale Modellkopplung bezeichnet
- Die Verknüpfung von Modellen unterschiedlicher Modellierungssysteme heißt vertikale Kopplung.

Es gibt die Möglichkeit einer intra-compartmental-Kopplung, die vertikal strukturiert ist, wie das Beispiel der Kopplung von Grundwasserströmungs- und transportmodellierung in der gesättigten Zone deutlich macht.

Eine weitere Gliederung von MÖLDERS (2005) ist stärker auf den Datenaustausch bezogen:

- Als „Parameterisierung“ wird die direkte Belegung von Parametern und Randbedingungen eines Modells auf der Grundlage des konzeptionellen Modells bezeichnet. Da das konzeptionelle Modell nicht mathematisch gefasst ist, ist diese Verbindung eigentlich keine Kopplung.
- Die Ein-Weg-Kopplung („one-way coupling“) stellt eine einseitige Verbindung von einem Modellierungssystem zum anderen dar. Man kann diese Kopplung auch als sequentielle Kopplung bezeichnen.
- Als Zwei-Wege-Kopplung („two-way coupling“) wird ein rückgekoppeltes System verstanden. Dieser Kopplungstyp muss auf der Grundlage der weiteren Ausführungen des Artikels eigentlich in zwei Kategorien getrennt werden, denn die Rückkopplung kann entweder nicht-iterativ (seriell) oder iterativ (parallel) geschehen. Bei der nicht-iterativen Rückkopplung werden die Ergebnisse des einen Modellierungssystems so an das andere übergeben, dass sie die Datengrundlage des nächsten Zeitschritts darstellen. Die iterative Rückkopplung iteriert für denselben Zeitschritt bis zu einem vorgegebenen Minimum der Differenz der Iterationsschritte.
- Eine weitere, nicht von MÖLDERS (2005) dargestellte Möglichkeit des Datenaustauschs stellt die periodisch-synchrone Kopplung dar, bei der ein Modellierungssysteme nur zu definierten Zeitschritten Daten von dem anderen Modell bekommt und damit dann rechnen muss. Es stellt damit eine Sonderform der nicht-iterativen Rückkopplung dar.
- Sind die Modellierungssysteme in Modellierungswerkzeugen so miteinander verknüpft, dass man sie nicht mehr voneinander getrennt nutzen kann, so wird diese Verbindung als integriert bezeichnet.

Das Verhältnis der gekoppelten Modellierungssysteme zueinander kann durch die Ausdrücke schwach oder stark näher charakterisiert werden. Bei schwachen Kopplungen handelt es sich einerseits um Ein-Weg-Kopplungen und andererseits um nicht-iterative Rückkopplungen. Charakteristisch ist ebenfalls die geringe Zahl der

übergebenen Größen (Parameter oder Randbedingungen). Schwache Kopplungen können aber auch dadurch charakterisiert werden, dass das Verhältnis der Austauschparameter zu den insgesamt einzusetzenden Parametern sehr gering ist.

FÜRST (2004) gliedert die Modellverknüpfungen, die mit GIS realisiert werden können, in lose Kopplungen und enge Kopplungen, wobei letztere durch eine als integrierendes Element der Modellierungssysteme wirkende Benutzeroberfläche charakterisiert sind. Eine lose Kopplung besitzt diese Benutzeroberfläche nicht, wodurch oftmals auch der Datenaustausch der gleichberechtigten Modellierungssysteme nur über sehr simple Datenformate stattfindet. Diese stark nutzerorientierte Systematik wird hier nicht weiter verfolgt.

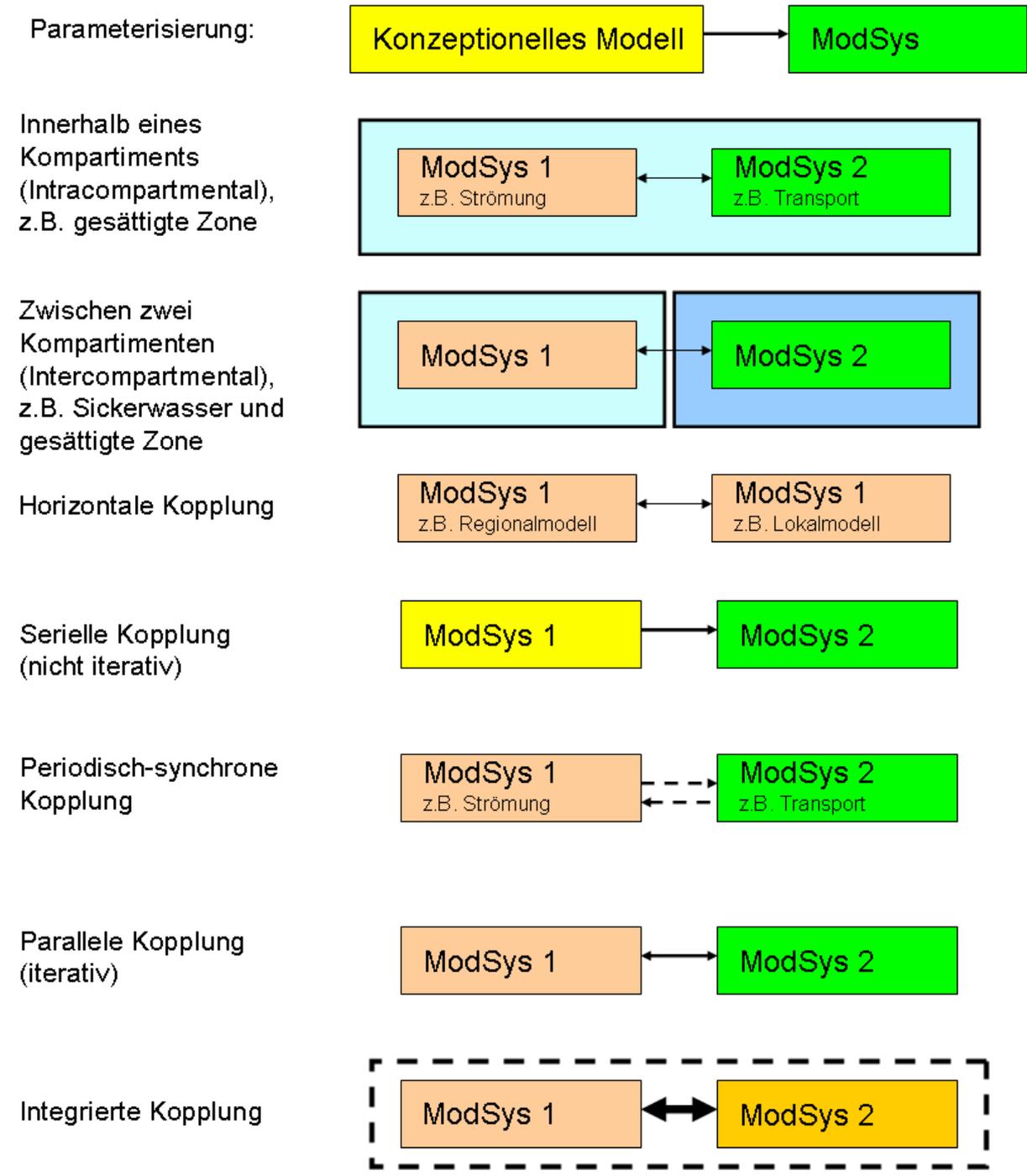


Abbildung 43: Kopplungsmöglichkeiten von Modellierungssystemen (ModSys).

Die inhaltlichen und Austausch-bezogenen Kopplungstypen können je nach Aufgabenstellung und vorhandenen Ressourcen miteinander kombiniert werden. Grundlegende Fragen hierfür sind jedoch die der Nutzung von Kopplungen und der Konsequenzen für den Einsatz bestimmter Modellierungssysteme.

Die einzelnen Kopplungen und Fragen zur Stabilität und Dimensionierung gekoppelter Modelle wird in diesem Kapitel entsprechend Abbildung 44 bearbeitet.

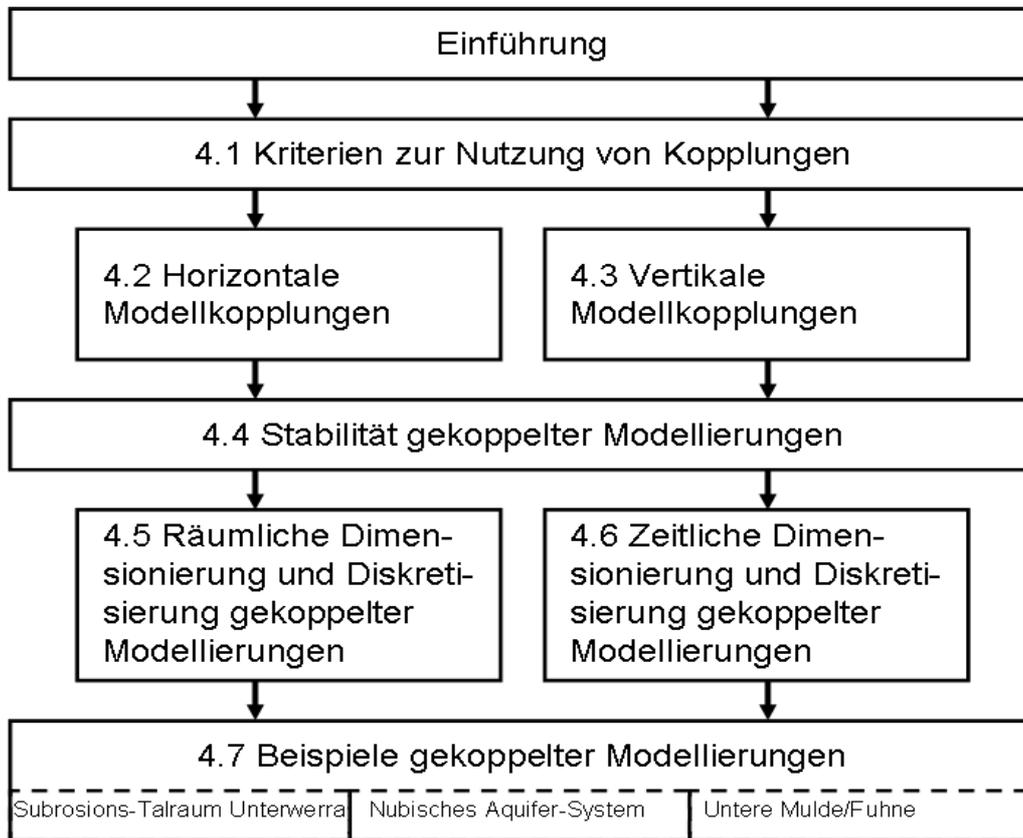
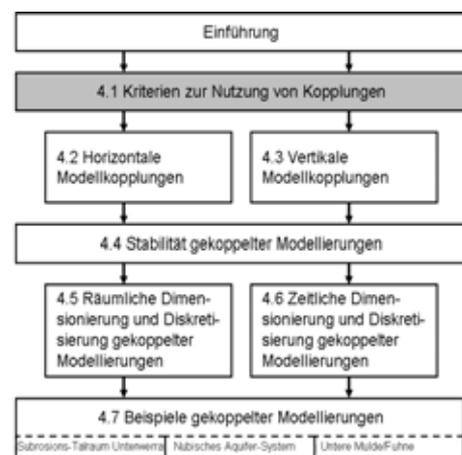


Abbildung 44: Grafische Übersicht von Kapitel 4. Zur besseren Orientierung ist diese Grafik als Miniatur in den folgenden Unterkapiteln vorangestellt.

4.1 Kriterien zur Nutzung von Kopplungen bei der hydrogeologischen Modellierung

Die Frage nach der Nutzung von Verknüpfungen von Modellierungssystemen in der Hydrogeologie stellt sich je nach Arbeitsweise an unterschiedlichen Stellen. Eine zielorientierte Arbeitsweise ist bemüht, diese Frage anhand vorab zu klärender Kriterien sehr früh zu beantworten. Eine entwicklungsorientierte Arbeitsweise wird im Laufe des Entwicklungsprozesses mehrfach vor die Aufgabe gestellt, sich für eine Kopplung (und wenn, welche?) zu entscheiden.

Ganz abgesehen vom „Zeitpunkt“ der Fragestellung gibt es Kriterien für die Entscheidung, ob die Ver-



knüpfung von Modellierungssystemen notwendig ist. Die oben dargestellte Systematik erleichtert zudem die Entscheidung, in welcher Weise diese Kopplung durchgeführt werden muss. Es lassen sich daher auch Kriterien für die Auswahl geeigneter Modellierungswerkzeuge aus der Notwendigkeit der Kopplung ableiten. Bei allen einzusetzenden Modellierungswerkzeugen muss jedoch gewährleistet sein, dass sie die Prozesse im Sinne der in Kapitel 1.2 dargestellten Kriterien erfüllen.

Die Kriterien für den Einsatz einer Kopplung sind zunächst sehr allgemein zu halten: Eine Kopplung ist auf jeden Fall dann notwendig, wenn die Zielgröße der Modellierung mit dem eingesetzten Modell nicht ausreichend genau wiedergegeben werden kann. Der Terminus „ausreichend genau“ bedarf vielfacher Interpretationen, denn er wird sich im Normalfall auf die Realitätsnähe des Modells beziehen, was im Kapitel 4 vertieft wird. Es kann sich aber auch beispielsweise um die Erfüllung eines konzeptionellen Modells oder die Modellierbarkeit eines Szenarios handeln.

Das Nicht-Erreichen der Zielgröße kann darin begründet sein, dass bestimmte Parameter, Randbedingungen oder Anfangsbedingungen nicht ausreichend differenziert implementiert sind. Es können aber auch Modell-immanente Gründe, wie beispielsweise eine zu geringe Auflösung, zu diesem Ergebnis führen. Ein weiterer Grund können - gerade im Bereich prognostischer Modellierungen - fehlende Informationen sein, die durch den Einsatz zusätzlicher Modellierungssysteme ergänzt werden können.

Damit ergeben sich aber neben den Zielgrößen weitere Größen, die als Kriterien für den Einsatz von Kopplungen beachtet werden müssen: Prozessgrößen, die lediglich als Hilfsgrößen für die Zielgrößen dienen.

Klassische Zielgrößen der hydrogeologischen Modellierung sind Wasserstände und Wasserbilanzen. Diese Zielgrößen können in ihrer räumlichen Verteilung und in ihrer zeitlichen Dynamik wesentlich für das Modellergebnis sein, und entsprechend sind die Modellkopplungen auszulegen.

Wenn nur die räumliche Verteilung oder nur die zeitliche Dynamik durch den Einsatz eines zusätzlichen Modellierungssystems verbessert werden soll, ist meist eine sequentielle Kopplung ausreichend. Dies gilt auch für den Fall, dass nur eines der beiden zu koppelnden Modellierungssysteme diese Charakteristik aufweist. Sind hingegen räumliche und zeitliche Dimensionen zu berücksichtigen, muss eine Rückkopplung – ob iterativ, periodisch-synchron oder integriert – zugrunde gelegt werden.

Da horizontale Kopplungen dynamischer, instationärer Modelle immer räumlich und zeitlich dimensioniert sind, sollten sie möglichst (iterativ oder integriert) rückgekoppelt gerechnet werden, während dies für stationäre oder statische Modelle nicht gilt und daher auch sequentielle Kopplungen eingesetzt werden können.

Für alle Modellkopplungen gilt, dass die Skalen bei der Kopplung angepasst werden müssen. Bei rein räumlichen oder rein zeitlichen – und daher i.d.R. sequentiellen Kopplungen – stellt dies meist kein großes Problem dar. Für die in iterativen Kopplungen verbundenen Modellierungssysteme wird dies auf eine Disaggregation der Modellrechnungen mit der Maßgabe der höchsten Auflösung hinauslaufen. Meist liegt die Auflösung des Ergebnisses wegen der notwendigen Iterationsschritte noch höher als die jedes einzelnen beteiligten Modells.

Iterative Berechnungen benötigen i.d.R. sehr viel Rechenzeit. Leider ist eine Parallelisierung der Berechnungen meist nicht möglich, was bei einer periodisch-synchronen Arbeitsweise erhebliche Vorteile schafft.

Bei der Frage nach den Werkzeugen zur Kopplung von Modellierungssystemen werden immer wieder GIS favorisiert. Ihre Nutzung liegt nahe, da sie den (2D) räumlichen Bezug zwischen Daten herstellen können und zudem über mittlerweile auch für sehr spezielle Modellierungssysteme akzeptierte Datenaustauschformate verfügen. Sehr kritisch zu sehen ist allerdings die fehlende dritte räumliche sowie die zeitliche Dimension. Während die fehlende räumliche Dimension noch durch geschickte Techniken zumindest ansatzweise herzustellen ist, können dynamische Kopplungen in der Praxis nicht über GIS hergestellt werden. Das bedeutet auf der anderen Seite wegen fehlender Standardwerkzeuge auch einen erheblichen technischen Aufwand (neben den im Folgenden zu behandelnden inhaltlichen Fragen) bei der Kopplung hydrogeologischer Modellierungssysteme. Erleichternd wirken nur die Modularisierung einiger Modellierungswerkzeuge oder die Bereitstellung definierter Schnittstellen.

4.2 Horizontale Modellkopplungen

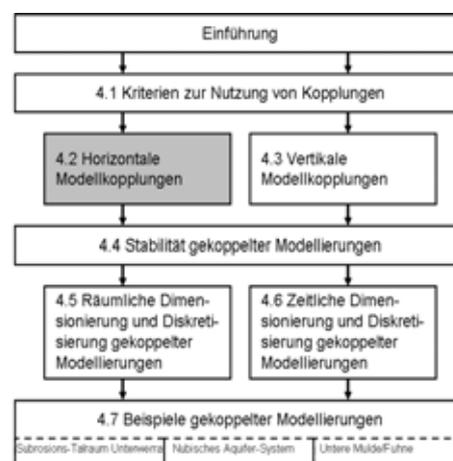
Horizontale Modellkopplungen sind dazu geeignet, zeitliche oder räumliche Ausschnitte detailliert zu modellieren. Hier werden i.d.R. gleiche Modellierungswerkzeuge miteinander verknüpft, wobei das Wesentliche die Möglichkeit der Berücksichtigung zusätzlicher Eingangsdaten ist. Auch eine erhöhte Diskretisierung erbringt schon verbesserte Ergebnisse.

Bei statischen Modellierungen kann durch horizontale Modellkopplungen eine höhere Dichte von Eingangsdaten berücksichtigt werden. Bei dynamischen Modellierungen kann eine höhere Auflösung von Parametern oder Randbedingungen und die höhere Diskretisierung eine inhaltliche Verbesserung des Modells herbeiführen.

Im Folgenden werden die horizontalen Kopplungen hydrogeologischer Modellierungssysteme im Einzelnen betrachtet.

Kopplungen geologischer Modellierungssysteme

Zu unterscheiden sind hier die Verbindungen verschiedener Modelle, die mit gleichen (statistischen oder konstruktiven) Modellierungsmethoden bearbeitet wurden und lediglich unterschiedliche Gebiete oder räumliche oder zeitliche Auflösungen beinhalten und Verbindungen zwischen Modellen, die mit unterschiedlichen Modellierungsmethoden erarbeitet wurden. In beiden Fällen werden sich häufig leichte Differenzen zwischen den Modellen in den jeweiligen Rand- oder Überlappungsbereichen ergeben, die im Falle gleicher Modellierungssysteme durch geeignete Algorithmen, die z.B. in THOMSEN (2005) beschrieben sind, bereinigt werden können. Werden unterschiedliche Modellierungsmethoden (z.B. statistische und konstruktive Methoden) genutzt, kann ein eher pragmatischer Weg gewählt werden, der lediglich für übereinstimmende Ergebnisse an den Rändern sorgt, wie es z.B. in HUBERT (2005) beschrieben ist, oder es können klare Brüche erzeugt werden, die die unterschiedlichen Konzepte deutlich machen. Im letzteren Fall muss allerdings für ein gemeinsames Datenkonzept im Ergebnis gesorgt werden, wie es z.B. in THOMSEN (2005) beschrieben ist. Bei überlappenden Dreiecksnetzen ist dies im Idealfall einer aufeinander abgestimmten Modellierung durch die Kombination der beiden Netze mit einer dann in diesen Bereichen erhöhten Auflösung zu erreichen. Dies ist jedoch nur dann der Fall,



wenn beide Modelle in Abhängigkeit voneinander bereits modelliert wurden. Im Normalfall liegen die Grenzflächen der modellierten Körper jedoch nicht aufeinander. Es würden je nach Struktur der Dreiecksnetze sehr raue Oberflächen resultieren, die sich aus der Übernahme der Netzstruktur ableiten und oftmals mangels harter Daten in den Randbereichen der Modellgebiete keine gesicherte Datenbasis haben. Die pragmatische Lösung würde in diesem Fall so aussehen, dass die Schnittmenge der Datenkollektive beider Modellnetze vollständig ausgeschnitten wird. Aus den beiden zu verknüpfenden Modellen werden dann repräsentative, an diesen Überlappungsbereich anschließende Teile herausgenommen und für eine (geo)statistische Interpolation als Datengrundlage verwendet. Die Punktmengen beider Modelle sowie des Überlappungsbereichs müssen dann wiederum zusammengefügt werden. Es muss jedoch zusätzlich die topologische Integrität der Körper gewährleistet werden, d.h. es darf keine Verschneidungen mit weiteren Grenzflächen der Modelle in diesem Schnittmengen-Bereich geben. Bei Modellen, die in Form regelmäßiger Raster vorliegen, besteht grundsätzlich auch die Möglichkeit einer Mittelwertbildung in den Schnittmengen-Bereichen. Dies führt jedoch wahrscheinlich zu weiteren Versätzen im Übergangsbereich. Bei Nutzung konstruktiver Modellierungsmethoden ist der sauberste Weg die Elimination und Neukonstruktion des Schnittmengen-Bereichs.

Prozessbasierte, evtl. sogar dynamische geologische Modellierungen können hier leider nicht betrachtet werden, da hierzu keine Untersuchungen vorliegen. Gerade bei ihnen wäre jedoch der Einsatz horizontaler Modellkopplungen sehr interessant, da sie sehr lange Modellzeiträume und große Modellgebiete umfassen würden.

Modellierung von Sickerwasser und ungesättigter Zone

Bei den Modellierungssystemen für Sickerwasser und ungesättigte Zone, die mit Bodengewässern arbeiten (PFÜTZNER (1994), WESSOLEK (1989), HÖRMANN (2005)), besteht die Möglichkeit, durch zusätzliche Hydrotope oder eine höhere zeitliche Auflösung der Eingangsdaten die notwendige Modellverbesserung zu erreichen, ohne dass horizontale Kopplungen notwendig sind. Bei Modellierungssystemen mit empirischen oder statistischen Methoden ist die Möglichkeit nicht gegeben. Für die Modellierungssysteme der ungesättigten Zone, die räumlich dreidimensional mit der Richards-Gleichung arbeiten, wäre die Möglichkeit einer Kopplung wünschenswert. Aber es gibt bisher keine Ansätze für eine Umsetzung.

Numerische Grundwassermodellierungssysteme

In MEHL ET AL. (2006) werden verschiedene Methoden der Modellkopplung für ein Modellierungswerkzeug der gesättigten Zone verglichen, die die räumlichen Auflösungsmöglichkeiten auf effektive Weise erhöhen. Die Konzepte hierfür sind meist nicht sehr komplex. Ebenso wie verschiedene insbesondere statistische Methoden für räumliche wie für zeitliche Fragestellungen genutzt werden können, so können auch diese Ergebnisse auf die zeitliche Dimension übertragen werden.

Der in MEHL ET AL. (2006) vorgestellte Vergleich lokal verdichteter Diskretisierung bezieht sich auf die Art der Kopplung als sequentiell gekoppelte Modelle und iterativ rückgekoppelte Modelle. Grundsätzlich werden zwei Modelle unterschiedlicher Diskretisierung mit dem gleichen Modellierungssystem erstellt. Bei der sequentiellen Modellkopplung werden die Ergebnisse des gröber diskretisierten Modells an das feiner diskretisierte Modell übergeben. Bei der iterativen Rückkopplung übergeben die Modelle sich gegenseitig die Modellierungsergebnisse als Anfangs- und Randbedingung und rechnen iterierend die Modelle bis zu konstanten Werten der Rückkopplungsgrößen. Beide gekoppelten Modelle werden vordefiniert und während der Laufzeit nicht verändert. Ein solches Konzept kann beispielsweise bei der räumlichen

Diskretisierung neben den aufgezeigten Aufgabenstellungen auch eine Lösung für das Problem auseinanderfallender Schichten und lokaler Linsen darstellen.

Der Beschreibung der Rückkopplungsgrößen kommt bei der horizontalen Modellierung eine wesentliche Rolle zu. Da es sich um zwei gleiche Modellierungssysteme nur mit einer anderen Auflösung handelt, können für die Kopplung alle Arten der Randbedingungen genutzt werden. Bei den genannten Modellen sind es zum einen Zielgrößen (Wasserstände und Konzentrationen), zum anderen Berechnungsgrößen (Wasser- oder Stoffflüsse).

Bei manchen Modellierungswerkzeugen ist eine horizontale Kopplung integriert gestaltet, indem beispielsweise eine automatische, auf die Nutzerbedürfnisse angepasste Zeitschrittweitensteuerung und/oder die Möglichkeit einer nutzerorientiert hohen räumlichen Verdichtung der Diskretisierung vorgesehen wird (DIERSCH (1994), DIERSCH (2005)).

Hydrologische Modellierungen

Im Bereich der Klimaforschung werden Fragen zur Auswirkung sehr plötzlicher Ereignisse durch horizontale Modellkopplungen gelöst. Ausschnittsweise werden hier Modelle mit einer sehr hohen zeitlichen Auflösung in Langzeitmodelle mit geringer zeitlicher Auflösung eingeschoben, wie VALDES (2005) beschreibt. Wesentliche Zeitmarken für diese Modellierungen sind mittelfristige Entwicklungen wie die Kleine Eiszeit im 19. Jahrhundert, die warme Periode des Mittelalters oder kurzfristige Ereignisse wie der plötzliche Süßwasser-Eintrag in den Nordatlantik vor 8200 Jahren.

Einen weiteren Einsatzbereich von horizontalen Modellkopplungen, der aber auch einen Überschneidungsbereich mit vertikalen, aber intra-kompartimentalen Modellkopplungen bildet, beschreibt LEAVESLEY (2005) für die Aufgabe des Downscaling der Ergebnisse eines Globalen Klimamodells (GCM) zu zeitlich und räumlich höher auflösenden Ergebnissen. Hierfür werden einerseits statistische Methoden (Statistical Downscaling, SDS) und andererseits Methoden der dynamischen Modellierung über ein Regionales Klimamodell (RCM) eingesetzt, um eine Verbesserung der monatlichen Niederschlags- und Temperaturwerte für eine Station zu erreichen. Beide Downscaling-Methoden schneiden etwa gleich gut ab, und es konnte für Temperatur- und Niederschlagswerte eine deutliche Verbesserung erreicht werden. Das statistische Verfahren benötigte jedoch wesentlich weniger Eingangsdaten und wurde daher bevorzugt. Auch die Aggregation von hydrologischen Daten für die Parameterisierung eines GCM ist nicht unproblematisch, wie MÖLDERS (2005) beschreibt. Hierbei werden je nach Parameter entweder die Werte der dominierenden Klassen, der Mosaiken-Ansatz oder arithmetische, harmonische oder geometrische Mittelwerte eingesetzt.

4.3 Vertikale Modellkopplungen

Vertikale Modellkopplungen werden für die inhaltliche Erweiterung der Modelle entwickelt und eingesetzt. Dabei werden meist zusätzliche Kompartimente des Wasserkreislaufs oder des Transports von Stoffen in die Modellierung einbezogen. Die in der Hydrogeologie zu betrachtenden Modellierungssysteme, deren Kopplung sinnvoll ist, sind in Abbildung 45 dargestellt. Im engeren Sinne werden im Folgenden die Schnittstellen und Kopplungsstrategien der hervorgehobenen Modellierungssysteme näher betrachtet.

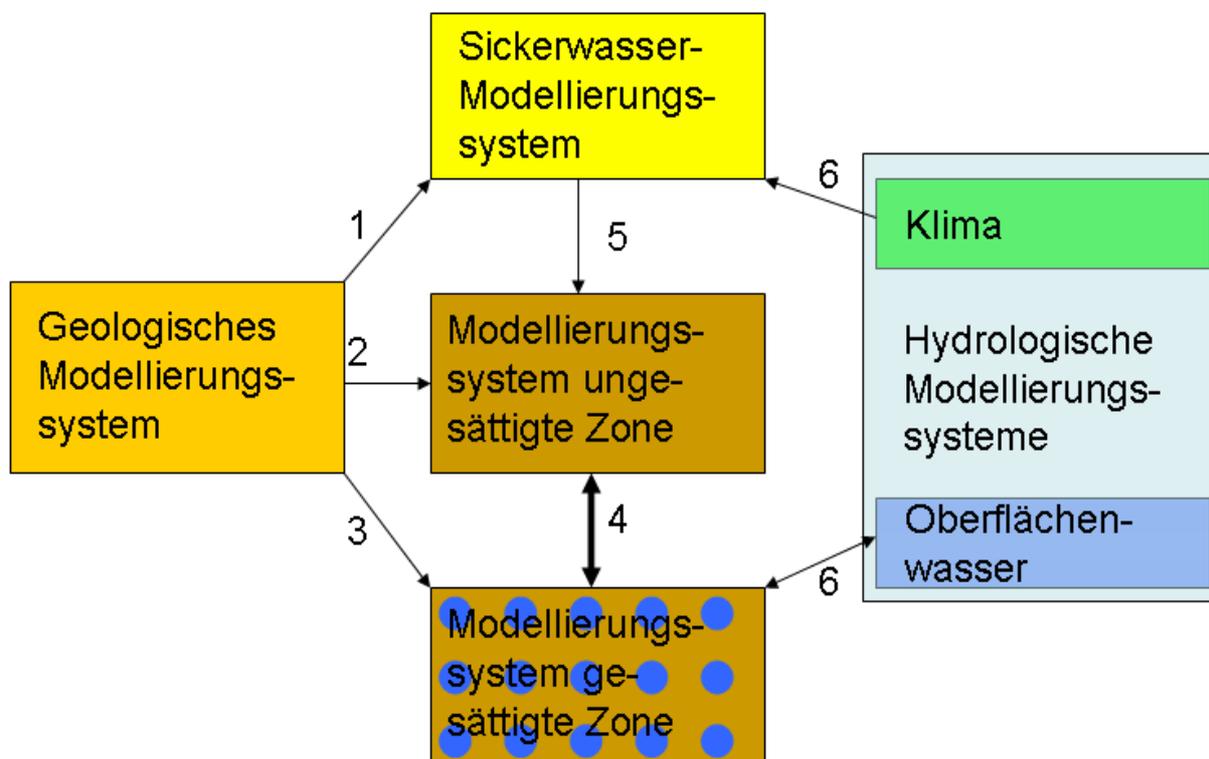
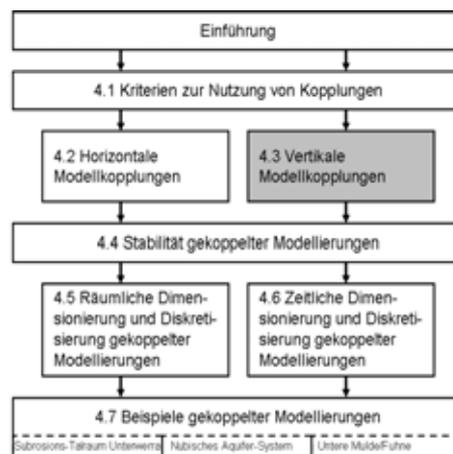


Abbildung 45: Betrachtete Modellierungssysteme der vertikalen Kopplung in hydrogeologischen Systemen. Die Pfeile markieren die Richtung der Kopplung, die Zahlen beziehen sich auf die Erläuterungen im Text mit der jeweiligen Abschnittsnummerierung.

Anhand der Vielzahl der Verbindungen wird zwar die Stellung eines Modellierungssystems abschätzbar, ein genaueres Bild ergibt sich jedoch erst bei der Betrachtung der Schnittstellen. Drei Modellierungssysteme stehen im Zentrum der hier betrachteten Modellkopplungen: Das geologische Modellierungssystem, das Modellierungssystem für die ungesättigte Zone und das für die gesättigte Zone. Anzahl und Art der vertikalen Kopplungen sind jedoch ungleich verteilt.

Anders als bei der Betrachtung der Modellierungssysteme und der horizontalen Kopplungen dienen hier die in Abbildung 45 mit Nummern versehenen Schnittstellen als Gliederung.

1: Schnittstelle Geologische Modellierungssysteme – Sickerwassermodellierung

Vom geologischen Modell können an das Sickerwassermodellierungssystem die von diesem benötigten Substrateigenschaften des Bodens (Bodenart) übergeben werden. Die Beschreibung des Bodens nach den bodensystematischen Einheiten (Bodenklassen, Bodentypen und –subtypen) hilft meist nur wenig weiter, da die Parameter der Feldkapazität und des Welkepunktes, die sowohl von empirischen wie Bodenspeichermodellen benötigt werden, nur aus der Bodenart bzw. dem Substrat abgeleitet werden können. Zudem stellen viele Bodenkarten aufgrund ihrer landwirtschaftlichen Zuordnung (Bodenschätzung) die Böden in Waldgebieten nicht dar. Die forstwirtschaftlichen Karten geben oft auch nur Bodentypen und keine Bodenarten an. Geologische Karten, die auch eine Grundlage der geologischen Modellierung sind, helfen dann bezüglich des Substrats erheblich weiter. Ein hoch auflösendes geologisches Modell wird diese Daten in geeigneter Weise bereitstellen können. Aufgrund der stratigrafischen Orientierung geologischer Modellierungssysteme ist eine zusätzliche Interpretation der Parameter notwendig, die oft nicht eindeutig getroffen werden kann. Eine Parameterverteilung auf der Grundlage eines lithologischen Modells (anstelle eines stratigrafischen Modells) führt wesentlich direkter zum Ziel der Modellkopplung.

Eine Rückkopplung findet nicht statt, da das geologische Modellierungssystem weder Bodeninformationen noch den Wasserfluss in der Bodenzone verarbeitet. Die Kopplung ist also als sequentielle Kopplung einzustufen, im Falle eines nur konzeptionellen geologischen Modells sogar nur als Parameterisierung.

Transportmodelle der Bodenzone benötigen zusätzliche Parameter, die aus dem geologischen Modell nicht bereitgestellt werden können.

2: Schnittstelle Geologische Modellierungssysteme – Modellierungssysteme ungesättigte Zone

Modellierungssysteme der ungesättigten Zone können sehr unterschiedliche Parameter aus einem geologischen Modell übernehmen. Aber auch hier gilt wie für die Schnittstelle 1, dass es sich um eine sequentielle Kopplung handelt. Eine reine Parameterisierung reicht für differenzierte Modellierungen nicht aus. Die Struktur bzw. der vertikale Aufbau der ungesättigten Zone ist die wichtigste Grundlage. Darüber hinaus werden für Bodenwasserspeichermodellierungen Angaben zur Porosität bzw. zur Feldkapazität der einzelnen Schichten benötigt. Bei Modellierungssystemen, die auf der Richards-Gleichung aufbauen, ist mindestens die Angabe der Porosität und der gesättigten hydraulischen Durchlässigkeit notwendig. Zusätzlich spielen die Anfangsbedingungen einer Modellierung für die ungesättigte Zone eine wesentliche Rolle. Diese können nicht aus dem geologischen Modell entnommen werden, sondern müssen auf eine sinnvolle Größe gesetzt werden. Aus dieser Parameterliste wird deutlich, dass auch hier die direkte Übernahme von Daten des geologischen, meist stratigrafisch orientierten Modells ohne lithologische Interpretation und anschließende Bewertung der Lithologie in Hinblick auf die genannten Parameter nicht möglich ist. Die Problematik wird bei der Schnittstelle zwischen geologischen Modellierungssystemen und Modellierungssystemen der gesättigten Zone noch einmal aufgegriffen.

Bei dreidimensionalen Modellen der ungesättigten Zone kommt oft noch das aus der numerischen Gleichungslösung resultierende Problem nicht horizontbeständiger Schichten hinzu, das für die Schnittstellenbeschreibung zwischen geologischen Mo-

dellierungssystemen und Modellierungssystemen der gesättigten Zone noch einmal im Detail aufgegriffen wird.

Transportmodellierungssysteme für die ungesättigte Zone benötigen darüber hinaus aus dem geologischen Modellierungssystem noch eine Parameterisierung zu den Adsorptionsparametern und Abbauparametern, die von geologischen Modellierungssystemen nur sehr entfernt bereit gestellt werden können. Hierfür sind Ton- und Kohlegehalte naheliegende Größen, die aber nur mit großem Interpretationsaufwand aus geologischen Modellen gewonnen werden können. Eine Reihe weiterer Parameter der Transportmodellierung können gar nicht aus dem geologischen Modell abgeleitet werden. Die Kopplung für die Transportmodellierung ist also eher als schwache Kopplung zu bezeichnen.

3: Schnittstelle Geologische Modellierungssysteme – Modellierungssysteme gesättigte Zone

Auch die Übergabeparameter dieser Schnittstelle sind nicht direkt aus dem geologischen Modell abzuleiten. Bei dreidimensionalen numerischen Grundwassermodellierungen sind zunächst Strukturen und die Parameter hydraulische Durchlässigkeit und Porosität aus dem geologischen Modell zu entnehmen. Da dies nicht nur sehr wesentliche Größen des numerischen Grundwassermodells, sondern auch die Mehrzahl der Eingangsparameter ausmacht, kann man hier von einer starken Kopplung sprechen. Da es i.d.R. keine Rückkopplungen gibt, handelt es sich allerdings auch hier um eine sequentielle Kopplung. Ausnahmen könnten vielleicht durch Grundwasserabsenkung betroffene Setzungsgebiete sein, in denen die Geologie in meist geringem Ausmaß betroffen ist.

Eine ganz wesentliche Schwierigkeit stellt die Aufteilung in gesättigte und ungesättigte Zone dar, die für geologische Modellierungssysteme irrelevant ist. Da Modellierungssysteme der gesättigten Zone definitionsgemäß ihre Obergrenze an der Grundwasseroberfläche haben, müssen geologische Modelle auf diesen Bereich zugeschnitten werden. Ein zweites Problem für die Erstellung eines Strukturmodells für die numerische Grundwassermodellierung ergibt sich aus der Numerik: Alle zu berechnenden Schichten müssen im gesamten Modellgebiet erhalten sein, d.h. es gibt weder für auskeilende Schichten noch für linsenförmige geologische Körper direkte Übernahmemöglichkeiten. Auch größere Störungszonen bereiten Schwierigkeiten. Zudem müssen aus numerischen Gründen gewisse Mindestmächtigkeiten der Einheiten eingehalten werden. Besonders im Bereich anthropogener Eingriffe in die geologischen Strukturen (wie z.B. bei Tagebauen) sind oft sehr steile Gradienten der Strukturen zu verzeichnen. Diese sind für die meisten numerischen Grundwassermodelle eine wesentliche Quelle für Instabilitäten. Die in Kapitel 3.4.2 angesprochene Mittelwertbildung ist ebenfalls bei der Erstellung eines Strukturmodells zu berücksichtigen. Bei der notwendigen Überarbeitung können GIS eine wesentliche Hilfestellung leisten.

Wenn das geologische Modellierungssystem stratigrafisch aufgebaut ist, muss eine sehr komplexe Neubearbeitung erfolgen, um zunächst ein lithologisches Modell zu generieren. Für alle vertikalen Kopplungen spielen die stratigrafischen Zuordnungen, die für den konsistenten Aufbau des geologischen Modells notwendig sind, keine Rolle. Sie können per se nicht in hydraulische Durchlässigkeiten und Porositäten übersetzt werden. Die aus den lithologischen Informationen abzuleitenden Parameter müssen durch geeignete Interpolationsverfahren räumlich verteilt bereitgestellt werden. Hierfür haben sich Indexverfahren vor dem Hintergrund später durchzuführender Kalibrierungen als geeignet erwiesen. ANDERMAN & HILL (2000) stellen ein Werk-

zeug zur Verfügung, das bei der Umsetzung geologischer Modellschichten in die „Layer“ numerischer Grundwassermodelle hilft. Allerdings berücksichtigt es nicht die Probleme der geologischen Schichten in der ungesättigten Zone.

Transportmodelle der gesättigten Zone benötigen neben den oben genannten Strömungsparametern auch Angaben über Sorptionskoeffizienten, die ebenso, wie für die ungesättigte Zone ausgeführt, nur schwer aus dem geologischen Modell anhand beispielsweise von Ton- und Kohlegehalten abgeleitet werden können. Für die ebenfalls zu parameterisierenden Dispersivitäten spielt neben dem geologischen Modell auch die Geometrie des Modells für die gesättigte Zone eine Rolle (KINZELBACH (1987)). Für die meist integrierte Kopplung zwischen Strömungs- und Transportmodellierungssystem der gesättigten Zone beschreiben HAEFNER & BOY (2003) eine Kopplungstechnik, die die Anpassung der räumlichen Auflösung anhand der Konzentration von Stoffen in einem Transportmodell zeitlich variabel vornimmt.

4: Schnittstelle der Modellierungssysteme für die ungesättigte und die gesättigte Zone

Diese Schnittstelle kann je nach Aufgabenstellung als eine Parameterisierung, sequentielle, periodisch-synchrone, iterative oder integrierte Kopplung implementiert sein. Für viele Modellierungsaufgaben reicht bereits die Annahme einer direkten Übernahme der Sickerwassermenge als Parameter oder Randbedingung für das numerische Grundwassermodell aus, sodass die Schnittstelle zur ungesättigten Zone nicht weiter betrachtet werden müsste. In Gebieten mit großen Grundwasserflurabständen und/oder geringdurchlässigen Schichten in der ungesättigten Zone sollten diese jedoch durch Modellierungen erfasst werden, insbesondere wenn entsprechende dynamische Auswertungen erfolgen.

Die rückkoppelnde Größe von der gesättigten Zone zur ungesättigten Zone ist der Grundwasserstand. Wenn der Schwankungsbereich der Grundwasseroberfläche gering ist (z.B. durch gering leitende Deckschichten), kann auf die Rückkopplung verzichtet werden, was eine sequentielle Berechnung ermöglicht. Die integrierte Kopplung sollte nur in seltenen Fällen eingesetzt werden, da sie recht instabil und dadurch rechenaufwändig ist. Grund dafür sind insbesondere die im Laufe der meisten längeren Modellierungszeiträume auftretenden Perioden mit geringer Wassersättigung (s. Kapitel 3.3.2). Zudem wird eine sehr hohe horizontale wie vertikale Diskretisierung der ungesättigten Zone notwendig.

Die wenigen Übergabeparameter (oder Randbedingungen) bei den nicht integrierten Lösungen zeigen, dass es sich um eine schwache Kopplung handelt. In der praktischen Arbeit bieten sich dementsprechend auch periodisch-synchrone Lösungen an. Bei der integrierten Lösung können, je nach Ausführung im Modellierungswerkzeug, mehrere Parameter von beiden Modellierungssystemen gleichzeitig genutzt werden, sodass diese Kopplung stark ist. Sequentielle und integrierte Lösungen sind in mehreren Modellierungssystemen implementiert (NISWONGER ET AL. (2006), DIERSCH (2005)).

5: Schnittstelle der Modellierungssysteme für Sickerwasser und ungesättigte Zone

Der Übergang zwischen Sickerwassermodellierungssystem und Modellierungssystem für die ungesättigte Zone wird selten genutzt, da meist entweder die ungesättigte Zone aufgrund der geringen Mächtigkeit vollständig vernachlässigt oder ein Bodenspeichermmodell genutzt wird, das die ungesättigte Zone integriert mit bearbeitet. Eine dritte Möglichkeit ist die Einbeziehung des Bodenwasserhaushalts in das

auf der Basis der Richards-Gleichung arbeitende Modellierungssystem für die ungesättigte Zone, was allerdings aufgrund der komplexen Parameterisierung praktisch nie gemacht wird. Eine Rückkopplung ist für diese Schnittstelle nicht vorzusehen, es sei denn bei einer integrierten Lösung wird die Lage der Grundwasseroberfläche mit berücksichtigt.

Übergabeparameter bzw. Randbedingung sind die Wassermengen. Daher ist auch dies eine schwache Kopplung.

6: Schnittstelle zwischen hydrogeologischen und hydrologischen Modellierungssystemen

Diese Schnittstellen sind nicht im Fokus der Betrachtungen; dennoch werden einige Charakteristika hier dargestellt. Die Schnittstelle zwischen den Modellierungssystemen für Grund- und Oberflächenwasser kann sehr unterschiedlich implementiert werden. In beiden Systemen werden Wasserfluss und Wasserstand in gewisser Weise bereits gekoppelt betrachtet. Geht man vom Grundwassermodell aus, so wird das Oberflächengewässer entweder in einer Dirichlet- oder einer von Neumann-Randbedingung implementiert. Bei sehr kleinen Oberflächengewässern, z.B. Entwässerungsgräben, die auch trocken fallen, ist die Nutzung von Nebenbedingungen („constraints“) sehr hilfreich, über die ein Wasseraustausch zusätzlich reguliert werden kann. Wesentlich für die Definition der Randbedingungen im Grundwasserströmungsmodell ist die Übergabe des Wasserstandes im Oberflächengewässer. Das Grundwassermodell berechnet daraus intern die ausgetauschten Wassermengen. Auf der anderen Seite ist für das Oberflächengewässer der Wasserstand des Grundwassers relativ irrelevant. Hier sind die auszutauschenden Wassermengen von Bedeutung (FRÖHLICH ET AL. (1998)). Diese unterschiedliche Definition für rückgekoppelte Modellierungen sollte unbedingt beachtet werden. Ansonsten ist auch diese Schnittstelle als schwache Kopplung zu definieren. Es können sowohl sequentielle als auch periodisch-synchrone, iterative oder in seltenen Fällen integrierte Kopplungen vorgenommen werden. Der zeitlichen Diskretisierung und gleichzeitig der Abstimmung zwischen beiden Zeitschrittweitensteuerungen kommt eine besondere Bedeutung zu, da sich die beiden Systeme sehr unterschiedlich verhalten. Für die iterativen und die integrierten Kopplungen kann dies einen erheblichen Rechenaufwand bedeuten. Die räumliche Diskretisierung kann ebenfalls problematisch werden, da der Wasseraustausch über die Gewässersohle berechnet werden muss. Werden die Oberflächengewässer als interne Randbedingung eines Modells definiert, müssen hierfür im Grundwassermodellierungssystem entsprechend kleine und schmale Elemente angelegt werden, was insbesondere bei Finite-Differenzen-Systemen ohne horizontale Kopplungen und damit ohne weitere Konfliktbereiche selten machbar ist. Zusatzpakete der Modellierungssysteme helfen jedoch bei der Wahl der adäquaten Kopplungsvariante weiter.

Kopplungen zu den im Wesentlichen statistischen Niederschlags-Abfluss-Modellierungen und die große Zahl der sehr unterschiedlich aufgebauten Boden-Vegetations-Atmosphären-Modellierungssysteme („Soil-Vegetation-Atmosphere Transfer Schemes (SVATS)“) werden hier nicht weiter betrachtet.

Die Schnittstelle zwischen Klima- oder Wettermodellierungssystemen und Sickerwasser- bzw. Bodenwasserhaushalts-Modellierungssystemen bekommt in der Klimafolgenforschung immer mehr Bedeutung. Die immer leistungsfähigeren Computer ermöglichen auch die Einbeziehung der für die frühen Globalen Klimamodelle (GCM) wenig relevanten Größe der Bodenfeuchte und damit des Bodenwasserhaushalts. Außerhalb dieser Fragestellung wird die Schnittstelle fast ausschließlich als Parame-

terisierung oder sequentielle Kopplung definiert. Übergabeparameter von der Atmosphäre an das Sickerwasser- oder Bodenwasserhaushaltsmodell sind Niederschlag und Potentielle Evapotranspiration, die sich nach den in Kapitel 3.2.1 angegebenen Verfahren berechnen lässt. Bei Kopplungen zwischen GCM und Sickerwassermodellierungssystem treten sehr große Skalendifferenzen auf, die über geeignete statistische Verfahren (statistical downscaling, LEAVESLEY (2005)) oder realitätsnähere, dann aber meist rechenintensivere dynamische Verfahren (dynamical downscaling, LEAVESLEY (2005)), gelöst werden müssen. Dies gilt nicht nur für die räumliche Auflösung, sondern auch für die zeitliche Diskretisierung.

Die Kopplung von hydrologischen und hydrogeologischen Modellierungssystemen macht eine Fragestellung deutlich, die bei rein hydrogeologischen Kopplungen von etwas untergeordneter Bedeutung ist, nämlich die Verknüpfung unterschiedlicher räumlicher und zeitlicher Skalenbereiche. Parameterverteilungen müssen auf diese Differenzen angepasst werden, da sonst gerade bei iterativen oder integrierten Kopplungen zu große Instabilitäten auftreten. Einige Lösungen können rein technisch derzeit nicht durchgeführt werden, z.B. die Kopplung von normalerweise zeitlich und räumlich recht hoch auflösenden und auf lokale bis mesoskalige Bereiche abgestimmten Bodenwasserhaushalts- oder Grundwassermodellierungssystemen mit GCM (BLÖSCHL (1996)).

Kopplungen umweltgeologischer Modellierungssysteme

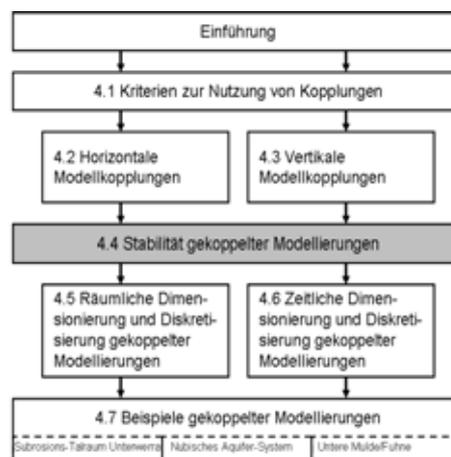
Umweltgeologische Modellierungssysteme weisen meist ähnliche Schnittstellen wie die bisher besprochenen auf, fokussieren aber stärker auf stoffliche Transporte. Eine Besonderheit sind jedoch vertikale Kopplungen von zwei statischen Modellierungssystemen, wie sie z.B. die dreidimensionale Berechnung einer Stoffverteilung auf der Grundlage eines geologischen Modells darstellt. Eine reine Interpolation wird aufgrund der zu berücksichtigenden Stoffparameter und der advektiven Komponenten des Mediums nahezu unmöglich sein. Als Ausweg ist hier nur die Verknüpfung mit einem dynamischen Modell denkbar. In der Praxis werden hier sehr häufig Kompromisse nötig, die die Parameter geostatistischer Interpolationen, abgestimmt auf die geologischen Informationen, anpassen.

4.4 Stabilität gekoppelter Modellierungen

Im vorangegangenen Kapitel wurde auf die Instabilität gekoppelter Modellierungen schon mehrfach eingegangen. An dieser Stelle wird dies kurz systematisiert aufgegriffen.

Parameterisierungen und sequentielle Modellkopplungen führen i.d.R. nicht zu instabilen Gesamtmodellen.

Periodisch-synchrone Modellkopplungen sind für Instabilitäten nur dann anfällig, wenn die Zahl der Übergabeparameter groß ist und wenn die Skalen der Modelle weit auseinander liegen. Im letzteren Fall kann auch eine durch die Nutzung sog. „effektiver Parameter“ (z.B. in BEVEN & KIRKBY (1979) und WANG ET AL. (2006)) in den Modellierungssystemen mit geringerer Auflösung bedingte größenordnungsmäßig andere Parameterisierung notwendig sein, die zu dem mit höherer Auflösung arbeitenden



Modellierungssystem nicht passt. Typische Beispiele hierfür sind Kopplungen von GCM und Bodenwasserhaushalts- oder Grundwassermodellierungssystemen.

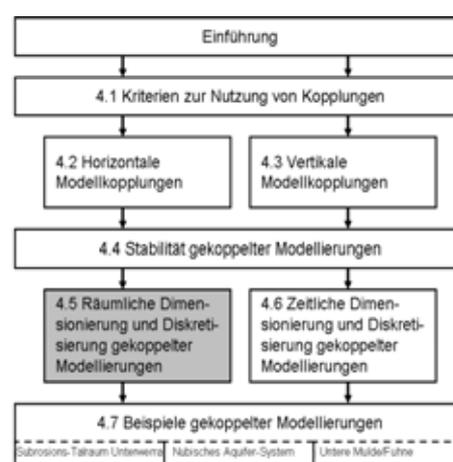
Nicht iterative Kopplungen verhalten sich ähnlich wie periodisch-synchrone Kopplungen.

Die größten Probleme bereiten die iterativ arbeitenden Modellkopplungen und die integrierten Kopplungen. Hier wirken sich bereits geringe Unterschiede in der räumlichen und/oder zeitlichen Diskretisierung sehr stark auf die Berechnungszustände aus. Während dies in den integrierten Modellierungssystemen oftmals über Hilfen bei der Bearbeitung der Modellierungen abgefangen wird, sind die iterativen Kopplungen unabhängig voneinander arbeitender Modellierungssysteme rein auf das Geschick des Bearbeiters angewiesen. Auf der anderen Seite bestehen hier gegenüber integrierten Lösungen größere Möglichkeiten für den Bearbeiter, während der Modellläufe korrigierend – z.B. bei numerischen Fehlern – einzugreifen. Insgesamt muss darauf hingewiesen werden, dass bei allen Kopplungen, selbst bei fast schon zum Standard gehörenden Kopplungen zwischen numerischen Grundwasserströmungs- und –transportmodellierungssystemen, der Bearbeiter bei ungünstigen Konstellationen programmierend eingreifen muss. Definierte Programmierschnittstellen erleichtern dies zwar, schränken aber auch den Spielraum für Weiterentwicklungen ein.

4.5 Räumliche Dimensionierung und Diskretisierung gekoppelter Modellierungen

Die räumliche Dimensionierung von gekoppelten Modellierungen muss sich anders orientieren als die eines einzelnen Modellierungssystems. Schon die Skalendefinitionen für die betrachteten Modellierungssysteme unterscheiden sich teilweise deutlich.

KOLTERMANN & GORELICK (1996) orientieren sich bei der Definition der Skalen sehr stark an geologischen Dimensionen: Sedimentäre Becken (Basins) (10^5 m), Sedimentationsumgebungen (Depositional Environments) (10^3 m), Rinnensysteme (Channels) (10^2 m), Stratigrafische Einheiten (Stratigraphic Features) (1 m), Strömungseinheiten (Flow Regime Features) (10^{-2} m), Porenräume (Pores) (10^{-3} m). VAN DE GIESEN ET AL. (2001) fassen die Begriffe „Maßstab“ und „Dimensionen“ etwas weiter. Der Maßstab eines Prozesses wird hier über seine charakteristische Größe definiert, wodurch auch die Fragen der Dimensionierung an den betrachteten Prozess geknüpft werden. Nicht lineares Verhalten und Variabilität hängen beispielsweise sehr von den betrachteten hydrologischen Prozessen ab, lassen aber auf der anderen Seite bei deren Modellierung auch nur bestimmte Skalenbetrachtungen zu. Prozesse werden auf diese Weise auch eng an Aussagemöglichkeiten von Modellen geknüpft. Die Skala eines Prozesses und der Skalenübergang sind jedoch bei einigen hydrologischen Prozessen räumlich und zeitlich fließend. Bei anderen Prozessen (z.B. Niederschlägen) sind deutliche Diskontinuitäten beim Skalenübergang zu verzeichnen (BLÖSCHL (1996)). VAN DE GIESEN ET AL. (2001) verbinden die Kontinuität des Skalenübergangs direkt mit der Dimension des Modells, die sich in der Anzahl der Parameter bzw. Variablen des Modells niederschlägt. Als Beispiel für einen eher diskontinuierlichen Skalenübergang wird die Berechnung der tatsächlichen Evapotranspiration (ETA) angeführt.



Allgemein muss zunächst auf der Grundlage der sehr unterschiedlich geführten Diskussion um Skalen der Gliederung von BLÖSCHL (1996) in Prozess-, Mess- und Modellskalen gefolgt werden. Die Prozess-Ebene ist bei geologischen Modellierungen nur sehr schwer zu fassen. Daher kann nur mit den von KOLTERMANN & GORELICK (1996) oben dargestellten Dimensionen der beobachteten Ergebnisse gearbeitet werden. Insofern haben diese Skalen auch nur wenig Einfluss auf die mit geologischen Modellierungssystemen gekoppelt entwickelten Modelle.

Werden die in Abbildung 45 zentralen vertikal zu koppelnden Modellierungssysteme für Geologie, gesättigte und ungesättigte Zone zugrunde gelegt, lässt sich die Dimensionierung gekoppelter Modelle in geeigneter Weise veranschaulichen.

Für den Aufbau eines geologischen Modells mit statistischen oder konstruktiven Methoden gelten keine Einschränkungen bei der Dimensionierung. Die Diskretisierung muss sich an den kleinsten darzustellenden Einheiten orientieren. Ähnliches gilt für den Aufbau eines Modells der ungesättigten Zone: Auch hier ist die Dimensionierung wegen der in erster Linie vertikalen Struktur des dynamischen Modells unproblematisch. Die Diskretisierung ist hier eher nach unten begrenzt, da die Parameter nicht beliebig disaggregiert werden können. In der Vertikalen ist zwar bei einigen Modellierungssystemen eine hohe Diskretisierung gefordert, die sich aber nicht unbedingt auf die zu koppelnden Modelle auswirken muss. Bei einem Strömungsmodell für die gesättigte Zone ist in der Dimensionierung die Orientierung an Randbedingungen vorgegeben. Hier ist also die Prozess-Skala maßgeblich. Stabile Randbedingungen sind im lokalen Maßstab eher selten zu finden. Daher liegt die dominante Größe von numerischen Grundwassermodellen auf der regionalen Skala. Die räumliche Diskretisierung ist demgegenüber zwar durch gewisse numerische Gesetzmäßigkeiten nach unten begrenzt, d.h. eine Mindestauflösung muss gewährleistet sein, aber nach oben existieren lediglich technische Grenzen, sodass hier auf lokale Aufgabenstellungen fokussiert werden kann. Zur vertikalen Diskretisierung sei noch einmal auf Kapitel 4.3 verwiesen. Anhaltspunkte zur räumlichen Diskretisierung kann auch das Repräsentative Elementarvolumen (REV) geben, denn wenn die Auflösung so hoch ist, dass Porosität und hydraulische Durchlässigkeit nicht mehr als Kontinuum angesehen werden können, müssen entsprechende Modellierungssysteme gewählt werden. Der Versuch, etwas Ähnliches für die Sickerwasser- und Bodenwassermodellierungssysteme oder Niederschlags-Abfluss-Modellierungssysteme zu definieren („Representative Elementary Areas“, REA), scheitert nach BLÖSCHL (1996) an der zu hohen Heterogenität der verschiedenen Parameter.

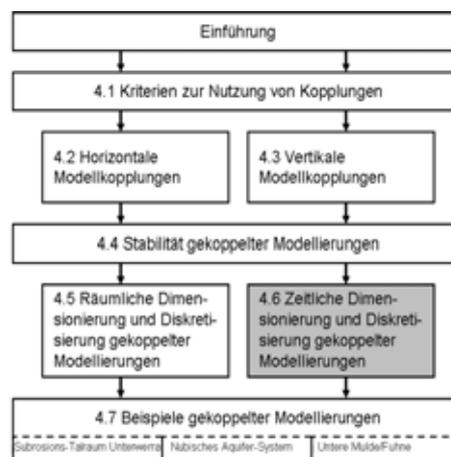
Die Diskretisierung sollte auch aus anderen Gründen nicht zu hoch gewählt werden. Die meisten Parameter für die betrachteten Modelle sind durch Felduntersuchungen nicht in diesem Ausmaß gestützt. Es besteht zudem eine große Differenz zwischen der Aussageweite und der Stützung. Durch Nutzung geeigneter Interpolationsverfahren kann zwar eine Parameterverteilung erzeugt werden; aber bei unzureichender Stützung ist sie als eher unzuverlässig einzuordnen.

Bei Kopplungen mit Gerinnemodellen oder Modellierungen der Atmosphäre sind weitgehend die für diese Modelle geltenden Randbedingungen für die Dimensionierung eines gekoppelten Gesamtmodells ausschlaggebend.

4.6 Zeitliche Dimensionierung und Diskretisierung gekoppelter Modellierungen

Für die zeitliche Dimensionierung gekoppelter Modelle und deren Diskretisierung müssen ebenfalls u.U. andere Rahmenbedingungen als für die einzelnen Modellierungssysteme angesetzt werden.

Die zeitlichen Maßstäbe sind durch die Skalenbereiche weniger Minuten für z.B. sehr kurzfristige Starkniederschlagsereignisse bis hin zu geologischen Prozessen in Zeiträumen von mehreren Millionen Jahren charakterisiert. Nimmt man die geologischen Prozesse heraus, wird das obere Ende der Zeitskala bei etwa 100 – 200 Jahren oder noch sehr viel weniger liegen. Modellierungen wie die von CLAUSSEN (2005) oder GOSSEL ET AL. (2004) sind eher selten.



Bei gekoppelten Modellierungen sind die Modelldimensionen und –diskretisierungen der an der Kopplung beteiligten Modellierungssysteme in erster Linie zu beachten. Im einfachsten Fall kann die Dimensionierung des am längsten dauernden Modellprozesses als maximale Dimensionierung und die höchste Diskretisierung der Modelle übernommen werden.

Die Kopplungsarten wirken sich auf die zeitliche Dimensionierung jedoch sehr deutlich aus.

Bei einer sequentiellen Kopplung brauchen die Modellierungssysteme nicht miteinander synchronisiert zu werden. In dem einen Modellierungssystem können daher alle Werte bereits berechnet werden, die dem anderen Modellierungssystem als Randbedingungen oder Parameter übergeben werden. Bei einer Kopplung mit einem statischen Modellierungssystem, wie den geologischen Modellierungssystemen oder einem stationären Grundwassermodell, ist die zeitliche Dimensionierung sogar völlig unerheblich.

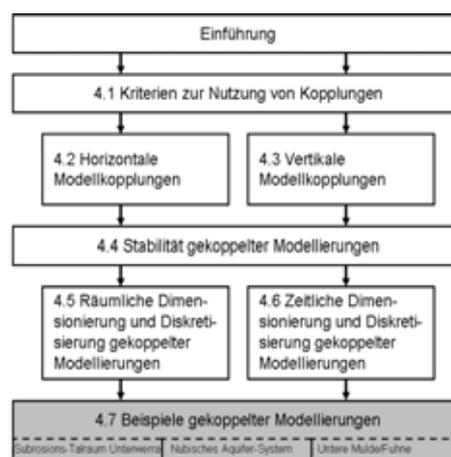
Bei einer periodisch-synchronen Kopplung ist nur zu bestimmten Zeitschnitten eine Kopplung vorzusehen, sodass auch hier die einzelnen Modellierungssysteme weitgehend unabhängig voneinander intern iterieren können.

Erst die iterative Kopplung und die integrierte Kopplung sind auf eine vollständige Abstimmung beider Modellierungssysteme angewiesen, was im besten Fall in Iterationsschritten des im jeweiligen Zeitabschnitt mit der höchsten zeitlichen Diskretisierung arbeitenden Modellierungssystems für die gesamte zu modellierende Zeitspanne resultiert. In ungünstigen Fällen sind die Diskretisierungen sehr heterogen und nicht aufeinander abzustimmen, was zu sehr kurzen Diskretisierungen bei der Kopplung führt. Bei diesen beiden Arten der Kopplung sollte die zeitliche Diskretisierung genau wie bei einer numerischen Modellierung über eine Kontrollgröße reguliert werden, sodass große Diskontinuitäten durch Einführung zusätzlicher Iterationsschritte vermieden werden. Integrierte Systeme mit automatischer Zeitschrittweitensteuerung (z.B. DIERSCH (2005)) sind darauf i.d.R. eingerichtet. Ihre Rechenzeiten können aufgrund dieser Kontrollfunktionen für instabile Modellkonstellationen bzw. –kopplungen entsprechend lang sein.

4.7 Beispiele gekoppelter Modellierungen

Einige Literaturbeispiele können die Nutzung von Kopplungen der Modellierungssysteme verdeutlichen.

KUBATZKI & CLAUSSEN (1998), CLAUSSEN & GAYLER (1997) sowie CLAUSSEN (2005) beschreiben die Kopplung eines Klimamodellierungssystems mit einem Modellierungssystem für Ökosysteme in den Wüstengebieten Nordafrikas für den Zeitraum des mittleren Holozäns. Hierbei werden dem Klimamodell zunächst Standard-Parameter und –randbedingungen angegeben, aus denen ein Szenario berechnet wird, das dem Modellierungssystem für Ökosysteme übergeben wird, um von dort verbesserte Eingangsparameter für den gleichen Modellzeitraum zu bekommen. Selbstverständlich braucht das Modellierungssystem für Ökosysteme noch zusätzliche Parameter und Randbedingungen, die aber während des Berechnungsschrittes nicht verändert werden. Die Ergebnisse des Modellierungssystems für Ökosysteme werden dann als korrigierte Eingangsparameter des Klimamodells für die Berechnung des nächsten Jahres (feste Zeitschrittweite) genutzt. Innerhalb von sechs Jahren sind nach ihren Berechnungen alle Trends, die aus den Anfangsbedingungen dieses Szenarios resultieren, eliminiert. Diese Vorgehensweise wird von CLAUSSEN & GAYLER (1997) als „asynchrone Modellierung“ bezeichnet. Aber sie bedeutet eine instationäre Berechnung, deren Ergebnis aufgrund bestimmter Kriterien (hier: das Fehlen eines Trends in der weiteren Entwicklung) als stationär angenommen wird. Nach der oben dargestellten Systematik handelt es sich also um eine vertikale, interkompartimentale, periodisch-synchrone Modellkopplung.



Eine typische Aufgabenstellung numerischer Grundwassermodelle ist die Berechnung der (Schad-)Stoffausbreitung im Grundwasser, ausgehend von Altlasten, Schadensfällen etc.. GOSSEL ET AL. (1998) beschreiben dies anhand eines Untersuchungsgebiets im nördlichen Niedersachsen. Diese Kopplung von Grundwasserströmungs- und –transportmodell muss als vertikale, intra-kompartimentale, integrierte Kopplung klassifiziert werden. In einigen Modellierungen liegt der instationären Transportrechnung ein stationäres Strömungsmodell zugrunde. In anderen Fällen wird beides instationär berechnet.

Sehr häufig werden auch numerische Grundwasserströmungsmodelle mit Oberflächenwassermodellen (z.B. in HOLZBECHER (2005)) oder Grundwasserneubildungsmodellen (z.B. in PFÜTZNER (1994)) gekoppelt. Die Art der vertikalen und interkompartimentalen Kopplungen kann sehr vielfältig sein und reicht von der reinen Parameterisierung bis zu integrierten Modellkopplungen. Auch zu dieser Kopplung folgen weitere Beispiele in den folgenden Kapiteln.

Die Umsetzung differenzierter geologischer Modelle in numerische Grundwassermodelle wird relativ selten beschrieben. SOMMER-VON JARMERSTED (1992) nutzt relativ grobe Strukturen, die auch noch nicht vollständig dreidimensional umgesetzt wurden. Bei SCHAFMEISTER-SPIERLING (1990) und SCHAFMEISTER (1998) stehen Prinzipstudien im Vordergrund. Allen Beispielen ist gemeinsam, dass es sich um eine vertikale, interkompartimentale, sequentielle (Ein-Weg) Kopplung handelt. In den folgenden Kapiteln werden diese Kopplungen vertiefend dargestellt.

4.7.1 Subrosions-Talraum Unterwerra

Für das Gesamtmodell Subrosions-Talraum Unterwerra wurden mehrere Kopplungen ausgearbeitet.

Das mit konstruktiven Methoden erstellte geologische Modell wurde zu einem hydrogeologischen Strukturmodell umgearbeitet, wobei insbesondere die vollständige Erhaltung aller numerischen Layer und deren anschließende Parameterisierung sehr arbeitsaufwändig waren. Die sequentielle Kopplung über Strukturen schafft zwar einerseits sehr viele Modellierungsmöglichkeiten, wie die automatischen Umsetzungen von ANDERMAN & HILL (2000) zeigen. Andererseits sind die Rahmenbedingungen wie einzuhaltende Mindestmächtigkeiten und am Rand des Talraums die auskeilenden quartären Schichten sowie im Festgesteinsgebiet die quartären Schwemmfächer und Schuttmassen ein schwer zu lösendes Problem. Die horizontale Kopplung des reinen Lockergesteinsaquifers (quartäre Talraum-Füllung) mit den Festgesteinsgrundwasserleitern (Buntsandstein) ist als insgesamt stabil zu bezeichnen.

Die Parameterisierung des numerischen Grundwassermodells wurde mit den Ergebnissen der analytischen Parameterbestimmungen auf der Grundlage der Geländeuntersuchungen vorgenommen. Eine reine Kopplung dieser Ergebnisse mit dem geologischen Modell könnte jedoch nicht für die weitgehenden Prognosen genutzt werden, die die numerische Grundwassermodellierung ermöglicht.

Mit dem numerischen Strömungsmodell wurde die Sickerwassermodellierung nach dem Verfahren von WESSOLEK ET AL. (2004) sequentiell gekoppelt. Auch diese Kopplung erweist sich als recht stabil.

Die Kopplungen der zentralen Modelle zur Geologie, Grundwasserneubildung und Grundwasserströmung sind in Abbildung 46 wiedergegeben.

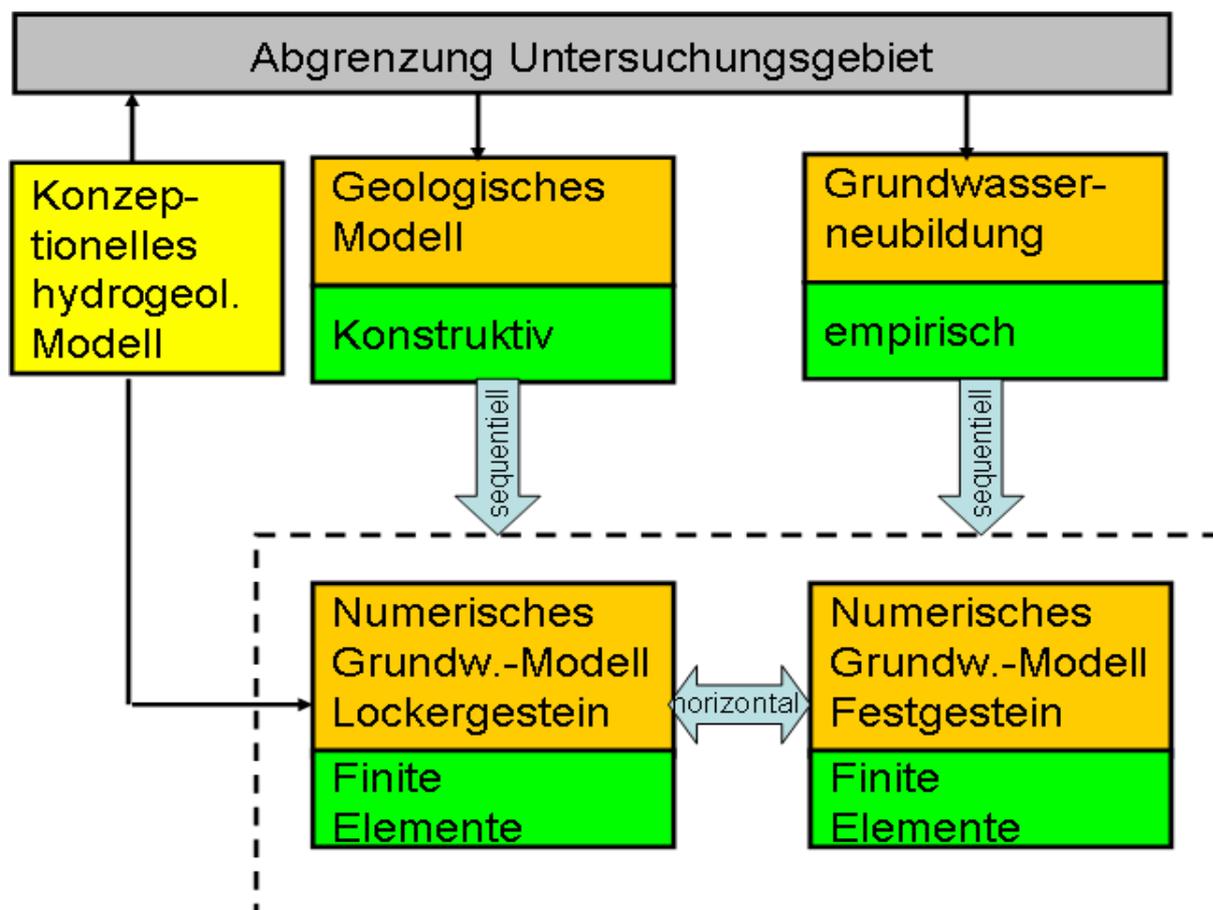


Abbildung 46: Kopplung der Modelle für das Untersuchungsgebiet Subrosions-Talraum Unterwerra.

Die Werra wurde mit ihren Wasserständen statistisch interpoliert sequentiell gekoppelt. Eine iterative Kopplung des Gebietswasserhaushalts mit dem Fluss, dessen Dynamik von dem sich weit oberhalb erstreckenden Einzugsgebiet dominiert wird, ist nicht sinnvoll.

4.7.2 Nubisches Aquifer System

Für die Modellierung des Nubischen Aquifer Systems wurden die Vorstellungen über die spätpleistozäne und holozäne Klimaentwicklung, wie von PACHUR (1999) dargestellt, mit einem Grundwasserströmungsmodell verbunden. Das Klimamodell ist lediglich eine instationäre Parameterisierung der Grundwasserneubildung. Dabei stellte sich im Wesentlichen heraus, dass die Vorstellungen eines ausschließlich von Süden bis etwa zur Mitte des Untersuchungsgebiets ausgreifenden Monsuns kaum mit den untersuchten Isotopen erklärt werden kann.

Das mit geostatistischen Methoden erstellte hydrogeologische Strukturmodell wurde durch eine auf den geologischen Untersuchungen und einigen wenigen Pumpversuchsauswertungen aufbauenden Durchlässigkeitsuntersuchungen parameterisiert. Die Porositäten wurden nach einem von SCLATER & CHRISTIE (1980) für die Erdölexploration entwickelten Algorithmus tiefenabhängig korrigiert.

Die Kopplungen dieser Modelle sind in Abbildung 47 dargestellt. Hierbei wird deutlich, dass die vertikalen Kopplungen recht einfach aufgebaut sind. Die in (SEFELNASR 2007) umgesetzten horizontalen Kopplungen gestalten das Gesamtmodell wesent-

lich komplexer. Im Langzeitmodell waren die horizontalen Kopplungen nicht notwendig.

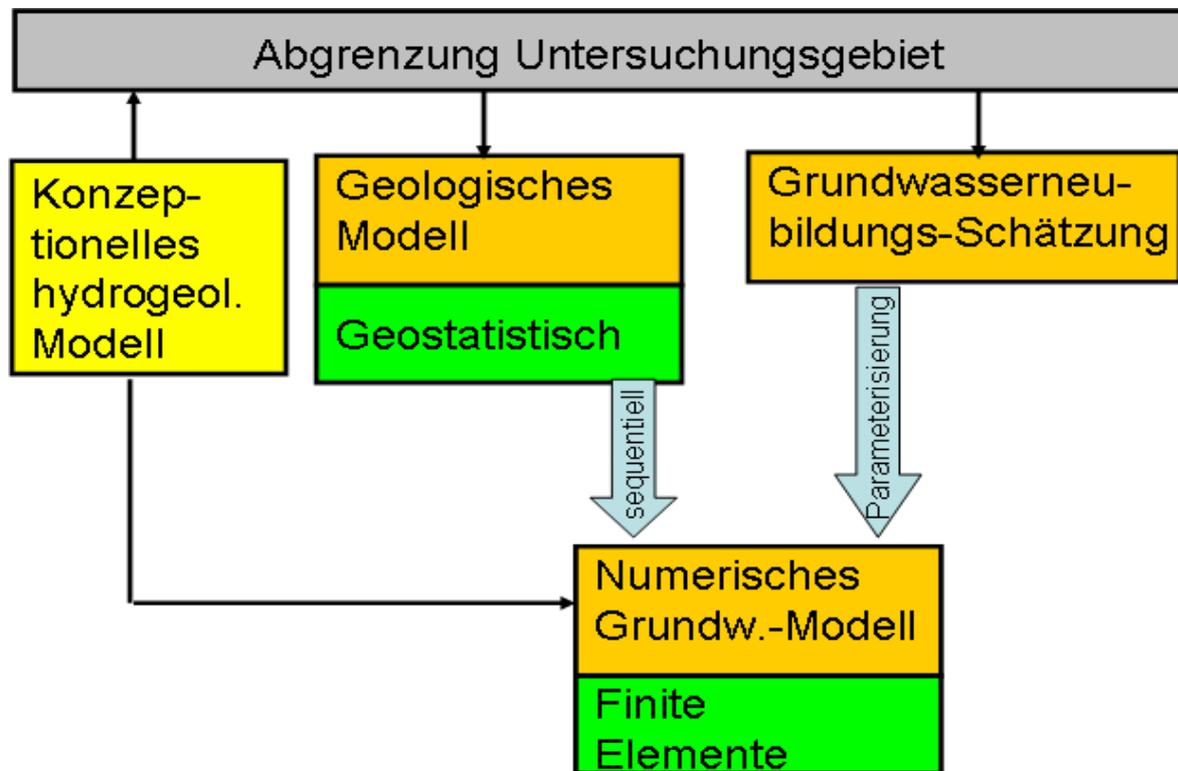


Abbildung 47: Kopplungen der Modelle zur Geologie, Grundwasserneubildung und Grundwasserströmung im Modellgebiet Nubisches Aquifer System.

Die in den Oasen liegenden Entwicklungsgebiete wurden in einem in (SEFELNASR 2007) dargestellten Modell über eine stark erhöhte Diskretisierung besonders berücksichtigt. Die Übergänge zwischen den Gebieten mit geringer und denen mit hoher Auflösung sind als integrierte horizontale Kopplungen mit einer gewissen Instabilität verbunden, die aber bei weitem nicht die Ausmaße wie die beiden integrierten vertikalen Kopplungen im Gebiet Untere Mulde/Fuhne erreichten.

4.7.3 Untere Mulde/Fuhne

Für die sehr komplexe Modellierungsaufgabe des Gebiets Untere Mulde/Fuhne wurden verschiedene Kopplungen genutzt, um einerseits das Modellziel zu erreichen und andererseits verschiedene Kopplungen zu vergleichen.

Horizontale Kopplung der geologischen Modelle

Im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne lagen die geologischen Modelle für die beiden Detailgebiete bereits im 10 m-Raster vor. Nach der Erstellung des regionalen geologischen Modells im 50 m-Raster wurden diese Modellbereiche mit einem 100 m-Buffer aus dem regionalen Modell wieder ausgeschnitten und alle Rasterpunkte gemeinsam zu einem Dreiecksnetz vermascht. Dieses Vorgehen hatte gegenüber dem Verfahren von HUBERT (2005) den Vorteil, dass die Originaldaten der konstruktiven Modellierung von FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004) unverändert übernommen werden konnten. Schnittmengen der Modelle von FABRITIUS (2002) und WOLLMANN (2004) gab es nicht. Die Grenzbereiche wiesen darüber hinaus auch für die hydrogeologisch relevanten Einheiten keine größeren Versatzbeträge auf und konnten

problemlos interpoliert werden. Die auf diesen Punktmengen aufbauenden TINs wurden als Grundlage für die Erstellung des numerischen Grundwasserströmungsmodells eingesetzt. Durch die so ausgeführte horizontale Kopplung verschiedener statischer Modellierungssysteme konnte ein konsistentes geologisches Modell erstellt werden, das den Anforderungen der notwendigen vertikalen Kopplungen genügt.

Vertikale Modellkopplungen: Sickerwassermodell und geologische Daten

Das Sickerwassermodell wurde anhand der geologischen Karten für den Boden parameterisiert, da nicht für das Gesamtgebiet Bodenkarten mit Substratangaben vorlagen. Eine direkte (sequentielle) Kopplung mit dem geologischen Modellierungssystem ist nur mit bestimmten Modellierungswerkzeugen möglich, die räumliche Analysen auf der Grundlage der Geländeoberkante ermöglichen. Das nach dem oben dargestellten Verfahren der horizontalen Kopplung aus mehreren Teilmodellen erstellte geologische Modell war zu Beginn der Sickerwassermodellierung nicht verfügbar, weshalb die vereinfachte Nutzung der digitalisierten Karten verfolgt wurde.

Die Kopplung mit Klimamodellen wurde zwar nicht als sinnvoll angesehen, da die benötigten Messdaten der Vergangenheit bereits vorlagen. Aber die Modellierung der potentiellen Evapotranspiration bildete eine wesentliche Grundlage, die auch für weitergehende Modellierungen genutzt werden kann. Insofern ist auch die Kopplung mit der Modellierung der Evapotranspiration eine sequentielle Kopplung, die Übernahme der Niederschlagsdaten eine Parameterisierung der Sickerwassermodellierung.

Geologie und gesättigte Zone

Der Aufbau und die Anforderungen eines numerischen Grundwassermodells hat für die Entwicklung des geologischen Modells bereits eine entscheidende Rolle gespielt, denn die Erweiterung des geologischen Modells war nur notwendig, um das durch sinnvolle Randbedingungen abzugrenzende Grundwassermodell zu strukturieren und parameterisieren. Für das numerische Grundwasserströmungsmodell mussten die Grenzflächen des geologischen Modells auf Verschneidungen kontrolliert und Mindestmächtigkeiten eingefügt werden. Diese Aufgabe ist komplex, denn für die Bereiche mit geringeren Schichtmächtigkeiten wurden gleichzeitig die Durchlässigkeiten aus den angrenzenden Schichten übernommen. Die Aufgaben wurden mit GIS-Werkzeugen gelöst, um eine größtmögliche Transparenz während der Bearbeitung und kompatible Datenaustauschformate zu erhalten. Diese sequentielle Kopplung ist bei Kopplungen mit einem numerischen Grundwassermodellierungssystem, das sehr eng auf die gesättigte Zone beschränkt ist, für die Aufgabe der Modellierung bei sehr starken Grundwasserabsenkungen und –wiederanstiegen nicht geeignet, da hierbei weite Bereiche trocken fallen und nicht wiedervernässt würden. Hierbei wäre eine vielfache Überarbeitung des aus dem geologischen Modell abzuleitenden hydrogeologischen Strukturmodells notwendig, was bei 10 Zeitschnitten sehr aufwändig würde.

Sickerwassermodell und numerisches Grundwassermodell

In instationären hydrogeologischen Modellierungen ist die Kopplung dieser beiden Modellierungssysteme über zeitliche Differenzierung der Grundwasserneubildung ein wesentlicher Grund für die zeitliche Variabilität. Dabei ist die Übernahme der Eingangsdaten im numerischen Grundwassermodell recht komplex, da die Daten sowohl zeitlich als auch räumlich variabel sind.

Grundsätzlich ist die Sickerwasserrate von den Grundwasserflurabständen abhängig, was eine iterative oder gar integrierte Kopplung nahelegt. In der Sickerwassermodellierung spielen aber nur Grundwasserflurabstände < 2 m eine Rolle, sodass bei ge-

ringen Schwankungen der Grundwasseroberfläche diese Größe räumlich differenziert, aber zeitlich konstant angenommen werden kann. Damit ist eine periodisch-synchrone oder eine sequentielle Kopplung sinnvoll, die wesentlich stabiler als eine iterative Kopplung ist.

Bei der Modellierung Untere Mulde/Fuhne wurde zunächst eine sequentielle Kopplung realisiert, um ein erstes, vorläufiges, stationäres Grundwasserströmungsmodell aufbauen zu können.

Für die instationäre Strömungsmodellierung wurden dann periodisch-synchrone Kopplungen für die aus den Tagebaulaufzeiten resultierenden Zeitschnitte realisiert, sodass zu jedem der 10 Zeitschnitte auf der Grundlage der neuen Grundwasserflurabstände eine neue Hydrotopzuweisung vorgenommen werden konnte.

Oberflächengewässer und numerisches Grundwassermodell

Die Wasserstände der Oberflächengewässer wurden weitgehend statistisch modelliert und sequentiell als Randbedingungen gekoppelt. Durch die Flusslaufverlegung der Mulde 1975 wurde in diesem Fall eine periodisch-synchrone Kopplung notwendig.

Gekoppelte Modellierung der ungesättigten und der gesättigten Zone

Für den überwiegenden Teil des Gebiets war eine Modellierung der ungesättigten Zone aufgrund der geringen Mächtigkeit nicht notwendig.

Die großräumigen und tiefgreifenden Grundwasserabsenkungen im Bereich der Tagebaue machen jedoch eine Berücksichtigung der großen Grundwasserflurabstände notwendig. Realisiert wurde dies exemplarisch über eine periodisch-synchrone Kopplung zwischen einem eindimensionalen numerischen Modellierungssystem für die ungesättigte Zone und einem dreidimensionalen Finite-Elemente-Modellierungssystem für die Strömung in der gesättigten Zone, die entsprechend der Tagebaulaufzeiten synchronisiert wurden. Der lithologische Aufbau, der für die Parameterisierung des Modells für die ungesättigte Zone benötigt wurde, wurde aus dem hydrogeologischen Strukturmodell und dem geologischen Modell abgeleitet. Die Kopplung wurde so ausgeführt, dass lediglich die Verzögerung für den Eintrag des Sickerwassers in die gesättigte Zone berechnet wurde. Diese Modellkopplung erwies sich als sehr stabil und praxistauglich, wenn auch arbeitsaufwändig.

Zusätzlich wurde eine integrierte Modellierung durchgeführt, die allerdings sehr instabil war. In den durch die Sümpfung in den Tagebauen betroffenen Gebieten mit mächtiger ungesättigter Zone überträgt sich das unter Kapitel 3.3 dargestellte Problem der zu geringen Wassersättigung auf das Verhalten des gesamten gekoppelten Systems.

Strömungs- und Transportmodellierung der gesättigten Zone

Die Kopplung erfolgte, wie bei numerischen Grundwassermodellierungen üblich, in integrierter Form. Auch hier zeigten sich Instabilitäten, die eine häufige Korrektur des Modells notwendig machten. Grund war das Strömungsmodell, das durch die Verzerrungen der Geometrien der Zellen in den Tagebaugebieten bereits eine Neigung zur Instabilität besaß. Für die Stabilität der Kopplung ist es sehr wesentlich, ob ein stationäres oder ein instationäres Strömungsmodell dem Transportmodell zugrunde liegt, denn mit einem stationären sind die darauf aufgebauten Transportmodelle um ein Vielfaches stabiler.

Die Kopplungen sind in Abbildung 48 dargestellt.

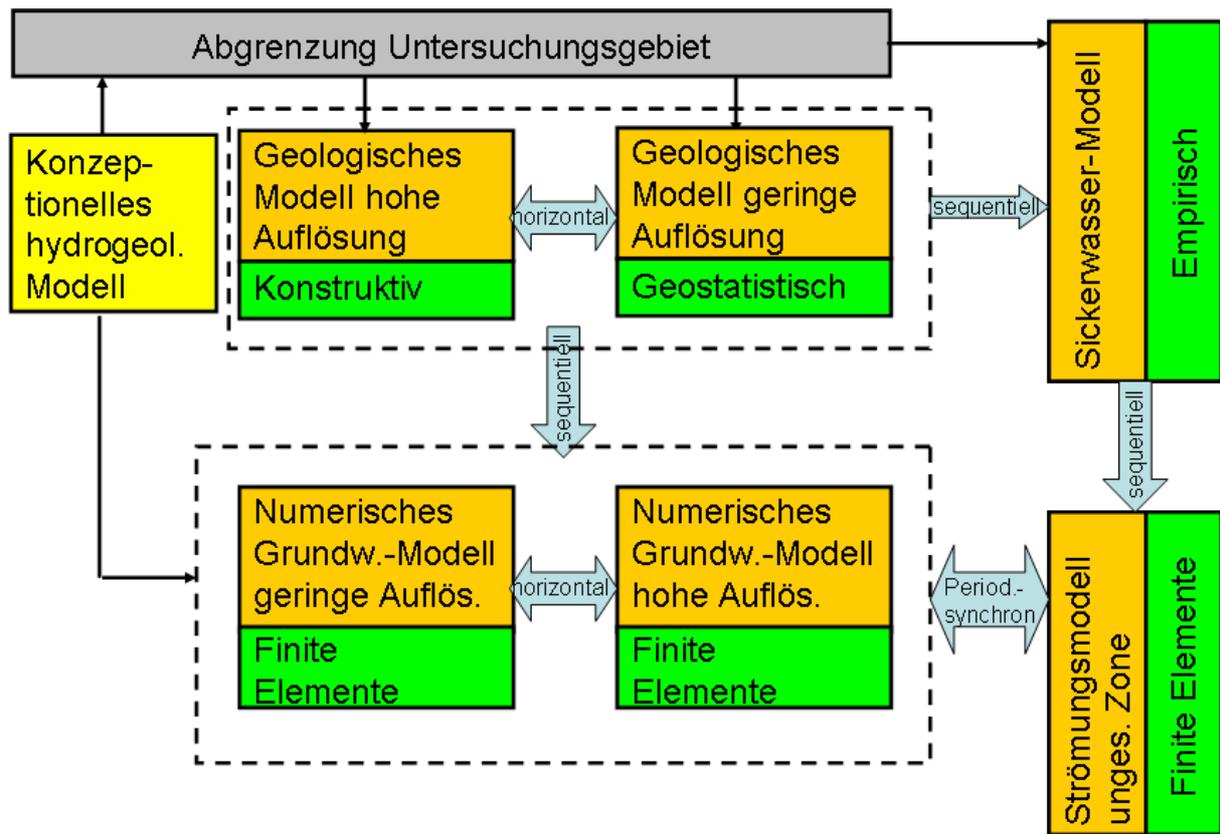


Abbildung 48: Kopplungen der Modelle im Modellgebiet Untere Mulde/Fuhne.

4.8 Zusammenfassung der Schnittstellen

Schnittstellen für die Verknüpfung von Modellierungssystemen, die bei der Lösung komplexer Zielstellungen notwendig werden können, können systematisiert werden und erlauben in dieser Kategorisierung Bewertungen ihrer Einsatzmöglichkeiten. Die Kopplung mehrerer Modellierungssysteme wirkt sich in vielen Fällen durch Instabilitäten aus. Je enger die Kopplung und je komplexer die verknüpften Parameter oder Randbedingungen sind, desto höher wird meist der Aufwand zur Stabilisierung der gekoppelten Modelle. Besonders deutlich wird dies an den Modellbeispielen Untere Mulde/Fuhne und Nubisches Aquifer System. Horizontale wie vertikale Modellkopplungen sind hiervon gleichermaßen betroffen.

5 Vergleiche zwischen gekoppelten Modellen und der Realität

5.1 Kalibrierung

Als Kalibrierung wird vereinfachend der Vorgang der Anpassung eines Modells an die Wirklichkeit, im Falle der hydrogeologischen, geologischen und hydrologischen Modelle an Messwerte bzw. Referenzwerte, insbesondere von Wasserständen und -flüssen bzw. Abflüssen, verstanden. Es geht dabei modelltheoretisch um die systematische Veränderung von Parametern der Modellfunktion, sodass ein Minimum der Abweichung von der Zielfunktion erreicht wird.

Nach BOSSEL (1994) gilt für Modelle allgemein, dass die Verhaltensgültigkeit (Anfangsbedingungen müssen mit Realsystem übereinstimmen), Strukturgültigkeit (Wirkungsstruktur von Modell und Realität müssen übereinstimmen), empirische Gültigkeit (Ergebnisse eines Szenarios müssen mindestens plausibel sein) und Anwendungsgültigkeit (Modell und Anforderungen des Anwenders müssen bezüglich des Modellzwecks übereinstimmen) gegeben sein müssen. Diese, auch als Verifikation bezeichneten Voraussetzungen, gelten für die kommerziellen Modellierungssysteme und ganz sicher auch für alle akademischen Modellierungssysteme.

Die Kalibrierung von Modellen ist vielleicht der arbeitsaufwändigste Teil der Modellierung und sollte eigentlich bereits im Ziel des Modells festgelegt sein. Demgegenüber steht eine wie auch immer unzureichende Datenbasis, die bei der Definition des Ziels der Kalibrierung berücksichtigt werden sollte.

Der Kalibrierungsprozess gestaltet sich bei den Modellierungssystemen sehr unterschiedlich. Daher soll vor einer Untersuchung der Kalibrierungsmöglichkeiten für gekoppelte Modelle zunächst kurz die Kalibrierung der einzelnen Modellierungssysteme dargestellt werden.

Bei den meisten Modellierungssystemen besteht die Möglichkeit der Nutzung eines Parameterschätzers, der mit Hilfe einer Optimierung der Modellfunktion die Zielfunktion bei Freigabe eines Parameters (oft in bestimmten Grenzen) möglichst gut automatisch nachbildet.

Für die Kalibrierung von Modellen gilt allgemein, dass sie zwar beliebig festgelegt werden kann, aber nur in gewissen Grenzen sinnvoll ist. Die äußerste Grenze bildet zunächst die Messgenauigkeit der Kalibrierungsdaten, bei Grundwasserständen derzeit beispielsweise noch Zentimeter.

Bezogen auf die Abweichungen der Modelle von der Realität sollten einige theoretische Überlegungen vorangestellt werden, um den Vergleich genauer einordnen zu können. BREDEHOEFT (2003) formuliert dies sehr drastisch wie folgt: „My point is that we can choose the wrong conceptual model, fit the data and get a wrong answer.“

Ein ganz wesentliches Kriterium für die Anpassung ist z.B. die Frage, wie aussagekräftig die Messwerte der Eingangsparameter, aber auch der Zielfunktion, sind. So ist z.B. die Reichweite eines Langzeitpumpversuchs und die damit verbundene Bestimmung von hydraulischer Durchlässigkeit und Speicherkoeffizient ganz anders einzuschätzen als die Bestimmung über eine Siebanalyse anhand einer Gesteinsprobe aus dem Aquifer. BLÖSCHL (1996) weist darauf hin, dass die reine statistische Bewertung von Punktdaten, verglichen mit geostatistischen Auswertemethoden oder sogar prozessorientierten Auswertemethoden, zu sehr schlechten Ergebnissen führt („noto-

riously poor“), da sie immer von einem Zustand der maximalen Entropie ausgehen. Zusätzlich müssen die Charakteristika der Messwerte mit den aus Prozessen resultierenden Parameterverteilungen verglichen werden. So ist z.B. die Verteilung (und damit die Notwendigkeit der Stützung einer Verteilungsberechnung) bei einem glazigenen oder fluviatilen Aquifersystem völlig anders als bei einem marinen Aquifersystem. Bei diesem Vergleich hilft die geostatistische Auswertung der Messdaten, indem die Korrelationslänge über eine detaillierte Variogrammanalyse bestimmt wird. Nach BLÖSCHL (1996) ergibt sich die Korrelationslänge als der aus dem Variogrammodell bestimmte Range. Diese Größe kann zunächst als Aussagereichweite übernommen und mit der Messwertverteilung so verglichen werden, dass die Flächen der Voronoi- (oder Thiessen-)Polygone mit der aus der Aussagereichweite (r) resultierenden Fläche ($\pi \cdot r^2$) verglichen werden sollte. Sind die Voronoi- (oder Thiessen-)Polygone wesentlich größer als die Flächen der Aussagereichweiten, ist die Stützung (auch der Kalibrierung) entsprechend schlecht. Eine sehr genaue Anpassung eines Modells an eine schlecht gestützte Zielfunktion ist wenig sinnvoll. Insofern ist ein gut strukturiertes Monitoring eine wesentliche Voraussetzung für die Kalibrierung eines Modells. Dies wird bei vielen Autoren, die sich rein praktisch an den vorhandenen Daten orientieren, leicht übersehen (OLSTHOORN & KAMPS (2006), HILL (1998), MIDDLEMIS (2001)). Diese Methode stellt eine Mindestanforderung dar, denn es ist natürlich durchaus möglich, dass durch die Messwertverteilung die tatsächliche Heterogenität gar nicht erfasst werden kann.

Ein ähnliches Verfahren ist für die Auswertung von Ganglinien, die für die dynamische Kalibrierung notwendig sind, denkbar. Hier ist das Variogramm eindimensional zeitlich zu berechnen und der Range mit den durchschnittlichen Zeitabständen der Messungen zu vergleichen.

Bei beiden Methoden ergibt sich natürlich das Problem, ob über die Messungen die räumlichen oder zeitlichen Charakteristika der realen Verteilungen überhaupt richtig wiedergegeben werden können. Hierbei ist insbesondere der Effekt des Aliasing zu beachten.

Für die Frage nach der Genauigkeitsanforderung an die Kalibrierung kann die Auswertung des Variogrammodells ebenfalls weiter helfen, indem der Sill der Aussagereichweite des Variogrammodells genutzt wird. Die Nutzung des Nugget-Effektes wäre zwar durchaus auch sinnvoll, führt aber bei als kontinuierlich angenommenen Verteilungen, bei denen der Nugget-Effekt meist von vornherein ausgeschaltet wird, zu der Eingangshypothese zurück. Auch hier sollte die Entsprechung für die Auswertung von Ganglinien der dynamischen Modelle eingesetzt werden. Mit dieser Methode wäre ein besserer Vergleich zwischen der an sich schon hypothetischen „Messwertverteilung“ und der modellierten Verteilung möglich als es die Methoden der Abweichungsquadrate (SAIERS ET AL. (2004)) und der Korrelationskoeffizienten, die ohne räumliche oder zeitliche Beziehungsanalysen arbeiten, vermögen.

Kalibrierungen haben oftmals den Nachteil, dass sie sich auf Modellzustände beziehen, für die aus vielerlei Gründen keine echten Messdaten als Vergleich mit den Modelldaten vorliegen. Hier kann und muss mit Proxy-Daten gerechnet werden, auch wenn deren Ungenauigkeit i.d.R. nur schlecht quantifiziert werden kann. Die Beispiele zeigen dies ausführlich für das Nubische Aquifersystem und das Modell Untere Mulde/Fuhne.

Bei der folgenden Betrachtung wird auch kurz dargestellt, welche Parameter für welche Zielgrößen am sensibelsten sind.

Sickerwassermodelle

Wie in NEUMANN (2005) und JANKIEWICZ ET AL. (2005) ausführlich dargestellt, werden für die Kalibrierung der Sickerwasserrate die Ergebnisse von Lysimetermessungen genutzt. Die in Lysimetern betrachteten Flächen sind meist zu klein, um die Abhängigkeiten von umfangreichen Flächennutzungen (z.B. Baumbeständen) feststellen zu können. Da Lysimeter auch nicht flächendeckend betrieben werden, können bis auf seltene Ausnahmefälle nur die Methoden im Sinne einer Verifikation kalibriert werden und nicht die Modelle selbst (nicht einmal die Ergebnisse nur für die Hydrotöpfe).

Die sensibelsten Parameter sind bei Sickerwassermodellierungssystemen nicht leicht zu ermitteln, da es einerseits mehrere diskontinuierliche Parameterverteilungen und andererseits verschiedene Modellierungssysteme gibt. Die Unterschreitung gewisser Grenzflurabstände des Grundwassers ist z.B. ein sehr sensibler Parameter. Er kann aber in manchen Modellierungssystemen in Abhängigkeit von Boden und Landnutzung definiert werden, sodass sich hier keine einheitliche Bewertung ergibt.

Modelle der ungesättigten Zone

Modelle der ungesättigten Zone sind wesentlich schwieriger zu kalibrieren als Sickerwassermodelle, da die Datendichte der Grundlagendaten erheblich geringer ist und kaum experimentell hergestellt werden kann wie die Bodenzonen in Lysimetern. Die einzigen Methoden, den Wasserfluss in der ungesättigten Zone unterhalb der Bodenzone zu messen, bestehen im Einbau von Tensiometern sowie in der Berechnung der Differenz zwischen Sickerwasserrate und dem aus Abflussganglinien bestimmten Basisabfluss, der als Grundwasserneubildung und damit als die Menge des aus infiltriertem Niederschlagswasser dem Grundwasser zugegangenen Wassermenge angesehen werden kann.

Die Modellierungssysteme selbst können im Labor hervorragend an Säulenversuchen im Sinne einer Verifikation getestet werden.

Die Parameter sind hier auf die gesättigte hydraulische Durchlässigkeit und die Porosität bzw. Feldkapazität beschränkt. Dominierend sind bei diesen Modellierungssystemen aber die Randbedingungen, da die ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit und die Wassersättigung der Poren vom Zustrom aus der Bodenzone abhängen.

Numerische Grundwasserströmungsmodelle

Die Kalibrierung numerischer Grundwassermodelle ist anhand von zwei zu messenden Zielgrößen möglich, den Grundwasserständen – bei instationären Modellen in Form der Grundwasserganglinie mit den modellierten Werten zu vergleichen – und den Abflüssen. Das Verfahren der Kalibrierung über Abflüsse zeigt, dass die Zielgröße zur Kalibrierung von Modellen für die ungesättigte Zone auch vom Verhalten der gesättigten Zone abhängt, insbesondere bei der Betrachtung instationärer Strömungszustände.

Die Zieldefinition für die Strömungsmodellierung ist aufgrund der Charakteristik des Untersuchungsgebietes genauer festzulegen. Die Nutzung von Parameterschätzern (DOHERTY (1994), CARRERA & NEUMAN (1986)) ist zwar nützlich, sollte jedoch nicht dazu verleiten, ein derart kalibriertes Modell unbedingt als bestmögliches anzusehen.

Numerische Grundwasserströmungsmodellierungssysteme benötigen als Parameter die hydraulischen Durchlässigkeiten, Porositäten und – je nach Modellierungswerkzeug als Parameter oder Randbedingung definiert – die Grundwasserneubildung. Darüber hinaus sind die Definition der vier Arten von Randbedingungen und evtl. der Nebenbedingungen möglich (s. Kapitel 3.4). Diese große Zahl von Eingangsdaten

macht das Verfahren der Kalibrierung sehr komplex. Einige Grundregeln können dennoch genutzt werden:

Die räumliche Verteilung der Grundwasserstände hängt stärker von der Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeit ab als von der Porosität. Die Kalibrierung erfolgt also meist über die hydraulische Durchlässigkeit.

Die zeitliche Dynamik der Wasserstände wird einerseits von den Randbedingungen sehr stark beeinflusst. Andererseits spielen jedoch in der Fläche die Komponenten Grundwasserneubildung und Porosität/Speicherkoeffizient die größere Rolle.

Ganz wichtig für die Kalibrierung ist die Feststellung von SAIERS ET AL. (2004), dass die Kalibrierung anhand von Wasserstands- und Abflussdaten wesentlich bessere Ergebnisse zeigt als für die Kombination beider, wenn sie einzeln angewendet werden.

Numerische Transportmodelle der gesättigten Zone

Die Beobachtung von Konzentrationen ist die wesentliche Datengrundlage zur Kalibrierung von Transportmodellen. Eine Kalibrierung über Frachten ist zwar systematisch sicherer, weil damit eine Überprüfung des Stoffaustrags anhand des Vergleichs mit den Stoffeinträgen ermöglicht wird. Aber die Berechnung der Zielgröße ist mit zusätzlichen Fehlern wegen der notwendigen Messung der Abflüsse verbunden.

Da neben der Advektion, wie in Kapitel 3.5 dargestellt, eine Vielzahl weiterer Parameter und die Transportrandbedingungen, die im Wesentlichen systematisch gleich wie die Strömungsrandbedingungen aufgebaut sind, in die Modellierung eingehen, wird die Kalibrierung entsprechend unübersichtlich. Lediglich die Diffusion kann von der Kalibrierung meist von vornherein durch starke Einschränkung auf ihren Wertebereich vernachlässigt werden. Bei bestimmten Stoffen kann dies auch für den biologischen Abbau gelten. Sowohl Dispersion als auch Sorptionsprozesse sind maßgeblich an der Geschwindigkeit der Stoffausbreitung beteiligt, wobei meist die Dispersion der aufgrund seiner Maßstabsabhängigkeit schwerer zu definierende und auch über Messungen zu bestimmende Parameter ist.

Hydrologische Modelle

Gerinnemodelle können ähnlich wie Strömungsmodelle der gesättigten Zone anhand der Wasserstände und Abflüsse kalibriert werden. Dies ist aufgrund der insbesondere bei kleinen Gerinnen einfacheren Messverfahren sehr viel leichter als im Grundwasserbereich möglich. In Niederschlags-Abflussmodellierungssystemen besteht sogar der größte Teil der Modellierungsaufgabe in der Kalibrierung. Kalibriert werden die Fließgeschwindigkeiten mit Rauigkeitsparametern und evtl. mit den Abflussquerschnitten.

Geologische Modelle

Die hier vorgestellten, mit statistischen oder konstruktiven Methoden erstellten geologischen Modelle können nicht kalibriert werden, da sie eigentlich nur eine digitale Form der konzeptionellen Modelle darstellen und keine Prozesse simulieren.

Auf der vorhandenen Datenbasis wird über die Modellierungsmethoden ein bestmögliches Modell erstellt, das in sich nur auf Widerspruchsfreiheit gegenüber geometrischen Kriterien geprüft werden kann. Die Konstruktion bzw. Erstellung des Modells geschieht also bereits auf der Grundlage der Daten, die als Zielfunktion einer Kalibrierung dienen könnten. Dies ist ein Widerspruch zur Definition der Kalibrierung. Deshalb ist der Terminus für diese Modellierungsverfahren nicht nutzbar. Anders sä-

he es bei Prozessmodellierungen aus, bei denen die Bohrdaten und geologischen Karten zur Kalibrierung genutzt werden könnten.

Da die Ergebnisse der geologischen Modelle in vielen verschiedenen Modellierungssystemen weiter verwendet werden, ist die Sensitivität gegenüber diesen Daten besonders hoch. Deshalb ist es von besonderer Bedeutung, die Datenbasis genauer einschätzen zu können. Die oben genannten geostatistischen Methoden können dabei erheblich helfen. Auch hier sollte der Range als Maßstab für die Voronoi-(Thiessen-)Polygone dienen, gerade bei der Nutzung konstruktiver Methoden.

Kalibrierung von Modellkopplungen

Die in Kapitel 4.3 dargestellten Modellkopplungen zeigen die zentrale Position des geologischen Modells, das selbst nicht kalibriert werden kann. Die übergebenen Parameter an das ungesättigte und das gesättigte Modellierungssystem, evtl. auch an das Sickerwassermodellierungssystem, umfassen nur wenige Parameter und werden im Falle einer sorgfältigen Datenverarbeitung über Indizes verschlüsselt aufbereitet. Selbst die Strukturen werden nicht unverändert übernommen, wie die Darstellung der Kopplung zum numerischen Grundwasserströmungsmodellierungssystem zeigt. Die indizierte Verarbeitung hilft bei der Kalibrierung der gekoppelten Modellierung. Die einmal etablierten Strukturen werden dabei nicht verändert, sondern nur die Parameterbelegungen. Die Frage stellt sich jedoch, ob es tatsächlich sinnvoll ist, ein selbst nicht kalibrierbares Modell mit einem anderen Modellierungssystem auf der Grundlage von dessen Zielgröße anzupassen. Hierbei handelt es sich letztlich um eine inverse Modellierung.

Noch komplexer wird es, wenn mehrere Modellierungssysteme verknüpft sind. Die jeweiligen Parameteränderungen können dann nur noch bei einer Datenhaltung mit GIS nachgeführt werden. Gerade bei den Notwendigkeiten der Kopplung mit einem wie auch immer erstellten geologischen Modell zeigt sich, dass durch die vielfache Nutzung der abgeleiteten Parameter eine hohe Sensitivität vorliegt.

Sequentielle Kopplungen sind bei der Kalibrierung zwar arbeitsaufwändiger, aber transparenter als integrierte Kopplungen. Periodisch-synchrone Modellkopplungen sind ähnlich einzuordnen, verlangen durch den häufigeren Rückgriff auf das gekoppelte Modell aber etwas mehr Arbeitsaufwand. Die Kalibrierung iterativer Kopplungen ist sowohl arbeitsaufwändig als auch intransparent. Diese Kopplungsart kann eigentlich nur so eingesetzt werden, dass bereits gut kalibrierte Modelle miteinander gekoppelt werden, die nach der Kopplung nicht weiter kalibriert werden. Integrierte Kopplungen erleichtern meist die Kalibrierung durch Parameterschätzer. Ansonsten wird in dem komplexeren Modellierungssystem die Zahl der Variablen durch die Nutzung des gekoppelten Systems wachsen und damit auch die Möglichkeiten der Kalibrierung.

Gerade für die Kopplung mit einem geologischen Modell ist dessen Aktualisierbarkeit von Bedeutung. Viele geologische Modellierungswerkzeuge lassen zwar eine vielfache Auswertung der fertigen Modelle zu. Aber die Aktualisierbarkeit, die für die Kalibrierung von größter Bedeutung ist, um die mit dem gekoppelten Modell erzielten Ergebnisse in das geologische Modellierungssystem zurückzubringen oder neue, im Verlauf der Modellierung erhaltene Informationen, nachträglich zu berücksichtigen, ist oft nicht möglich. Letztendlich zielt dies auf die in Kapitel 3.1 geforderte Erhöhung der Interaktivität von geologischen Modellierungssystemen.

5.2 Validierung

Die Validierung bezeichnet den Vorgang der Prüfung eines kalibrierten Modells (ohne weitere Veränderungen der Parameter bzw. ggf. Veränderungen entsprechend der jeweiligen Bedingungen) anhand eines zusätzlichen Datensatzes von Messwerten (Kontrollwerten der Zielgröße). Dabei können die zeitlich veränderlichen Rand- und Anfangsbedingungen verändert werden.

Der Nutzen von Modellvalidierungen wird sehr unterschiedlich bewertet. Während SAIERS ET AL. (2004) und NEUMANN (2005) ausführen, dass Validierung (post calibration prediction) wesentliche Verbesserungen ihrer Modelle erbrachte und daher notwendig ist, bezweifeln CARRERA & BASTIDAS (2005) die Funktion der Validierung aus systematischer Sicht. Das Problem jeden Modells wie auch jeder anderen wissenschaftlichen Theorie (als deren Umsetzung ein Modell aufgefasst werden kann) ist, dass es zwar beliebig oft auf Richtigkeit geprüft werden kann, aber schon ein falsches Modellergebnis zu seiner Ablehnung führt (POPPER (1994)). Insofern messen CARRERA & BASTIDAS (2005) der Modellvalidierung lediglich die Bedeutung einer Beruhigung des Modellierers zu. Die Validität eines Modells kann nach ihrer Meinung um so schlechter geprüft werden, je länger die Modellierungszeiträume sind.

Für gekoppelte Modelle ist die Aussagefähigkeit der Validierung zusätzlich eingeschränkt, weil durch die Kopplung i.d.R. zusätzliche Parameter zu berücksichtigen sind, die wiederum einer Schätzung der Verteilung auf der Grundlage evtl. weiterer unzureichender Datensätze und damit zusätzlichen Fehlerquellen unterliegt.

Sequentielle und periodisch-synchrone Modellkopplungen sind hiervon weniger betroffen, wenn hier die Modelle einzeln validiert werden. Bei iterativen und integrierten Modellkopplungen ist zwar die Validierung des Gesamtmodells wesentlich einfacher als bei sequentiell oder periodisch-synchronen Modellen. Aber die internen Parameterschätzungen lassen auch viel größere Fehlerbereiche zu, was sich u.a. auch in höheren Instabilitäten bemerkbar macht.

5.3 Sensitivitätsanalyse, Fehleranalyse und -fortpflanzung

Die folgende Sensitivitätsanalyse bezieht sich weniger auf die Sensitivität der Gesamtmodelle gegenüber einzelnen Parametern als vielmehr auf die Kopplungen.

Horizontale Kopplungen werden im Allgemeinen über Randbedingungen verknüpft. Ihre Sensibilität gegenüber diesen Modelleinflussgrößen ist daher sehr hoch. Parameter dagegen werden i.d.R. nur in einer höheren Auflösung in einem der beiden Modelle berücksichtigt. Daher muss hier nur die sehr allgemeine Regel beachtet werden, dass zu hohe Kontraste der Stabilität des Gesamtmodells schaden. Ein Übergangsbereich (zeitlich oder räumlich gesehen) sollte in mehreren Stufen zu den veränderten Parametern überleiten.

Bei vertikalen Kopplungen können die Parameter und Randbedingungen in beiden Modellierungssystemen bereits sehr unterschiedlich gestaltet sein, was eine Sensitivitätsanalyse einzelner Parameter praktisch unmöglich macht. Bereits in vielen einzelnen Modellen sind Fehleranalysen sehr komplex und nicht mehr mit den normalen physikalischen Gesetzen (z.B. Gaussches Fehlerfortpflanzungsgesetz) zu erfassen. Sie ähneln eher einer Prognoserechnung, bei der anstelle eines tatsächlich zu erwartenden Datensatzes von Parametern und Randbedingungen die Spannweite der Fehler für jeden einzelnen Parameter und jede einzelne Randbedingung nachzubilden versucht wird, um die Reaktion des Modells auf diese Veränderung zu testen. Betrachtet man nur die Modellkopplungen, so ergeben sich eigentlich nur zwei Mög-

lichkeiten: Entweder die Modellkopplungen verstärken den Fehler, was zu einem divergenten Verhalten des Gesamtmodells führt, oder sie schwächen die Reaktion des Gesamtmodells auf den Fehler, was zu einem konvergierendem Modellverhalten führt. Es besteht zudem die Tendenz, dass sich divergente Gesamtmodelle instabil verhalten, während konvergente Modelle stabil sind. Wichtig ist in diesem Fall auch, festzuhalten, dass nicht nur Parameter, Anfangs- und Randbedingungen gerade in Kopplungen zu dem Verhalten des Gesamtmodells beitragen, sondern auch die Modellgeometrien.

Die Analyse eines Gesamtmodells auf konvergentes oder divergentes Verhalten lässt sich für nichtlineare, allerdings nur zeitlich dimensionierte Modelle mit Hilfe der in BOSSEL (1994) dargestellten Methoden abschätzen. Für die betrachteten Systeme kommt aufgrund der raum-zeitlichen Komplexität der Eingangsdaten dieses Verfahren leider nicht in Betracht. Die Auswertung nicht-linearer Systeme, für die gerade die gekoppelten Modelle typische Beispiele darstellen, wäre in ihrem Verhalten nach CARRERA ET AL. (2005) nur bei vollständiger Linearisierung evtl. möglich.

5.4 Beispiele für die Kalibrierung gekoppelter Modelle

Die Kalibrierung gekoppelter Modelle wird im Folgenden anhand der Modelle Untere Mulde/Fuhne und Nubisches Aquifer System dargestellt. Dabei geht es weniger um die Ergebnisse der Kalibrierung als vielmehr um das Verhalten der Kopplungen bei der Kalibrierung. Die beiden Gebiete weisen sehr heterogene Messwertdichten auf. Während im Gebiet Untere Mulde/Fuhne statistisch etwa alle 1-2 km² eine Messstelle vorhanden ist, sind es im nordöstlichen Afrika etwa 1000 km². In beiden Fällen sind jedoch die Verteilungen sehr heterogen. Die Kalibrierungen wurden ohne Parameterschätzer durchgeführt.

Wesentlich für die Anpassung der räumlichen Verteilung ist, wie oben dargestellt, insbesondere das geologische Modell. An der Unteren Mulde/Fuhne wurde zunächst ein erstes stationäres Modell kalibriert. Dieses Modell war nur mit dem geologischen Modell sequentiell gekoppelt. Durch das Sickerwassermodell und linear interpolierte Wasserstände der Oberflächengewässer war eine erste Belegung der Randbedingungen gegeben. Die Indizierung der aus den Bohrprofilen abgeleiteten Klassen der hydraulischen Durchlässigkeiten erleichterte die Kalibrierung sehr. Die Interpolation innerhalb einer Modellschicht ist damit in gut begründeter Weise mit leicht veränderten Werten durchführbar. Selbst in einem solchermaßen einfach gekoppelten Gesamtmodell ist die Stabilität nicht in jedem Falle gegeben. Insbesondere sehr verzerrte Geometrien der Elemente sind für Instabilitäten verantwortlich, was in dem Modell Untere Mulde/Fuhne in den Randbereichen der Tagebaue durch entsprechende Korrekturen der aus dem geologischen Modell abgeleiteten Strukturen behoben werden musste. Im Modell des Nubischen Aquifer Systems waren solche Veränderungen aufgrund der rein statistischen und auf das numerische Grundwassermodell abgestimmten Strukturierung nicht notwendig. Auch hier wurde zunächst ein stationäres Modell erstellt, obwohl in beiden Modellbeispielen fest stand, dass stationäre Modelle die Aufgabenstellungen nicht erfüllen konnten. Die Anpassung erfolgte so, dass einerseits die absolute Höhe des Grundwasserstandes an den Messstellen und andererseits der Verlauf der Grundwassergleichen durch die Werte der hydraulischen Durchlässigkeit und deren räumliche Verteilung nachgebildet wurden. In dem Modell Untere Mulde/Fuhne wurde dadurch ein mittlerer Fehler von 0.38 m (mittlere quadratische Abweichung von 0.46) erreicht und die Verteilung gut abgebildet.

Im Nubischen Aquifer System sind die Abweichungen mit ± 5 m etwas größer, aber bei der Gebietsgröße war dies auch zu erwarten.

Die instationäre Kalibrierung gestaltete sich wegen der unzureichenden Messdatenreihen sehr viel schwieriger.

Für das Gebiet Untere Mulde/Fuhne lag ein „mittlerer“ Gleichenplan aus den Jahren 1921/22 sowie eine grobe Abschätzung der Sumpfungswassermengen vor (THIEM (1922)). Der nächste, durch Grundwassergleichen und eine umfassendere geologische Analyse gestützte Bericht liegt aus dem Jahr 1952 vor (THIEM (1952)). Wasserstandsganglinien konnten für die Kalibrierung nicht genutzt werden. Für eine Stichtagsmessung im Oktober 2002 lagen die Wasserstände von 142 Messstellen vor, die alle im Bereich der beiden Detailmodelle lokalisiert waren. Zusätzlich wurden die mittleren Grundwassergleichen für einen Teil des Gebiets vom Beginn der 1980er Jahre (GROTE & KRÜGER (1984) und HELMERT (1984)) berücksichtigt. Für den Zeitraum April 2005 bis April 2006 standen Abflussmessungen in Zeitabständen von etwa 14 Tagen für mehrere Bäche im Norden des Modellgebiets zur Verfügung (NEUMANN & WYCISK 2006), die zu einer Kalibrierung über den Niedrigwasserabfluss genutzt werden konnten. Die Nutzung weiterer Daten (Proxy-Daten aus dem Tagebaubetrieb) werden in Kapitel 6 beschrieben und ausgewertet.

Für das Gebiet des Nubischen Aquifer Systems lagen außer einem Grundwassergleichenplan (Ball 1927) nur Proxy-Daten in Form von fluviatilen und limnischen mittelholozänen Sedimenten vor.

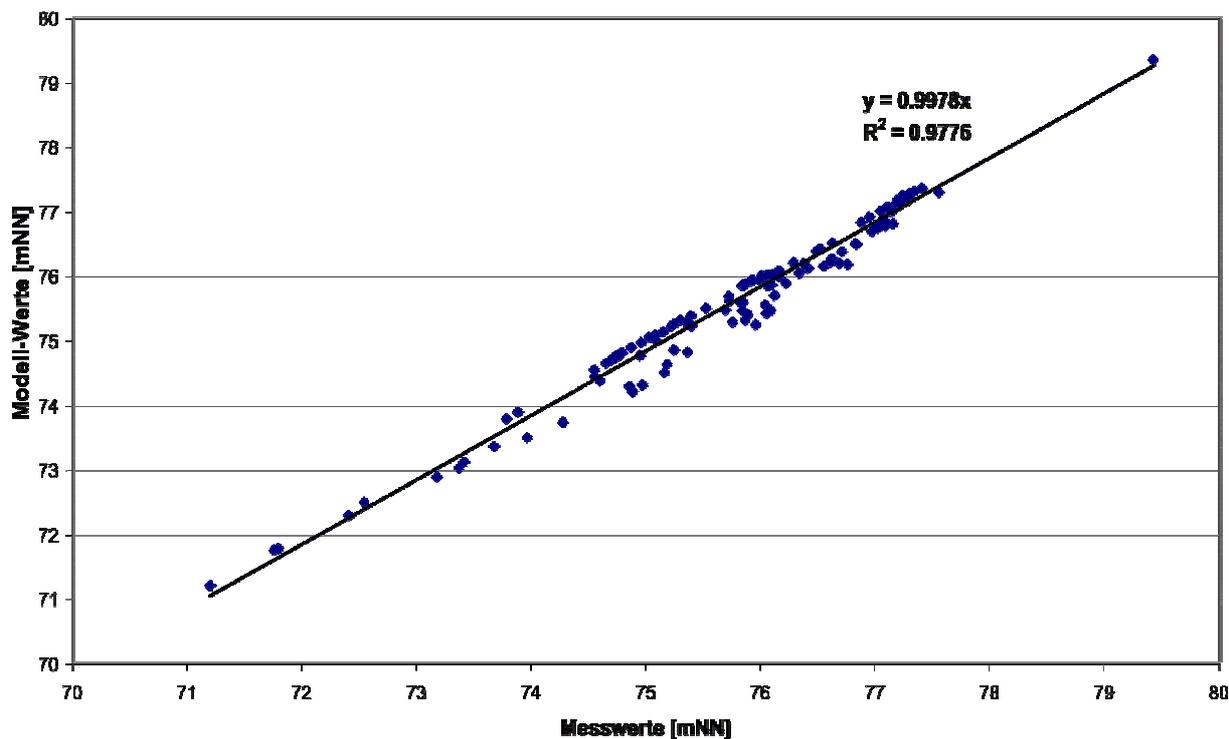
Die Kalibrierung mit gekoppelten Modellierungssystemen gestaltet sich je nach Kopplungsart bei der instationären Modellierung sehr viel komplexer als bei der stationären Modellierung. Die sequentiellen Kopplungen sind erwartungsgemäß noch unkompliziert. Insbesondere nach der stationären Modellkalibrierung war die räumliche Verteilung festgelegt und brauchte nicht weiter geändert zu werden. Die periodisch-synchrone Kopplung der Sickerwassermodellierung ist ebenfalls noch recht stabil anzubinden. Die Kalibrierung anhand der Abflussmessungen der Bäche im Norden des Gebiets zeigt auch gute Ergebnisse im Vergleich zu den Modellergebnissen.

Die Kalibrierung der Randbedingungen an den Oberflächengewässern war durch die rein sequentielle Kopplung der statistischen Funktionen sehr einfach durchzuführen und im Modellverhalten sehr stabil.

Für die Kalibrierung des integriert gekoppelten Transportmodells lagen für den Zeitraum 1991 bis 1999 hydrochemische Messdaten vor (THIEKEN 2001). Sehr problematisch gestaltet sich die Ermittlung der Modellparameter: Daten der Sorption wurden für einige Standorte im Rahmen der Untersuchungen (Safira II, Abschlussbericht) zwar erhoben, aber eine durchgängige Belegung für das Modellgebiet ergibt sich daraus nicht. Abbauparameter für die Vielzahl der organischen Stoffe, die sich untereinander beeinflussen, wurden nicht ermittelt. Das Transportmodell wurde daher lediglich für einen idealen Tracer realisiert. Die integrierte Kopplung verhielt sich, wie unter Kapitel 4.4 bereits dargestellt, sehr instabil. Für eine erste Analyse der Stoffausbreitung wurde daher ein idealer Tracer unter Berücksichtigung der Dispersion und der Diffusion ohne Sorption und biologischen Abbau modelliert. Die Ergebnisse wurden mit den Konzentrationen einiger Stoffe verglichen. Es ergaben sich plausible Verteilungen.

Die Ergebnisse der instationären Berechnungen waren ein wenig schlechter als die der stationären Kalibrierung. Der mittlere Fehler betrug zwar nur 0.15 m. Aber die mittlere quadratische Abweichung lag bei keiner Variante unter 1 (Minimum 1.15).

Korrelation zwischen Messwerten und stationärem Modell



Korrelation zwischen Messwerten und instationärem Modell

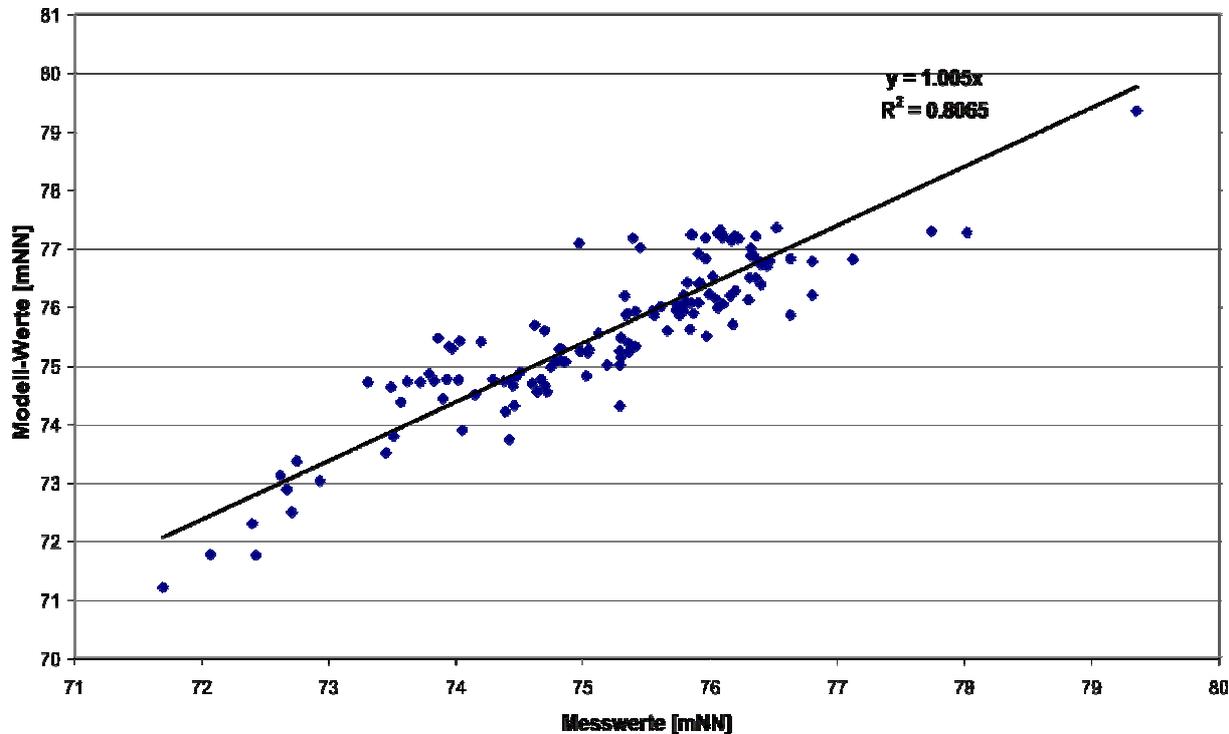


Abbildung 49: Scatter-Plot der gegen die Messdaten aufgetragenen Modelldaten. Die Gerade und das Bestimmtheitsmaß des stationären Modells von 0.9776 (Korrelationskoeffizient 0.9887) und einem Bestimmtheitsmaß von 0.8065 (Korrelationskoeffizient 0.8981) des instationären Modells zeigen einen sehr engen Zusammenhang der Datenmengen (Stichprobenumfang: Jeweils 142 Grundwassermessstellen in den quartären Grundwasserleitern).

Das Diagramm zum Vergleich beider Datenmengen zeigt die gute Übereinstimmung zwischen Modell- und Messdaten (s. Abbildung 49).

Interessant ist der Vergleich mit der geostatistischen Interpretation der Messdaten: Das omnidirektionale experimentelle Variogramm zeigt ein nicht-stationäres Verhalten. Für das Gebiet ist jedoch aufgrund der Abgrenzung über solide Randbedingungen ein Trend von Südwest nach Nordost erkennbar. Bei Berücksichtigung dieser Richtung zeigen die längs dieser Achse berechneten Variogramme einen Sill von etwa 0.2 und einen Range von 350 m. In Querrichtung ist der Range mit ca. 400 m etwas länger. Daraus ergeben sich für die Voronoi-(Thiessen-)Polygone, dass sie eine Fläche von etwa 0.5 km² besitzen müssten. Tatsächlich sind, wie Abbildung 51 zeigt, etwa die Hälfte der Voronoi-(Thiessen-)Polygone größer als 0.5 km², und damit ist die Messpunktdichte nicht ausreichend. Die Kalibrierungsergebnisse liegen bei den mittleren Fehlern etwa in der Größenordnung des Sill und sind damit als ausreichend genau anzusehen.

Beim Nubischen Aquifer System wurden im instationären Modell die Grundwasserneubildung und die Porosität gegeneinander so kalibriert, dass das dynamische Verhalten eines Paläo-Sees im Süden des Modellgebiets nachgebildet werden konnte. Die Wasserstandsdynamik des Sees lag zwar nur in Form von Proxy-Daten vor (Sedimente). Aber das Modell konnte mit plausiblen Eingangsdaten der Grundwasserneubildung und der Porosität sowohl die höchsten Wasserstände als auch die Fläche und die wahrscheinliche Zeitspanne der Existenz des Sees gut wiedergeben.

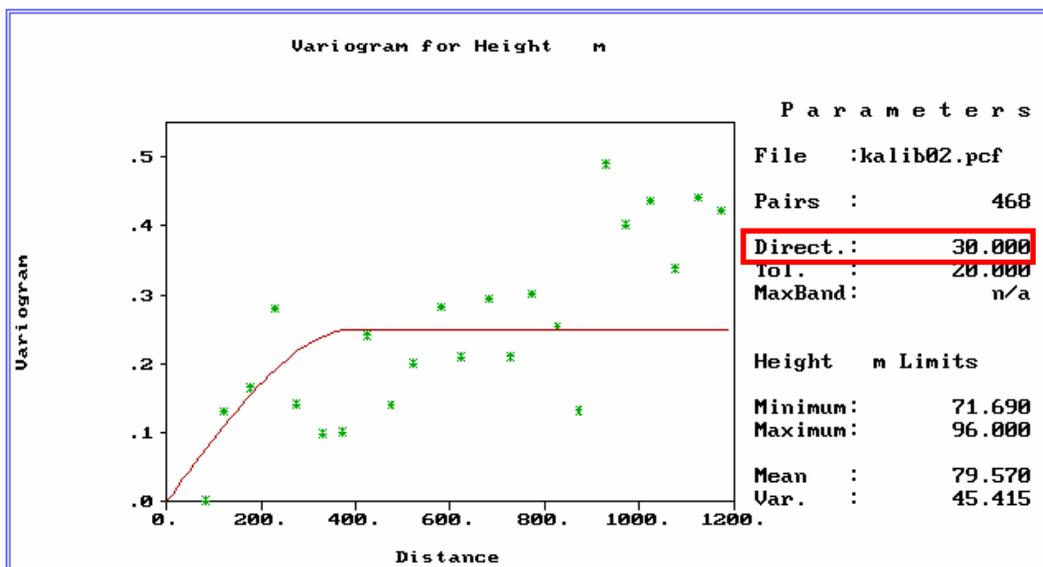
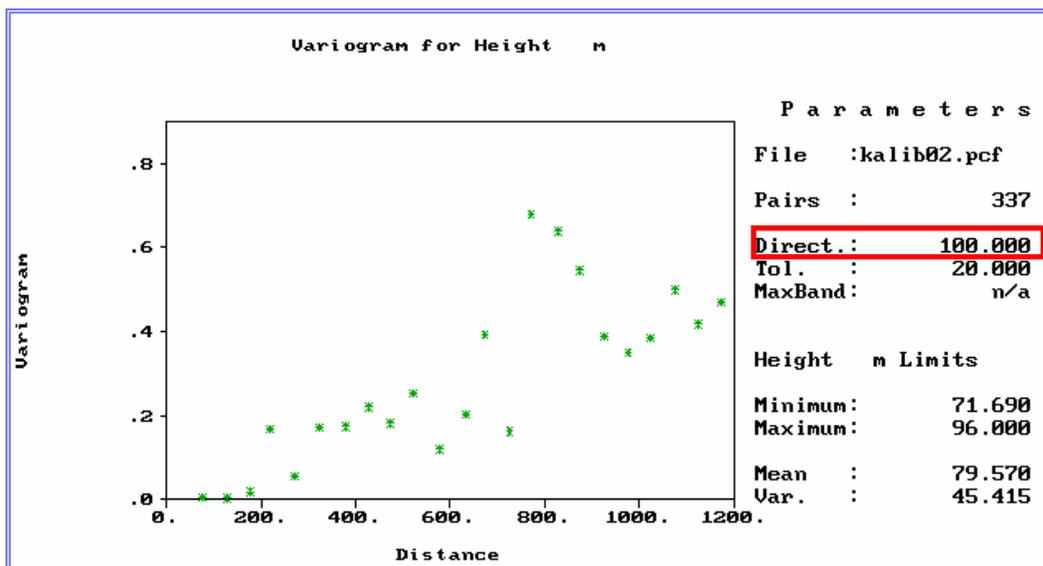
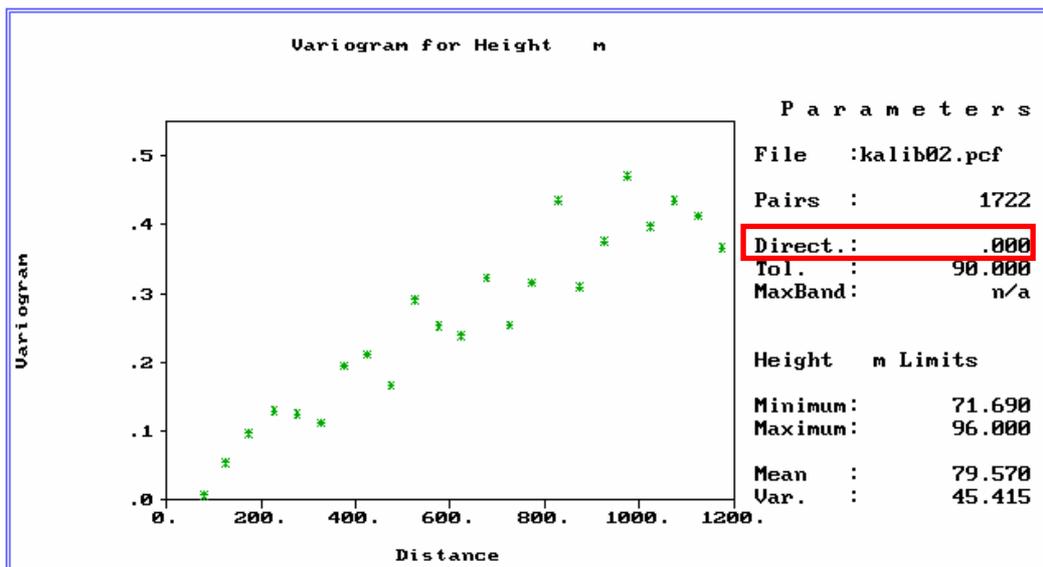


Abbildung 50: Variogramme der Messdaten im Gebiet Untere Mulde/Fuhne für die Stichtagsmessung Oktober 2002. Das omnidirektionale Variogramm (oben) zeigt ein lineares Variogrammmodell. Die beiden gerichteten Variogramme haben einen Sill von etwa 0.2 und einen Range von etwa 350 m.

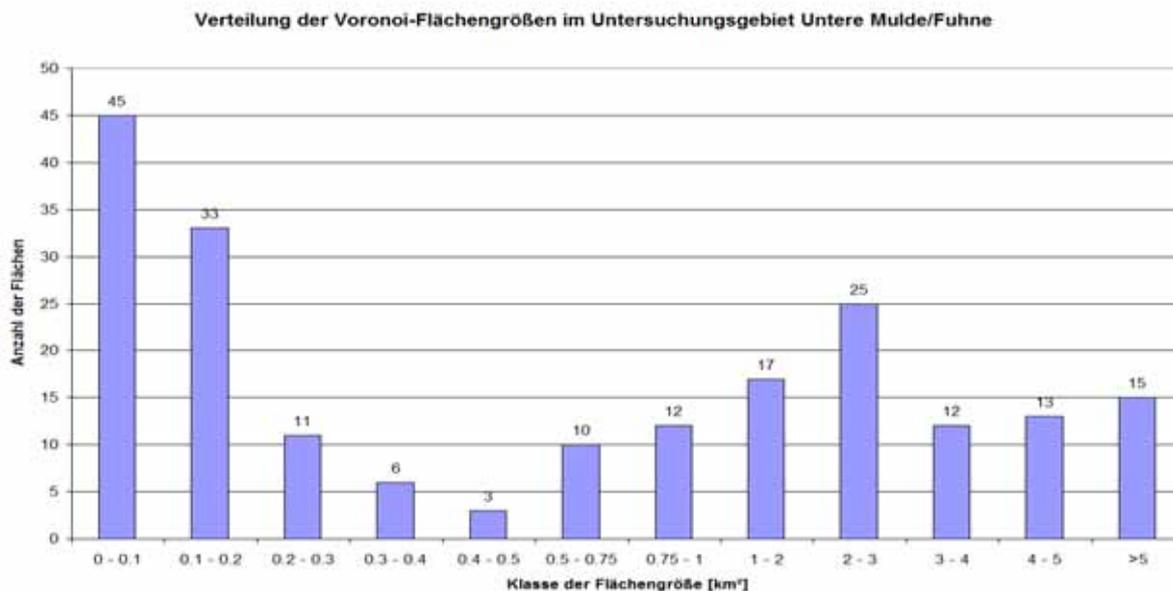


Abbildung 51: Verteilung der Flächengrößen der Voronoi-(Thiessen-)Polygone im Gebiet Untere Mulde/Fuhne

5.5 Zusammenfassung der Kontrollinstrumente

Der Vergleich zwischen Modellen mit gekoppelten Modellierungssystemen und der Realität wird durch die Art der Modellkopplungen entscheidend beeinflusst. Bestimmte Arten der Modellkopplungen lassen nur in sehr reduziertem Ausmaß Kalibrierungen und Sensitivitätsanalysen sowie Fehlerbetrachtungen zu.

6 Prognoserechnungen mit gekoppelten Modellen

Die Diskussion über die Zulässigkeit von Prognosen im Allgemeinen wird immer wieder und für die verschiedensten wissenschaftlichen Disziplinen geführt. Da die hier dargestellten Modellierungsmethoden einem sehr mechanistischen systemtheoretischen Ansatz folgen (mit einigen statistischen Erweiterungen), kann die Determiniertheit für die Fragestellung der Prognostizierbarkeit wie für den gesamten Themenbereich der vorliegenden Arbeit als Grundvoraussetzung angenommen werden. Unter dieser Prämisse, die Grundlage der Formulierung aller hier betrachteten Modellierungssysteme ist, lassen sich auch aus den Kopplungen dieser Modellierungssysteme prognostische Berechnungen ableiten.

Die Frage, wie die Zulässigkeit von Prognosen bewertet werden kann, wird selten bearbeitet. REICK (2000) zeigt Methoden auf, um die Zuverlässigkeit von Prognosen zu untersuchen und wählt dabei statistische Auswertungen sehr häufig durchgeführter Prognosen, wie z.B. Wetterprognosen. Prognostische Berechnungen hydrogeologischer Modelle und Modellkopplungen würden demnach nachträglich einer Evaluation unterzogen werden müssen, was aber nicht umfassend geschehen wird, weil die meisten der Modelle einen rein hypothetischen Charakter haben und nicht umgesetzt werden, z.B. in Umweltverträglichkeitsuntersuchungen, Entscheidungsunterstützungssystemen (decision support systems, DSS) usw.

In der Erdölindustrie gibt es daher eine „goldene Regel“ für zuverlässige Prognosezeiträume: Ein über 10 Jahre kalibriertes Modell erlaubt Prognosen für weitere 10 Jahre.

Hydrogeologische Modelle werden sehr häufig für Prognosen von Eingriffen in den Naturhaushalt oder Wasserhaushalt erstellt. Prognosen werden als Szenarien auf der Grundlage von kalibrierten Modellen erstellt und enthalten im sinnvollsten Fall die gleichen Parameterbelegungen mit veränderten Randbedingungen. Eine Sonderform dieser prognostischen Berechnungen ist die „Prognose“ für vergangene, nicht mehr durch Messungen kalibrierbare oder validierbare Zustände, wie es für die beschriebenen Modellbeispiele Untere Mulde/Fuhne und das Nubische Aquifersystem gilt.

Wie BLÖSCHL (1996) für hydrologische Modellierungen aufzeigt, können veränderte Randbedingungen auch die Veränderung von Parametern, die eigentlich zeitlich unverändert bleiben sollten, notwendig machen, wenn sich beispielsweise Fließrichtungen vollständig ändern. Auch von anderen Autoren wird die Zulässigkeit von prognostischen Berechnungen von Modellen grundsätzlich in Frage gestellt, weil die zusätzlich zu den Änderungen der Randbedingungen oftmals stattfindenden Parameteränderungen nicht ausreichend berücksichtigt werden können (CARRERA & BASTIDAS (2005)).

Da prognostische Berechnungen häufig das Ziel einer hydrogeologischen Modellierung sind, ist es in diesen Fällen notwendig, bereits zu Beginn der Modellierung die Dimensionierung und Diskretisierung auch unter diesem Gesichtspunkt vorzunehmen. Letztendlich hängen auch die Wahl der Modellierungssysteme und ihrer Kopplungen von dieser Fragestellung ab. In entwicklungsorientierten Forschungsansätzen muss diese Präkonditionierung nicht vorgenommen werden.

Bei der Auswahl der Modellierungssysteme für prognostische Berechnungen ist die Entscheidung sehr wichtig, an welchen Stellen statistische Modellierungssysteme eingesetzt werden und an welchen Stellen deterministische Systeme notwendig sind. Statistische Modellierungssysteme haben meist den Nachteil, dass sie Randbedin-

gungen und Parameter ohne Berücksichtigung interner Zusammenhänge summieren und damit die Strukturgültigkeit vernachlässigen. Ihr Einsatz in statisch in die Modellierung eingehenden Bereichen ist deshalb meist unkritischer zu sehen als in dynamisch zu modellierenden Systemteilen.

Die Möglichkeit zur Erstellung einer Prognose hängt von einer Reihe von Faktoren ab:

- Qualität der Kalibrierung
- Vorhersagbarkeit der veränderlichen Randbedingungen (und evtl. Parameter)
- Stabilität des Verhaltens des Gesamtmodells
- Adäquate Dimensionierung und Diskretisierung in Raum und Zeit
- Auswahl der geeigneten Modellierungssysteme
- Wahl geeigneter Anfangsbedingungen für die prognostischen Berechnungen

Die Kopplung von Modellierungssystemen spielt insbesondere bei der Vorhersagbarkeit der Randbedingungen und für die Stabilität des Verhaltens des Gesamtmodells eine wesentliche Rolle.

Die Stabilität kann zwar aufgrund des nicht-linearen Systems, wie in Kapitel 5.3 gezeigt, nicht zu Beginn einer Modellierung definitiv bestimmt werden. Es ist jedoch in den meisten Fällen so, dass mit der Zunahme der Komplexität des Gesamtsystems auch die Wahrscheinlichkeit der Instabilität wächst. Durch die Wahl geeigneter Kopplungsmechanismen kann, wie in Kapitel 4.4 gezeigt, die Wahrscheinlichkeit eines instabilen Verhaltens reduziert werden.

Die Zahl der Randbedingungen, für die eine prognostische Belegung für Zukunftsszenarien festgelegt werden muss, steigt zwar meist mit der Anzahl der Modellierungssysteme. Es eröffnet sich aber die Möglichkeit, statistische Vorhersagen durch deterministisch modellierte Randbedingungen zu ersetzen und damit die Zuverlässigkeit der Vorhersage zu erhöhen.

Die folgenden Beispiele erläutern diese Effekte anhand von Modellierungen in die Vergangenheit, die eine Sonderform der Prognose darstellen. In ihnen werden Modelle, die an aktuellen Messungen kalibriert wurden, nicht in die Zukunft mit entsprechend veränderten Randbedingungen gerechnet, sondern in die Vergangenheit. Der Vorteil dieser Prüfung von Theorien besteht darin, dass es Proxy-Daten für einige Systemzustände gibt.

Die Grundwasserneubildung wurde für das erste, stationäre Grundwasserströmungsmodell im Beispiel Untere Mulde/Fuhne über eine reine Parameterisierung festgelegt. Dieses Verfahren wurde durch die Sickerwassermodellierung ersetzt. Die empirische Funktion von Klima-, Boden- und Landnutzungsparametern ist wesentlich zuverlässiger als die einfache Einschätzung. Ein weiteres Beispiel ist die Interpolation der Randbedingungen erster Art, die durch eine Zeitreihen-analytisch bestimmte statistische Funktion gestützt wurde.

Eine besondere Herausforderung des Modells Untere Mulde/Fuhne stellten die Modellierungen der Sümpfungsmaßnahmen für die Braunkohlentagebaue dar. Für die Grundwasserentnahmen gab es nur vereinzelte und sehr ungenaue Daten, die für die direkte Übernahme in ein Grundwassermodell nicht ausreichend waren. Als Proxy-Daten dienten hier die Unterkante der miozänen Braunkohle-Schichten. Für den Braunkohlenabbau musste die Grundwasseroberfläche einige Meter unter diese

Sohle abgesenkt werden. Die „prognostische“ Berechnung löste diese Aufgabe durch eine besondere Art der Kalibrierung dieser Fördermengen auf die notwendigen Tiefen, die mit Hilfe des geologischen Modells ermittelt wurden. Als Ergebnis zeigt sich über die Zeit die für diese Region typische „Wanderung“ der Absenkungsbereiche rund um Bitterfeld. Im Transportmodell wirkt sich dies in einer starken räumlichen Verbreitung der eingetragenen Stoffe aus, wobei sich allerdings neben den jeweiligen Entnahmen auch die geologischen Besonderheiten, wie z.B. quartäre Rinnensysteme, abbilden.

7 Ausblick auf künftige Entwicklungen

Für die künftige Entwicklung von Modellierungssystemen ist davon auszugehen, dass vertikale Modellkopplungen von Teilen des Wasserkreislaufs – ob natürlich oder anthropogen – an Bedeutung gewinnen werden. In einigen Modellierungssystemen zeichnen sich die Ansätze für diese Entwicklungen bereits ab, andere arbeiten noch an der Perfektionierung des Modellierungsansatzes für das betrachtete Kompartiment. Ob für die Softwareentwicklung die direkte Integration in bestehende Modellierungssysteme oder weitere Modularisierung bevorzugt wird, ist dabei von untergeordneter Bedeutung und letztlich von der Entwicklung der Computerressourcen und den Anforderungsprofilen des Nutzerkreises abhängig. Die Entwicklung gekoppelter Systeme kann in einer zunehmenden Komplexität der Modellierungssysteme und stark erhöhten Anforderungen an die Grundlagendaten bestehen, aber auch problem- und datenadäquate und flexible Lösungen bieten.

Die Entwicklung der geologischen Modellierungssysteme profitiert sehr von den besseren Visualisierungsmöglichkeiten, die durch Neuentwicklungen, z.B. im Bereich der 3D-Visualisierungen, ergänzt werden. Es besteht jedoch aus Sicht der statistischen und der konstruktiven Verfahren die dringende Notwendigkeit, nicht nur Visualisierungsmöglichkeiten, sondern auch adäquate Interaktionsmöglichkeiten zu schaffen. Die bisherigen Schwierigkeiten beim Datenaustausch zwischen den hochspezialisierten Software-Werkzeugen der geologischen Modellierung und der Visualisierungen in Caves oder durch spezielle 3D-Bildschirme wird sicher das wesentlich kleinere und schnell zu lösende Problem sein. Interaktion bedeutet jedoch die gleichzeitige Darstellung und Veränderungsmöglichkeit für die ausgearbeiteten Modelle. Zusätzlich ist die Datenlage für die Erstellung hoch auflösender Modelle derzeit schlecht. Die Staatlichen Geologischen Dienste (SGD) müssen hier mit den entsprechenden Kompetenzen und Informationen versehen werden, um die Datenqualität und –quantität zu erhöhen.

Für die künftige Entwicklung von hydrogeologischen Modellierungssystemen ist davon auszugehen, dass die numerischen Lösungen für die gesättigte und die ungesättigte Zone aufgrund weiter steigender Rechnerkapazitäten mit weiter steigenden Auflösungen und für immer größere Einsatzgebiete eingesetzt werden. Die Notwendigkeit, Grundwasserströmung und -transport im regionalen Maßstab zu modellieren, wird hierdurch erleichtert. Diese Entwicklungslinie wird behindert durch den Mangel an zuverlässigen räumlich hoch auflösenden Grundlagendaten für die Parameterisierung. Die bestehende räumliche Auflösung von etwa einer Bohrung pro km² kann für regionale Modelle, die lokal verdichtet werden, nicht als ausreichend angesehen werden. Zudem müssen zuverlässige Methoden für die hydrogeologische Parameterbestimmung häufiger eingesetzt werden. Dies betrifft insbesondere auch die Transportmodellierung, deren Parameter sehr schwer zu erheben sind.

Bei der Sickerwassermodellierung und teilweise bei der Modellierung der ungesättigten Zone zeigt sich ein völlig anderes Bild: Hier spielen in Zukunft wahrscheinlich nicht die Modellierungstechniken die entscheidende Rolle, wobei hier die bestehenden Verfahren, neben der bereits heute häufig durchgeführten Kontrolle über andere Modellierungswerkzeuge, zu einem bevorzugten Verfahren zusammengeführt werden müssten. Das künftige Problem wird vielmehr in der Bereitstellung adäquater Daten bestehen, wobei nicht die Datenmenge oder –qualität maßgeblich sind, sondern die zeitlich und räumlich hoch auflösende Erfassung zusätzlicher Parameter, wie z.B. des Blattflächenindex, der Klimaparameter und der Parameter für die Wur-

zelzone. Anderenfalls wird die Modellierung bei empirischen Modellen der jährlichen steckenbleiben.

Aufgrund der aktuellen hydrologischen Entwicklungen mit Hochwässern und Trockenzeiten haben sich Datenlage und Messmethoden in der Hydrologie so rasch weiterentwickelt, dass hier mit den für die betrachteten Aufgabenstellungen notwendigen Daten auch in Zukunft zu rechnen ist. Die Modellierungsmethoden werden sich im Bereich der Einzugsgebietsmodellierung wahrscheinlich jedoch von statistischen Methoden zu numerischen Methoden, die das Systemverhalten physikalisch genauer wiedergeben, entwickeln. Die Zusammenführung der Daten im Zusammenhang mit der Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie wirkt sich hier bereits sehr positiv aus.

Für die umweltgeologische Modellierung sind die Entwicklungsperspektiven sehr breit gestreut anzusehen. Während die Modellierung von Gleichgewichtsreaktionen im Grundwasser und in der Wechselwirkung Grundwasser – Gestein sicher weiterentwickelt und auf eine quantitativ bessere Datenbasis gestellt werden müssen, sind einige Fragestellungen, wie z.B. im Bereich biologischer und ökologischer Rezeptoren, gar nicht modelltechnisch angegangen worden, weil die Methoden hierzu einfach fehlen.

Betrachtet man die verschiedenen Arten der Kopplungen der Modellierungssysteme, so zeichnen sich auch hier, wie bei den Modellierungssystemen selbst, deutliche Trends ab.

Horizontale Modellkopplungen werden durch neue Methoden und höhere Rechnerkapazitäten langfristig zunehmend überflüssig werden. Kurz- und mittelfristig werden sie bei einigen Werkzeugen jedoch notwendig sein, um den steigenden Bedarf an hochauflösenden Informationen decken zu können. Dies betrifft insbesondere die mit numerischen Methoden arbeitenden Modellierungssysteme der ungesättigten und gesättigten Zone. Geologische Modellierungssysteme werden diese Probleme eher nicht haben. Bei Sickerwassermodellierungssystemen wird die oben aufgezeigte Entwicklung neuer Methoden wahrscheinlich nicht schneller verlaufen als die der Rechnerkapazitäten.

Bei den vertikalen Modellkopplungen sind andere Entwicklungstendenzen absehbar. Für manche Modellierungswerkzeuge werden Strategien zur Integration weiterer Modellierungssysteme entwickelt. Einerseits wird dadurch die Nutzung weiterer aktueller wissenschaftlicher Methoden erleichtert, da sich der Nutzer über Austauschformate oder zusätzliche Parameterisierungen weniger Gedanken zu machen braucht. Andererseits werden gerade die integrierten vertikalen Kopplungen bei komplexen numerischen Modellen sehr schnell instabil. Die Verknüpfung verschiedener Modellierungssysteme wird in Zukunft durch die Verbesserung der Austauschdatenformate erleichtert. Eine zentrale Rolle werden, wie bisher, GIS einnehmen. Hinzu kommen aber auch Datenbanken. Die proprietären und undokumentierten Formate einiger kommerzieller Hersteller werden auch in Zukunft für diesen Zweck unbrauchbar sein. Insofern sind einige aktuelle Entwicklungen in den kommerziellen GIS nicht förderlich. In den OpenSource-Werkzeugen sind jedoch bereits jetzt sehr wesentliche Ansätze für offene und damit für die Schnittstellen leicht zu implementierende Formate zu finden.

Für viele Anwender ist der derzeitige Trend zur Implementation interner Schnittstellen in den Modellierungssystemen wahrscheinlich hilfreicher als die Integration neuer Modellierungssysteme. Einige Modellierungswerkzeuge sind in sich bereits modular und quelloffen aufgebaut und brauchen diese Art der Öffnung des Systems gar nicht.

Die Anwender können mit diesen Werkzeug-Schnittstellen die Kopplungsart besser selbst definieren und damit das Gesamtsystem problemadäquat anpassen. Während integrierte und iterative Kopplungen die Tendenz zu Instabilitäten zeigen, können bei kritischen Anwendungen über einfach zu nutzende Werkzeug-Schnittstellen die Anbindungen der stabileren sequentiellen oder periodisch-synchronen Kopplungen realisiert werden. Die angekoppelten Modellierungssysteme können auch vom Bearbeiter je nach Einsatzmöglichkeit, Datengrundlage, Vorkenntnissen, Verpflichtungen des Auftraggebers etc. selbst gewählt und eingesetzt werden.

Der verstärkte Einsatz gekoppelter Modellierung hat eine Reihe von arbeitstechnischen Konsequenzen, die auch nachteilig auf ihren Einsatz wirken. Sie werden im Folgenden kurz aufgezeigt:

- Der wissenschaftliche Anspruch an alle Nutzer gekoppelter Systeme ist höher als bei der Nutzung eines einzelnen Modellierungssystems. Da diese Modellierungssysteme komplex aufgebaut sind, werden in Zukunft die Vorstellungen einfacher, leicht zu bedienender prognostischer Werkzeuge nicht realisierbar sein. Das hat zur Folge, dass sich sowohl beim Modellaufbau als auch bei der Modellpflege immer häufiger Wissenschaftler-Teams und nicht mehr einzelne Mitarbeiter mit einem Gesamtmodell beschäftigen müssen. Prognoserechnungen werden wegen der komplexen Definition von Szenarien sehr viel mehr Wissen um die Verknüpfungen der Modellierungssysteme voraussetzen als dies bei „einfachen“ Modellierungssystemen der Fall ist.
- Die Datengrundlage wird immer mehr zum Nadelöhr prognostischer Berechnungen, weil die Parametervielfalt und die zeitliche und räumliche Auflösung der Parameter stark wachsen. In den meisten Fällen werden Fernerkundungsdaten und neue Erkundungsmethoden weiterhelfen, aber die Fragen der Datenspeicherung und ihrer Verarbeitung werden hinzukommen. Die schubweise Erweiterung von Speicher- und Rechenkapazität wird allerdings immer auch die Nutzung hochwertiger Technik bei der Hardware notwendig machen. Interessant für die periodisch-synchronen und z.T. die iterativen Kopplungen sind die Möglichkeiten des Parallelrechnens mehrerer Modellierungssysteme. Diese Chancen sollten in Zukunft bereits beim Entwurf oder bei den Verbesserungen bestehender Modellierungssysteme berücksichtigt werden.

Der Einsatz von vertikalen Modellkopplungen wird also in Zukunft zunehmen, wobei nicht nur die hier dargestellten Modellierungssysteme eine Rolle spielen werden, sondern auch Modellierungssysteme zu biologischen und technischen Prozessen. Ihr Einsatz wird gleichzeitig zunehmend von der Zusammenarbeit von Wissenschaftlern mehrerer Disziplinen abhängen, die in der Lage sind, mit unterschiedlichen Modellierungswerkzeugen und ihren Verknüpfungen wissenschaftlich wie technisch umzugehen.

8 Literatur

- ADAM, JA. (2003): Mathematics in Nature.- 360 S., Princeton (Princeton University Press).
- AKIN, H., SIEMENS, H. (1988): Praktische Geostatistik - Eine Einführung für den Bergbau und die Geowissenschaften.- 304 S., Berlin, Heidelberg (Springer).
- ANDERMAN, ER., HILL, MC. (2000): Modflow-2000, the U.S. Geological Survey Modular Groundwater Model - Documentation of the hydrogeologic-unit flow (HUF) package.- In: USGS [HRSG.]: USGS OFR, 1-89.
- ASCE (1998): Sustainability criteria for water resource systems.- 253 S.
- BARDOSSY, A. (1993): Stochastische Modelle zur Beschreibung der raum-zeitlichen Variabilität des Niederschlags.- In: ANONYMUS [HRSG.]: Mitteilungen Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft Universität Karlsruhe, **44**: 153 S.
- BAUMANN, P. (2005): Modellierung und Analyse von 3D-Rasterdaten in Geodatenbanken.- In: COORS, V, ZIPF, A, [HRSG.]: 3D-Geoinformationssysteme: 115-140, Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).
- BAUMANN, P. (2005): Web-gestützte Analysetechniken für mehrdimensionale Georasterdatenbanken.- In: COORS, V, ZIPF, A, [HRSG.]: 3D-Geoinformationssysteme: 376-390, Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).
- BECKER-HAUMANN, R. (2005): Anwendungen der Geoinformatik für die hochauflösende 3D-Modellierung fluviatiler Terrassenkörper.- 330 S., 118 Abb., 21 Tab., Stuttgart (Nägele und Obermiller).
- BENDER, K. (2003): Grundwasserströmungsmodell für den Großraum Rhein-Neckar.- Grundwasser, **8**: 41-49.
- BERNARD, L. (2005): 3D-GIS und -Atmosphärenmodelle für die urbane und regionale Umweltplanung.- In: COORS, V, ZIPF, A, [HRSG.]: 3D-Geoinformationssysteme: 336-335, Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).
- BEVEN, K., KIRKBY, M. (1979): A physically based, variable contributing area model of basin hydrology.- Hydrol. Sci. Bull., **24**: 43-69.
- BLÖSCHL, G. (1996): Scale and scaling in hydrology.- In: GUTKNECHT, D, [HRSG.]: Wiener Mitteilungen Wasser Abwasser Gewässer, 132: 1-346; Wien.
- BLUMENSTEIN, O., SCHACHTZABEL, H., BARSCH, H., BORK, H-R., KÜPPERS, U. (2000): Grundlagen der Geoökologie.- 260 S., 65 Abb., Berlin Heidelberg (Springer).
- BOHNE, K., ROTH, C., LEIJ, FJ., VAN GENUCHTEN, MT. (1993): Rapid method for estimating the unsaturated hydraulic conductivity from infiltration measurements.- Soil Sci., **155**: 237-244;
- BOSEL, H. (1992): Simulation dynamischer Systeme.- 310 S., Braunschweig, Wiesbaden (Vieweg).
- BOSEL, H. (1994): Modellbildung und Simulation, Konzepte, Verfahren und Modelle zum Verhalten dynamischer Systeme.- 402 S., Braunschweig, Wiesbaden (Vieweg).
- BRASSEL, K-H., EDENHOFER, O., MÖHRING, M., MENTGES, E., TROITZSCH, KG. (1999): Soziale Dynamik und technische Innovation: Anforderungen an ein Simulationswerkzeug.- In: GRÜTZNER, R. , MÖHRING, M. [HRSG.]: Werkzeuge für die Modellie-

- rung und Simulation im Umweltbereich, 9. Workshop, Koblenz 1999. ASIM-Mitt., **62**: 17-31.
- BRÄUER, K. (2002): Chaos, Attraktoren und Fraktale.- 249 S., Berlin (Logos).
- BREDEHOEFT, JD. (2003): From models to performance assessment - the conceptualization problem.- *GroundWater*, **41**: 571-577.
- BRINKHOFF, T. (2005): Geodatenbanksysteme in Theorie und Praxis.- 466 S., Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).
- BRINKMANN, PJ., HEINL, M. (1986): Numerical groundwater model.- In: THORWEIHE, U, [HRSG.]: Impact of climatic variations on East Saharian groundwaters - modelling of large scale flow regimes.- *Berl Geow Abh*, **72**: 135-155; Berlin.
- BROCKS, W. (2001): Models in the Mechanics of Materials.- In: v. STORCH, H, FLÖSER, G. [HRSG.]: Models in Environmental Research, GKSS School of Environmental Research: 147-165; Berlin Heidelberg.
- BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P., LÜTKEMEIER, S. (2005): Coupled models for the hydrologic cycle.- 345 S., 92 Abb., 20 Tab., Berlin Heidelberg (Springer).
- BRONSTERT, A., CARRERA, J., LEAVESLEY, G., MÖLDERS, N. (2005): Scale issues.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 21-43; Berlin Heidelberg (Springer).
- BROY, M., STEINBRÜGGEN, R. (2004): Modellbildung in der Informatik.- 256 S., Berlin Heidelberg New York (Springer).
- BRUGGEMANN, GA. (1999): Analytical solutions of geohydrological problems.- 959 S., Amsterdam (Elsevier).
- BRÜGGEMANN, R., BÜCHERL, C., PUDENZ, S., STEINBERG, CEW. (1999): Application of the Concept of Partial Order on Comparative Evaluation of Environmental Chemicals.- *Acta hydrochimica et hydrobiologica*, **27**: 170-178;
- BUCHHOLZ, O. (2001): Hydrologische Modelle - Theorie der Modellbildung und Beschreibungssystematik.- In: KÖNGETER, J. [HRSG.]: Mitteilungen des Lehrstuhls und Instituts für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH Aachen, **122**: 1-300; Aachen.
- CARRERA, J., BAND, LE., BRONSTERT, A., KABAT, P., MÖLDERS, N. (2005): Non-linearities.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 97-114; Berlin Heidelberg New York (Springer).
- CARRERA, J., BASTIDAS, LA. (2005): Parameterisation of complex hydrological systems.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 123-144; Berlin Heidelberg New York (Springer).
- CARRERA, J., NEUMAN, SP. (1986): Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions.- *Water Resour Res*, **22**: 199-242;
- CHERKAUER, DS., ANSARI, S. (2005): Estimating ground water recharge from topography, hydrogeology and land cover.- *Ground Water*, **43**: 102-112;
- CHOWANIETZ, U., GOSSEL, W. (1997): Konzeption einer ressourcenschonenden Wasserbewirtschaftung für die Region Berlin - Teil 2: Klima, Boden und Grundwasser.- 109 S., Berlin (BUND Berlin).
- CHRISTAKOS, G., BOGAERT, P., SERRE, ML. (2001): Temporal GIS - Advanced functions for field-based applications.- 217 S., Berlin Heidelberg (Springer).

- CLAUSSEN, M. (2005): Simulation of Holocene climate change using climate-system models.- In: MACKAY, A., BATTARBEE, R., BIRKS, J. [HRSG.]: Global change in the Holocene: 422-434; New York.
- CLAUSSEN, M., GAYLER, V. (1997): The greening of the Sahara during the mid-Holocene: results of an interactive atmosphere-biome model.- *Glob Ecol Biogeog Lett*, **1997**: 369-377;
- CONOCO (1987): Geologic Map of Egypt, scale 1 : 500 000.- 1 S., unveröff., Bericht, UNESCO, Cairo.
- CSIRO (2004): Sedsim demonstration manual.- 22 S., 3 Abb., 27.12.06 (www.csiro.au/research/sfm.html).
- DAVIS, JC. (1986): Statistics and Data Analysis in Geology.- 646 S., New York (John Wiley & Sons).
- DAVIS, L. (1991): Handbook of genetic algorithms.- 384 S., New York (Van Nostrand, Reinhold).
- DEATON, ML., WINEBRAKE, JJ. (2000): Dynamic modeling of environmental systems.- 194 S., New York (Springer).
- DEUTSCH, CV., JOURNEL, AG. (1992): GSLIB Geostatistical Software Library and User's Guide.- 340 S., Oxford University Press.
- DEUTSCHER VERBAND FÜR WASSERWIRTSCHAFT UND KULTURBAU (1996): Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen.- 192 S; Bonn.
- DEUTSCHER WETTERDIENST DWD (2006): Tägliche Klimadaten der Station Bitterfeld 1947 - 1990.- unveröff., Mitteilung.
- DEUTSCHER WETTERDIENST DWD (2007): Tägliche Klimadaten der Station Schkeuditz.-
http://www.dwd.de/de/FundE/Klima/KLIS/daten/online/nat/index_standardformat.htm.- unveröff., Bericht.
- DIERSCH, H-J. (1984): Modellierung und numerische Simulation geohydrodynamischer Transportprozesse.- 267 S., Diss. Akademie der Wissenschaften der DDR, Berlin.
- DIERSCH, H-J. (1994): FEFLOW - physikalische Modellgrundlagen.- In: DIERSCH, H-J, KADEN, SO, MICHELS, I [HRSG.]: Fachtagung "Grafik-gestützte Grundwassermmodellierung", IWU-Schriftenreihe: 2-53; Berlin.
- DIERSCH, H-J. (2005): WASY software Feflow finite element subsurface flow & transport simulation system reference manual.- 292 S., Berlin (WASY).
- DIMRI, VP. (2005): Fractals in Geophysics and Seismology.- In: DIMRI, VP, [HRSG.]: Fractal Behaviour of the Earth System: 1-22; Berlin Heidelberg New York (Springer).
- DOHERTY, J. (1994): PEST model independent parameter estimation.- 279 S., (Watermark Numerical Computing).
- DÖLL, P., FOHRER, N. (1999): Modellierung von Wasser- und Stofftransport in großen Einzugsgebieten - Stand der Forschung und Perspektiven.- *HW*, **43/1999**: 191-196.
- DÖLL, P., KASPAR, F., ALCAMO, J. (1998): Wasserknappheit und globaler Wandel: Modellierung der weltweiten Wasserverfügbarkeit und Wassernutzung.- In: SCHROE-

- DER, JH, [HRSG.]: Terra nostra - Geo Berlin 98, Schriften der Alfred-Wegener-Stiftung: 60-61.
- DÖRHÖFER, G., JOSOPAIT, V. (1980): Eine Methode zur flächendifferenzierten Ermittlung der Grundwasserneubildungsrate.- Geol. Jb. C, **27**: 45-65.
- DORIGO, M., GAMBARDELLA, LM. (1997): Ant colonies for the traveling salesman problem.- BioSystems, **43**: 73-81.
- DYCK, S., BECKER, A., FLEMMING, G., GLUGLA, G., GOLF, W., GRÜNEWALD, U., GURTZ, J., KLUGE, C. (1980): Angewandte Hydrogeologie - Teil 2: Der Wasserhaushalt der Flußgebiete.- 680 S., Berlin (Verlag für Bauwesen).
- DYCK, S., GRÜNEWALD, U., HANSEL, N., KLUGE, C., LAUTERBACH, D. (1980): Angewandte Hydrogeologie - Teil 1: Berechnung und Regelung des Durchflusses der Flüsse.- 710 S., Berlin (Verlag für Bauwesen).
- EBRAHEEM, AM., GARAMON, HK., RIAD, S., WYCISK, P., SEIF EL NASR, AM. (2003): Numerical modelling of groundwater resource management options in the East Oweinat area, SW Egypt.- Env. Geol., **44**: 433-447.
- EBRAHEEM, AM., RIAD, S., WYCISK, P., SEIFELNASR, AM. (2004): A local-scale groundwater flow model for modelling ground-water resources management options in Dakhla Oasis, SW Egypt.- Hydrogeol. J., **12**: 714-722.
- EBRAHEEM, AM., RIAD, S., WYCISK, P., SEIF EL NASR, AM. (2002): Simulation of impact of present and future groundwater extraction from the non-replenished Nubian Sandstone Aquifer in southwest Egypt.- Env. Geol., **43**: 188-196.
- EDMUNDS, WM., WRIGHT, EP. (1979): Groundwater recharge and palaeoclimate in the Sirte and Kufra basins, Libya.- J. Hydrol., **40**: 215-241; Amsterdam.
- EIBMANN, ., MÜLLER, . (1978): Lithofazieskartenwerk Quartär 1 : 50 000, Blatt 2465 Bitterfeld.- 1 S., Berlin (ZGI).
- ENGLUND, E., SPARKS, A. (1988): GEO-EAS - Geostatistical Enviromental Assessment Software - user guide.- 120 S., Las Vegas (US-EPA).
- FABRITIUS, H. (2002): Entwicklung eines digitalen geologischen Raummodells im Raum Bitterfeld-Süd.- 126 S., unveröff., Diplomarbeit, Halle/Saale.
- FH-DGG, . (1999): Hydrogeologische Modelle: Ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros und Fachbehörden in der Grundwasserwirtschaft.- In: FH-DGG [HRSG.]: Hydrogeologische Modelle, Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft: 3-36; Hannover.
- FORNER, B., GOSSEL, W. (1996): Konzeption einer ressourcenschonenden Wasserbewirtschaftung für die Region Berlin - Teil 1: Geschichte einer Landschaft und ihres Wassers.- 85 S., 26 Abb., 1 Tab., Berlin (BUND Berlin).
- FRÖHLICH, K., LUO, J., SACHER, H. (1998): Kopplung von FEFLOW mit dem Gerinnehydraulikmodell JABRON.- In: DIERSCH, HJ, KADEN, SO, MICHELS, I [HRSG.]: Fachtagung "Grafik-gestützte Grundwassermodellierung", IWU-Schriftenreihe, 45-50; Berlin.
- FÜRST, J. (2004): GIS in Hydrologie und Wasserweirtschafft.- 336 S., Heidelberg (Wichmann Verlag).

- GLUGLA, G., GOLF, W. (1987): Wasserhaushalt und Grundwasserneubildung.- 104 S., unveröff., Internes Studienmaterial des postgrad. Studiums GW, TU Dresden, Dresden.
- GOMEZ-HERNANDES, JJ. (2006): Complexity.- *GroundWater*, **44**: 782-785;
- GOSSEL, W. (1999): Hydrogeologie und Grundwasserhaushalt anthropogen wenig beeinflusster Grundwassereinzugsgebiete in Berlin.- 170 S., 90 Abb., 18 Tab., Berlin (Selbstverlag FU Berlin).
- GOSSEL, W., EBRAHEEM, AM., WYCISK, P. (2004): A very large scale GIS-based groundwater flow model for the Nubian sandstone aquifer in Eastern Sahara.- *HJ*, **12/6**: 698-713.
- GOSSEL, W., HORNER, C., LUO, J., SCHOLTKA, M. (1998): Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportmodell Woxdorf.- In: DIERSCH, H.J., KADEN, S.O., MICHELS, I. [HRSG.]: Fachtagung Grafik-gestützte Grundwassermodellierung am 27. und 28. Mai 1998, IWU-Schriftenreihe: 165-178; Berlin.
- GOSSEL, W., KRAMPE, KDW., LANGKUTSCH, U., SCHWAMM, G. (2001): Complex groundwater monitoring in a military training area.- In: SEILER, KP, WOHNLICH, S, [HRSG.]: New Approches Characterizing Groundwater Flow, Proceedings of the XXXI International Association of Hydrogeologists Congress Munich / Germany/10-14 September 2001: 335-338; Lisse, Abingdon, Exton, Tokyo.
- GOSSEL, W., SEFELNASR., A., EBRAHEEM, A. & P. WYCISK (2006): Large scale recharge modeling in the arid area of the eastern Sahara.- In: Recharge systems for protecting and enhancing groundwater resources - Proceedings of the 5th International Symposium on Management of Aquifer Recharge, ISMAR5, Berlin, Germany, 11–16 June 2005, IHP-VI, Series on Groundwater No. 13, 877-882.
- GOSSEL, W., WYCISK, P. (2006): Berechnung der monatlichen Sickerwasserrate als Grundlage für die Berechnung der Grundwasserneubildung für ein regionales Grundwassermodell.- In: VOIGT, H-J, KAUFMANN-KNOKE, R, JAHNKE, C, [HRSG.]: Indikatoren im Grundwasser Kurzfassungen der Vorträge und Poster der Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGG 24.-28. Mai 2006 in Cottbus, Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft, 140; Hannover.
- GRÖGER, G., KOLBE, TH. (2005): Normen und Standards für 3D-Geodaten.- In: COORS, V, ZIPF, A, [HRSG.]: 3D-Geoinformationssysteme: 56-70, Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).
- GROSHONG, RH. (1999): 3-D Structural Geology.- 324 S., Berlin Heidelberg New York (Springer).
- GROSSMANN, J. (2006): Anwendung und Optimierung des TUB-BGR-Verfahrens zur Berechnung der Grundwasserneubildung.- *HW*, **50**: 178-183.
- GROTE, KRÜGER (1984): Hydrogeologisches Kartenwerk der Deutschen Demokratischen Republik, 1 : 50 000, Blatt 1106 3/4.- 1 S., unveröff., Berlin (ZGI).
- GUGLIELMO, G. (1991): 3D computer graphics in modeling pluton emplacement.- In: PFLUG, R, HARBAUGH, JW, [HRSG.]: Computer graphics in geology, Lecture notes in earth sciences: 171-186; Berlin Heidelberg (Springer).
- HAEFNER, F., BOY, S. (2003): Fast transport simulation with an adaptive grid refinement.- *Ground Water*, **41**: 273-279;

- HAUDE, W. (1952): Zur Möglichkeit nachträglicher Bestimmung der Wasserbeanspruchung durch die Luft und ihrer Nachprüfung anhand von Topfversuchen und Abflußmessungen.- Ber Dtsch Wetterd US-Zone, **32**: 27-34;
- HECHT, CA. (2004): Fractals and scale effects in fractured multilayered red beds.- In: KOLYMBAS, D, [HRSG.]: Fractals in geotechnical engineering - exploratory workshop Innsbruck, 2003, Advances in geotechnical engineering and tunnelling: 137-148; Berlin.
- HEINRICH, U. (1992): Zur Methodik der räumlichen Interpolation mit geostatistischen Verfahren: Untersuchungen zur Validität flächenhafter Schätzungen diskreter Messungen kontinuierlicher raumzeitlicher Prozesse.- 124 S., veröff., Bericht, Deutscher Universitäts Verlag, Wiesbaden.
- HELMERT (1984): Hydrogeologisches Kartenwerk der DDR 1 : 50000, Blatt 1106 1/2.- 1 S., unveröff., Berlin (ZGI).
- HERTER, M., KOOS, B. (2006): Java und GIS - Programmierung - Beispiele - Lösungen.- 318 S., Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).
- HESSE, KH., HISSENE, A., KHEIR, O., SCHNAECKER, E., SCHNEIDER, M., THORWEIHE, U. (1987): Hydrogeological investigations of the Nubian Aquifer System, Eastern Sahara.- In: KLITZSCH, E, SCHRANK, E, [HRSG.]: Research in Sudan, Somalia, Egypt and Kenya: Results of the special research project "Geoscientific problems in arid and semiarid areas", Berl. Geow. Abh A, 397-464; Berlin.
- HESSISCHES LANDESVERMESSUNGSAMT (1995): Topographische Karte 1 : 25 000, Blatt 4826 Eschwege.- 1 S., veröff., Wiesbaden.
- HILL, MC. (1998): Methods and guidelines for effective model calibration.- In: USGS [HRSG.]: U.S. Geological Survey Water-resources investigations report 98-4005, USGS OFR, 1-90.
- HILL, MC. (2006): The practical use of simplicity in developing ground water models.- Ground Water, **44**: 775-781;
- HOELZMANN, P., KEDING, B., BERKE, H., KRÖPELIN, S., KRUSE, H-J. (2001): Environmental change and archaeology: lake evolution and human occupation in the Eastern Sahara during the Holocene.- Palaeogeography, palaeoclimatology, palaeontology, **169**: 193-217; Amsterdam
- HOLZBECHER, E. (1996): Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie.- 211 S., Berlin Heidelberg (Springer).
- HOLZBECHER, E. (2005): The lake Dagow coupled model for groundwater and surface water.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 225-229; Berlin Heidelberg New York (Springer).
- HOLZBECHER, E., BONELL, M., BRONSTERT, A., VSILIEV, OF. (2005): Fluxes, compartments and ordering of feedbacks.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 76-97; Berlin Heidelberg New York (Springer).
- HÖRMANN, G. (2005): Simpel - Speichermodelle zum Bodenwasserhaushalt.- 55 S., www.hydrology.uni-kiel.de/simpel/ (10.05.2006).
- HOULDING, SW. (1994): 3D Geoscience modelling - computer techniques for geological characterization.- 308 S., Berlin Heidelberg (Springer).

- HSÜ, KJ. (1989): Physical principles of sedimentology.- 233 S., Berlin Heidelberg (Springer).
- HUBERT, T. (IN VORBEREITUNG): Vergleichende Untersuchungen verschiedener Ansätze zur geologischen 3D-Modellierung und ihre Auswirkung auf die numerische Grundwassermodellierung.- Diss., in Vorbereitung, Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg.
- HUBERT, T. (2005): Vergleichende 3D-Modellierung eines geologischen Strukturmodells am Beispiel einer industrie- und bergbaugeprägten Region - Bitterfeld.- 136 S., unveröff., Diplomarbeit, Halle/Saale.
- HUBWIESER, P., AIGLSTORFER, G. (2004): Fundamente der Informatik.- 276 S., München (Oldenbourg).
- HUTCHINSON, . (1995): Interpolation mean rainfall using thin plate smoothing splines.- Int J GIS, **9**: 385-403.
- HUTCHINSON, . (1998): Interpolation of rainfall data with thin plate smoothing splines II: Analysis of topographic dependence.- J Geog Inf Dec Anal, **2**: 168-185;
- ISAAKS, EH., SRIVASTAVA, RM. (1989): An introduction to applied geostatistics.- 561 S., New York (Oxford University Press).
- JACOBSHAGEN, V. (1993): Zur Geologie der Umgebung von Eschwege in Nordhessen.- Berl. Geow. Abh A, 1-49; Berlin.
- JANKIEWICZ, P., NEUMANN, J., DUIJNISVELD, WHM., WESSOLEK, G., WYCISK, P., HENNINGS, V. (2005): Abflusshöhe - Sickerwasserrate - Grundwasserneubildung - Drei Themen im Hydrologischen Atlas von Deutschland.- HW, **49**: 2-13.
- JOSOPAIT, V. (1996): Überlegungen zu Ziel und Inhalt von hydrogeologischen Gutachten für Wasserrechtsanträge bei Grundwasserentnahmen.- Grundwasser, **1**: 137-141.
- JOURNEL, AG., HUIJBREGTS, C. (1978): Mining Geostatistics.- 600 S., London (Academic press).
- KAISER, A. (2000): Die Modellierung zeitbezogener Daten.- 195 S., Berlin (Lang).
- KASTENS, U., KLEINE BÜNING, H. (2005): Modellierung.- 256 S., München (Hanser Verlag).
- KINZELBACH, W. (1986): Groundwater modelling - An Introduction with Sample Programs in Basic.- 368 S., Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo (Elsevier).
- KINZELBACH, W. (1987): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser.- In: ANONYMUS [HRSG.]: Schriftenreihe Wasser Abwasser, gwf, 317 S.; München (Oldenbourg).
- KLITZSCH, E. (1991): Die Grundwassersituation Nordostafrikas.- NatWiss, **78**: 59-63;
- KOLTERMANN, CE., GORELICK, SM. (1996): Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process-imitating and descriptive approaches.- Water Res.Res., **32**: 2617-2658.
- KORVIN, G. (1992): Fractal models in the earth sciences.- 396 S., Amsterdam (Elsevier).
- KUBATZKI, C., CLAUSSEN, M. (1998): Simulation of the global bio-geophysical interactions during the Last Glacial Maximum.- Climate Dynamics, **14**: 461-471.

- LÄHNE, R. (in Vorbereitung): Hydrodynamische Modellierung eines Talraum-Aquifers unter Berücksichtigung der Stofftransportdynamik.- Diss., in Vorbereitung, Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg.
- LÄHNE, R. (2003): Hydrodynamik des Talraums bei Eschwege (Nordhessen).- 77 S., unveröff., Diplomarbeit, Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg.
- LÄHNE, R., GOSSEL, W., WYCISK, P. (2006): Das geologische Modell als Grundlage für die Hydrogeologische Modellierung des Talraums Eschwege (Werra).- In: VOIGT, H-J, KAUFMANN-KNOKE, R, JAHNKE, C [HRSG.]: Indikatoren im Grundwasser, Schriftenreihe der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften: 148-148; Hannover.
- LEAVESLEY, G. (2005): Comparison of dynamically and statistically downscaled global atmospheric model output.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 37-40; Berlin Heidelberg New York (Springer).
- LEE, HJ., HARBAUGH, JW. (1991): Stanford's SEDSIM project: Dynamic three-dimensional simulation of geologic processes that affect clastic sediments.- In: PFLUG, R, HARBAUGH, JW, [HRSG.]: Computer graphics in geology, Lecture notes in earth sciences: 113-128; Berlin Heidelberg (Springer).
- LHW (2005): Tägliche Wasserstandswerte der Mulde am Pegel Priorau.- unveröff., Mitteilung vom 14.04.05, Halle(Saale).
- LUCKNER, L., SCHESTAKOW, W. (1986): Migrationsprozesse im Boden und Grundwasserbereich.- 372 S., Berlin (Verlag für Bauwesen).
- LUO, J. (1993): Konditionale Markovsimulation 2-dimensionaler geologischer Probleme.- Berl. Geow. Abh. Reihe D, 4, 3-103; Berlin.
- MALLET, J-L. (2002): Geomodeling.- 593 S., New York (Oxford University Press).
- MARCINKOWSKI, MÜLLER (1980): Lithofazieskartenwerk Quartär 1 : 50 000, Blatt 2365 Dessau.- 1 S., unveröff., Berlin (ZGI).
- MARSHALL, TJ., HOLMES, JW., ROSE, CW. (1996): Soil Physics.- 453 S., Cambridge (Cambridge University Press).
- MARTINEZ, PA. (1991): Three-dimensional simulation of littoral transport.- In: PFLUG, R, HARBAUGH, JW, [HRSG.]: Computer graphics in geology, Lecture notes in earth sciences: 129-142; Berlin Heidelberg (Springer).
- MCDONALD, MG., HARBAUGH, AW. (1988): A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model.- In: USGS [HRSG.]: USGS OFR 83-875, 528 S., Washington.
- MEADOWS, DH., MEADOWS, DL., RANDERS, J., BEHRENS, WW. (1972): Die Grenzen des Wachstums.- 510 S., Stuttgart (DVA).
- MEHL, S., HILL, MC., LEAKE, SA. (2006): Comparison of local grid refinement methods for MODFLOW.- GroundWater, 44: 792-796.
- MIDDLEMIS, H. (2001): Murray-Darling Basin Commission: Groundwater flow modeling guideline.- 133 S.
- MÖLDERS, N. (2005): Feedbacks at the hydrometeorological interface.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 192-214; Berlin Heidelberg New York (Springer).

- MÖLDERS, N. (2005): Upscaling example: Aggregation of evapotranspiration.- In: BRONSTERT, A., CARRERA, J., KABAT, P. [HRSG.]: Coupled models for the hydrologic cycle: 40-43; Berlin Heidelberg New York (Springer).
- MUIR WOOD, D. (2004): Geotechnical Modelling.- 488 S., London, New York (Spon Press).
- NASA (2005): Shuttle Radar Topography Mission data sets.- <http://www.jpl.nasa.gov/srtm>, (22.05.07).
- NEEF, O. (2002): Aspekte numerischer Modellierung in der Hydrogeologie am Beispiel einer industriell beeinflussten Bergbaufolgelandschaft im Mitteldeutschen Braunkohlerevier.- 75 S., unveröff., Dipl.-Arbeit, MLU Halle, Halle/Saale.
- NEUMANN, C., WYCISK, P. (2006): Untersuchungen zur Schadstoffaustragsdynamik aus regional kontaminierten Grundwasserleitern in lokale Vorfluter unter Berücksichtigung der klimatisch-hydrologischen Bezugsgrößen.- 115 S., unveröff., Bericht an das UFZ.
- NEUMANN, J. (2005): Flächendifferenzierte Grundwasserneubildung von Deutschland - Entwicklung und Anwendung des makroskaligen Verfahrens HAD-GWNeu.- 134 S., 44 Abb., 17 Tab., Halle (Saale).
- NEUMANN, J., WYCISK, P. (2003): Mittlere jährliche Grundwasserneubildung, Tafel 5.5.- In: ANONYMUS [HRSG.]: Hydrologischer Atlas Deutschland (HAD): 188-191; Bonn Berlin.
- NISWONGER, RG., PRUDIC, DE., REGAN, RS. (2006): Documentation of the Unsaturated-Zone Flow (UZF1) Package for modeling unsaturated flow between the land surface and the water table with MODFLOW-2005.- In: USGS [HRSG.]: U.S. Geological Techniques and Methods, **6/19**, 1-69.
- NORDLUND, U. (1999): FUZZIM: forward stratigraphical modeling made simple.- *Comp Geosc*, **25**: 449-456.
- OLSTHOORN, TN., KAMPS, PTWJ. (2006): Challenges to calibration: Facing an increasingly critical environment.- *Ground Water*, **44**: 876-879.
- PACHUR, H-J. (1999): Paläo-Environment und Drainagesysteme der Ostsahara im Spätpleistozän und Holozän.- In: DEUTSCHE FORSCHUNGSGEMEINSCHAFT [HRSG.]: Nordost-Afrika Strukturen und Ressourcen, (Wiley VCH).
- PACHUR, H-J., KRÖPELIN, S., HOELZMANN, P., GOSCHIN, M., ALTMANN, N. (1990): Late quaternary fluvio-lacustrine environments of Western Nubia.- In: KLITZSCH, E., SCHRANK, E, [HRSG.]: Research in Sudan, Somalia, Egypt and Kenya: Results of the special research project "Geoscientific problems in arid and semiarid areas", Berl. Geow. Abh A, 203-260; Berlin.
- PENMAN, HL. (1948): Natural evapotranspiration from open water, bare soil and grass.- *Proc Roy Meteorol Soc*, **A**: 120-145.
- PFÜTZNER, B. (1994): Gekoppelte flächen- und zeitdifferenzierte Abflußbildungsbe-rechnung und Grundwassermodellierung.- In: DIERSCH, H-J., KADEN, S.O., MICHELS, I. [HRSG.]: Fachtagung "Grafik-gestützte Grundwassermodellierung", IWU-Schriftenreihe, 153-163; Berlin.
- PFÜTZNER, B. (1994): Hydrologisches Vertikal-Prozeß-Modell SIWA.- 13 S., unveröff., Manuskript.

- PFÜTZNER, B., KADEN, S., KRONE, A., FLACKE, W. (1992): Flächendifferenzierte hydrologische Einzugsgebietsmodellierung bei Anwendung eines Geographischen Informationssystems.- Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen, **36/2**: 48-55.
- POHLERT, M., RUSKE, R., WEISS, H., GOSEL, W., WYCISK, P. (2004): Aufbau eines detaillierten digitalen dreidimensionalen geologischen Strukturmodells am SAFIRA-Standort Leuna.- In: SCHIEDEK, T., KAUFMANN-KNOKE, R., EBHARDT, G. [HRSG.]: Hydrogeologie regionaler Aquifersysteme, Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft: 163-163; Hannover.
- POHLERT, M., SCHLESIER, D., GOSEL, W., WYCISK, P. (2006): Konstruktion eines digitalen dreidimensionalen geologisch/hydrogeologischen Strukturmodells des Stadtgebietes Halle (Saale).- In: VOIGT, H-J., KAUFMANN-KNOKE, R., JAHNKE, C., [HRSG.]: Indikatoren im Grundwasser, Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft: 126; Hannover.
- POPPER, KR. (1994): Wissenschaftslehre in entwicklungstheoretischer und in logischer Sicht.- In: POPPER, KR., [HRSG.]: Alles Leben ist Problemlösen: 15-45; München Zürich (Piper).
- PRECHTEL, A., BITTERLICH, S., RADU, F., KNABNER, P. (2003): Natural Attenuation: hohe Anforderungen an die Modellsimulation.- Grundwasser, **11**: 217-225;
- REICK, CH. (2000): Was ist eine gute Prognose?.- In: WITTMANN, J., GNAUCK, A., PAGE, B. [HRSG.]: Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften, ASIM Mitteilungen: 97-110.
- RICHTER, R. (2003): Auswertung physiko-chemischer Messungen im Grundwasser unter den Aspekten der statistischen Charakterisierung und räumlichen Regionalisierung am Beispiel Bitterfeld-Wolfen.- 75 S., unveröff., Diplomarbeit, Halle.
- RICHTER, R., GOSEL, W., WYCISK, P., BÖHME, O., WEIß, H. (2004): Auswertung von Grundwasser-Temperaturdaten in einem großräumig kontaminierten Grundwasserleiter.- In: SCHIEDEK, T., KAUFMANN-KNOKE, R., EBHARDT, G. [HRSG.]: Hydrogeologie regionaler Aquifersysteme, Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft: 190-190; Hannover.
- ROBINSON, WA. (2001): Modeling dynamic climate systems.- In: RUTH, M., HANNON, B. [HRSG.]: Modeling dynamic climate systems, 1-210; New York.
- RONEN, D., SOREK, S. (2005): The unsaturated zone - a neglected component of nature.- In: NÜTZMANN, G., VIOTTI, P., AAGAARD, P. [HRSG.]: Reactive Transport in soil and groundwater: 3-16; Berlin Heidelberg (Springer).
- SAIERS, JE., GENEREUX, DP., BOLSTER, CH. (2004): Influence of calibration methodology on groundwater flow predictions.- GroundWater, **42**: 32-44;
- SCHAFMEISTER, M-T. (1998): Der Einsatz geostatistischer Simulationen in der Grundwassermodellierung.- Mathematische Geologie, **2**: 67-78.
- SCHAFMEISTER, M-T. (1999): Geostatistik für die hydrogeologische Praxis.- 172 S., Berlin Heidelberg (Springer).
- SCHAFMEISTER-SPIERLING, M-T. (1990): Geostatistische Simulationstechniken als Grundlagen der Modellierung von Grundwasserströmungen und Stofftransport in heterogenen Aquifersystemen.- 143 S., Diss., FU Berlin, Berlin.

- SCHLESIER, D. (2006): Geologische 3D-Kartierung des Stadgebietes Halle (Saale) - Multimediale Umsetzung und wissenschaftliche Visualisierung geologischer Daten.- 105 S., unveröff., Diplomarbeit und -kartierung, Halle (Saale).
- SCHMITT, M. (2001): Mathematical Morphology.- In: v. STORCH, H, , FLÖSER, , G, [HRSG.]: Models in Environmental Research, GKSS School of Environmental Research: 167-183; Berlin Heidelberg (Springer).
- SCHROEDER, M., WYRWICH, D. (1990): Eine in Nordrhein-Westfalen angewendete Methode zur flächendifferenzierten Ermittlung der Grundwasserneubildung.- DGM, **34**: 12-16;
- SCLATER, JG., CHRISTIE, PAF. (1980): Continental stretching: an explanation of the post-Mid-Cretaceous subsidence of the Central North Sea Basin.- Jour. Geophys. Res., **85**: 3711-3739;
- SCOUT SYSTEMS, . (1997): Dsat 2 Satellitenatlas für Deutschland.- (Topware).
- SEFELNASR, AM. (2007): Development of groundwater flow model for water resources management in the development areas of the western desert, Egypt.- 149 S., Diss. (in Vorbereitung), Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg.
- SEPPELT, R. (2003): Computer-based environmental management.- 284 S., Weinheim (Wiley-VCH).
- SIMUNEK, J., VAN GENUCHTEN, MT., SEJNA, M. (2005): The Hydrus-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat and multiple solutes in variably-saturated media.- 270 S., (Department of Environmental Sciences California).
- SOBISCH, HG. (2000): Ein digitales räumliches Modell des Quartärs der GK25 Blatt 3508 Nordhorn auf der Basis vernetzter Profilschnitte.- 113 S., 69 Abb., Aachen (Shaker Verlag).
- SOMMER-VON JARMERSTED, C. (1992): Hydraulische und hydrochemische Aspekte der Uferfiltration an der Unterhavel in Berlin.- Berl. Geow. Abh. A, 140, 149; Berlin.
- SYRING, KM., KERSEBAUM, KC. (1988): Simulation des 1-dimensionalen Wassertransports.- In: ANLAUF, R., KERSEBAUM, KC., YA PING, L. [HRSG.]: Modelle für Prozesse im Boden: 32-49.
- SZILAGYI, J., HARVEY, FE., AYERS, JF. (2003): Regional estimation of base recharge to ground water using water balance and a base flow index.- Ground Water, **41**: 504-513;
- THIEKEN, AH. (2001): Schadstoffmuster in der regionalen Grundwasserkontamination der mitteldeutschen Industrie- und Bergbauregion Bitterfeld-Wolfen.- 214 S., 49 Abb., 51 Tab., Diss., Martin-Luther Universität Halle (Saale).
- THIEM, G. (1922): Karte der Grundwassergleichen im Bereich der Tagebaue im Raum Bitterfeld.- 1 S., unveröff., Bericht.
- THIEM, G. (1952): Einwirkung des Braunkohlenabbaues im Bitterfelder Bezirk auf das Grundwasser.- WWT, **2**: 363-368;
- THOMSEN, A. (2005): Räumliche Operationen für geowissenschaftliche 3D-Datenbankmanagementsysteme.- In: COORS, V., ZIPF, A., [HRSG.]: 3D-Geoinformationssysteme: 71-98; Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).

- THOMSEN, A., BREUNIG, M., BÄR, W., CREMERS, AB., SIEHL, A. (2005): Datenbankunterstützung für geologische Anwendungen.- In: COORS, V., ZIPE, A., [HRSG.]: 3D-Geoinformationssysteme: 354-375; Heidelberg (Herbert Wichmann Verlag).
- THORNTHWAITE, CW. (1948): An approach toward rational classification of climate.- *Geograph Review*, **38**: 55-94;
- THÜRINGER LANDESVERMESSUNGSAMT (1997): Topographische Karte 1 : 25 000, Blatt 4726 Grebendorf.- 1 S.
- TIPPER, JC. (1991): Landforms developing and basins filling: Three-dimensional simulation of erosion, sediment transport, and deposition.- In: PFLUG, R, HARBAUGH, JW, [HRSG.]: Computer graphics in geology, Lecture notes in earth sciences: 155-170; Berlin Heidelberg (Springer).
- TURC, L. (1961): Evaluation des besoins en eau d'irrigation, evaporation potentielle, formule simplifiée et mise a jour.- *Ann agron*, **12**: 13-49;
- VALDES, PJ. (2005): An introduction to climate modelling og the holocene.- In: MAC-KAY, A., BATTARBEE, R., BIRKS, J. [HRSG.]: Global change in the holocene: 20-35; New York (Oxford University Press).
- VAN BERNEM, K-H. (2001): Conceptual Models for Ecology-Related Decisions.- In: v. STORCH, H, , FLÖSER, , G, [HRSG.]: Models in Environmental Research, GKSS School of Environmental Research: 127-146; Berlin Heidelberg (Springer).
- VAN DE GIESEN, N., MATA, L., DÖLL, P., HOEKSTRA, A., PFEFFER, M., RAMIREZ, JA. (2001): Modeling water availability: Scaling issues.- In: EHLERS, E., KRAFFT, T. [HRSG.]: Understanding the earth system Compartments, Processes and Interactions: 245-243; Berlin Heidelberg (Springer).
- VAN GENUCHTEN, MT. (1980): A closed form equation for predicting hydraulic conductivity of unsaturated soils.- *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **44**: 892-898;
- VAN GENUCHTEN, MT. (1985): A general approach for modeling solute transport in structured soils.- *Memoires Int. Assoc. Hydrogeol.*, **17**: 513-526;
- VON STORCH, H. (2001): Statistics - an Indispensable Tool in Dynamical Modeling.- In: v. STORCH, H, , FLÖSER, , G, [HRSG.]: Models in Environmental Research, GKSS School of Environmental Research: 203-217; Berlin Heidelberg (Springer).
- VORREYER, C. (1987): Grundwasserentnahmen und Naturhaushalt.- In: ANONYMUS [HRSG.]: Wasser, DVGW - Schriftenreihe, 15-20; Eschborn.
- WACKERNAGEL, H. (1995): Multivariate Geostatistics.- 256 S., Berlin, Heidelberg (Springer).
- WACKERNAGEL, H., SCHMITT, M. (2001): Statistical Interpolation Models.- In: v. STORCH, H, , FLÖSER, , G, [HRSG.]: Models in Environmental Research, GKSS School of Environmental Research: 185-201; Berlin Heidelberg (Springer).
- WANG, J., ENDRENY, TA., HASSETT, JM. (2006): Power function decay of hydraulic conductivity for a TOPMODEL-based infiltration routine.- *Hydrol. Process.*, **20**: 3825-3834;
- WEGEHENKEL, M., SELG, M. (2002): Räumlich hochauflösende Modellierung der Grundwasserneubildung im Neckartal bei Tübingen.- *Grundwasser*, **7**: 217-223;

- WEIß, H., SCHIRMER, M., TEUTSCH, G., MERKEL, P. (2002): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA) - 2. Projektüberblick und Pilotanlage.- Grundwasser, **3**: 135-139;
- WENDEBOURG, J., ULMER, JWD. (1991): Modeling compaction and isostatic compensation in SEDSIM for basin analysis and subsurface fluid flow.- In: PFLUG, R, HARBAUGH, JW, [HRSG.]: Computer graphics in geology, Lecture notes in earth sciences: 143-154; Berlin Heidelberg (Springer).
- WESSOLEK, G. (1989): Einsatz von Wasserhaushalts- und Photosynthesemodellen in der Ökosystemanalyse.- In: ANONYMUS [HRSG.]: Landschaftsentwicklung und Umweltforschung, 170 S.
- WESSOLEK, G., DUIJNISVELD, WHM., TRINKS, S. (2004): Ein neues Verfahren zur Berechnung der Sickerwasserrate aus dem Boden: das TUB-BGR-Verfahren.- In: BRONSTERT, A., THIEKEN, A., MERZ, B. [HRSG.]: Forum Hydr Wass, 135-145.
- WISCHMEIER, WH., SMITH, DD. (1978): Predicting rainfall erosion losses - A guide to conservation planning.- Washington DC (USDA).
- WOLLMANN, A. (2004): Geologische Bearbeitung einer ehemaligen Bergbau- und Industriefolgelandschaft Bitterfeld/Wolfen.- 227 S., unveröff., Diplomarbeit, Martin-Luther Universität Halle (Saale).
- WU, Q., XU, H., ZOU, X. (2005): An effective method for 3D geological modeling with multi-source data integration.- Comp. Geosci., **31**: 35-43;
- WYCISK, P. (1984): Faziesinterpretation eines kontinentalen Sedimentationstrogos (Mittlerer Buntsandstein/Hessische Senke).- Berl. Geow. Abh, 1-104; Berlin.
- 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.- In: ANONYMUS [HRSG.]: ConSoil Proceedings, 557-563; Gent.
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., RUSKE, R., WEIß, H. (2002): Das digitale geologische Strukturmodell Bitterfeld als neuer Baustein in der Sanierungsforschung.- Grundwasser, **7**: 165-171; Berlin, Heidelberg
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., THIEKEN, A., NEEF, O., SOMMERWERK, K., SCHNABEL, S. (2004): Analyse der Raumauswirkung mittels digitaler Raummodelle in der Sanierungsforschung - SAFIRA I Bitterfeld.- 34 S., unveröff., UFZ-Bericht 13/2004, BMBF, Halle/Saale.
- WYCISK, P., GOSSEL, W., WOLLMANN, A., FABRITIUS, H. & T. HUBERT (2006): High resolution digital 3D-models as a base of hydrodynamic calculation in heterogeneous aquifers.-In: Recharge systems for protecting and enhancing groundwater resources - Pro-ceedings of the 5th International Symposium on Management of Aquifer Recharge, ISMAR5, Berlin, Germany, 11–16 June 2005, IHP-VI, Series on Groundwater No. 13, 455-460.
- WYCISK, P., GRATHWOHL, P. (2005): Teilprojekt "Raumauswirkungen" "Beurteilung der Langzeitwirkung von verbleibenden Grundwasserbelastungen und ihre Auswirkungen auf die Schutzgüter und die Landnutzung im Raum Bitterfeld-Wolfen".- In: WEIß, H, [HRSG.]: Projektverbund SAFIRA Abschlussbericht Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen II Erarbeitung von standortbezogenen Lösungsansätzen zur Grundwassersanierung für den Raum Bitterfeld, BMBF-Forschungsvorhaben Förderkennzeichen 02WT0412: 315-516.

-
- WYCSIK, P., NEUMANN, C., FLECK, G., GOSSEL, W. (2004): Ermittlung räumlicher Risikobereiche und Auswirkungen auf die Landnutzung als Grundlage einer maßnahmeorientierten Schadensvorsorge im Bereich Bitterfeld / Wolfen - Risikobereiche und Landnutzung.- In: GELLER, W., OCKENFELD, K., BÖHME, M. [HRSG.]: Schadstoffbelastung nach dem Elbe-Hochwasser 2002 – Ad-hoc-Projekt Schadstoffuntersuchungen nach dem Hochwasser vom August 2002 zur Ermittlung der Gefährdungspotenziale an Elbe und Mulde: 362-381.

Curriculum Vitae

1 Persönliche Daten:

Dr. Wolfgang Gossel

Mühlweg 49

06114 Halle

Tel.: p.: 0345/6845846

d.: 0345/5526136

Geboren am 04.03.1963 in Bensberg (Rheinisch-Bergischer Kreis)

2 Beruflicher Werdegang:

- Seit 7/02 Wissenschaftlicher Assistent der Hydro- und Umweltgeologie
- 6/00 – 6/02 Wissenschaftlicher Angestellter der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Ref. B1.28 (Hydrogeologische Fachinformationssysteme)
- 3/92 – 5/00 Wissenschaftlicher Mitarbeiter bei der Gesellschaft für wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung mbH (WASY GmbH)
- 12/90 - 1/92 Projektingenieur bei der Firma Harbauer
- 8/90 - 11/90 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Geologie, Geochemie und Lagerstätten des Erdöls und der Kohle
- 2/90 - 3/90 Freier Mitarbeiter des Instituts für Umweltgeologie zur Erarbeitung eines Sanierungskonzeptes für das Industriegelände Konz/Stadtmitte
- 5/88 - 3/90 Studentische Hilfskraft am Lehrstuhl für Geologie, Geochemie und Lagerstätten des Erdöls und der Kohle
- 7/87 - 8/87 Angestellter beim Institut für Umweltgeologie
- 2/86 - 4/86 Betriebspraktikum beim Institut für Umweltgeologie
- 2/84 - 9/84 Aushilfstätigkeit an der Bundesstelle der Kath. Landjugendbewegung Deutschlands
- 10/82 - 1/84 Zivildienst an der Bundesstelle der Kath. Landjugendbewegung (KLJB) Deutschlands

3 Ausbildung

- 1/93 – 4/99 Nebenberufliche Dissertation an der Freien Universität Berlin, Fachgebiet Geowissenschaften, Fachrichtung Rohstoff- und Umweltgeologie, Gutachter: Prof. Dr. A. Pekdeger, Prof. Dr. M.-T. Schafmeister. Titel der Dissertation: „Hydrogeologie und Grundwasserhaushalt ausgewählter anthropogen wenig beeinflusster Grundwassereinzugsgebiete in Berlin“.

Tag der Disputation: 20.01.1999, Gesamtnote: sehr gut.

- 25.6.1990 Abschluß des Studiums der Geologie: Diplom; Gesamtnote: gut.
Thema der Diplomarbeit: „Hydrogeologische und hydrochemische Untersuchungen im Bereich des ehemaligen Industriegeländes Konz/Stadtmitte“, durchgeführt am Lehrstuhl für Ingenieurgeologie und Hydrogeologie der RWTH Aachen
- 10/86 - 6/90 Studium der Geologie an der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule (RWTH) Aachen.
- 22.7.1986 Vordiplom Geologie in Köln; Gesamtnote: gut.
- 10/84 - 7/86 Studium der Geologie an der Universität zu Köln
- 1982 Abitur; Gesamtnote: 1,7
- 1973 - 1982 Johann-Gottfried-Herder-Gymnasium in Köln-Buchheim
- 1969 - 1973 Grundschule in Köln-Brück

4 Ehrenamtliche Tätigkeiten

- seit 1998 Mitglied des Beirats der Berliner Wasserbetriebe
- seit 1995 Mitglied der FH-DGG, seit 2003 Mitglied des Arbeitskreis Ausbildung und Information, verantwortlich für die Zusammenstellung einer Übersicht der hydrogeologischen Lehrveranstaltungen in Deutschland
- 1992 - 2002 Mitglied des AK Wasser des BUND Berlin, Sprecher des AK von 1993 bis 2000
- 9/84 - 3/86 Diözesanvorsitzender der KLJB in der Diözese Köln
- 11/81 - 9/84 Kreisvorsitzender der KLJB im Oberbergischen Kreis

Halle,

Eidesstattliche Erklärung

Diese Habilitationsschrift wurde von mir selbständig und ohne fremde Hilfe verfasst. Es wurden ausschließlich die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet, die auch als solche kenntlich gemacht wurden.

Halle,