

## Ein Verfahren zur Optimierung bestehender Grundwasserstandsmessstellennetze erarbeitet am Beispiel des Leibnitzer Feldes (Steiermark, Österreich)

*A method for the optimization of existing quantitative groundwater monitoring  
networks worked out in the Leibnitzer Feld (Styria, Austria)*

J. FANK<sup>1)</sup> & K. FUCHS<sup>2)</sup>

### Inhalt

	Seite
1. Einleitung – Problemstellung und Zielsetzung .....	8
2. Natürliche Einflußgrößen auf das zeitliche Verhalten und die räumliche Ausformung des Grundwasserspiegels .....	8
3. Statistische Methoden zum Vergleich von Ganglinien mehrerer Meßstellen .....	10
3.1. Klassische Zeitreihenverfahren .....	10
3.1.1. ARIMA-Modelle.....	11
3.1.2. Nichtparametrisches Verfahren zur Trendanalyse.....	12
3.2. Clusteranalyse.....	12
3.3. Profilanalyse .....	13
3.4. Hauptkomponentenanalyse in Verbindung mit dem RV-Koeffizienten .....	14
3.5. Beurteilungskriterien für die Güte von Schätzung und Prognose.....	17
3.6. Vorgangsweise zur Auswahl charakteristischer Meßstellen.....	21
3.7. Optimierungsergebnisse für die zeitliche Komponente .....	22
4. Räumliche Datenanalyse.....	27
4.1. Allgemeine Grundlagen.....	27
4.2. Das Variogramm.....	27
4.2.1. Experimentelle Variogramme .....	27
4.2.2. Anpassen von Variogrammmodellen .....	29
4.3. Interpolationsverfahren.....	30
4.3.1. Triangulationsmethode.....	31
4.3.2. Inverse Distanzmethoden.....	31
4.3.3. Kriging .....	32
4.3.4. Vergleich der Interpolationsmethoden .....	33

<sup>1)</sup> Dr. J. FANK, Institut für Hydrogeologie und Geothermie, JOANNEUM RESEARCH Forschungsgesellschaft mbH, Elisabethstraße 16/II, A-8010 Graz.

<sup>2)</sup> Dipl. Ing. Dr. K. FUCHS, Institut für Angewandte Statistik und Systemanalyse, JOANNEUM RESEARCH Forschungsgesellschaft mbH, Steyrergasse 25a, A-8010 Graz.

4.4. Vorgangsweise bei der räumlichen Meßnetzoptimierung .....	34
4.5. Optimierungsergebnisse für die räumliche Komponente .....	35
4.5.1. Variographie im Untersuchungsgebiet .....	36
4.5.2. Interpolationsparameter .....	39
4.5.3. Das räumlich optimierte Meßnetz .....	42
5. Ergebnisse .....	50
Zusammenfassung .....	52
Literatur .....	52
Summary .....	54
Dank .....	54

## 1. Einleitung – Problemstellung und Zielsetzung

Die Optimierung der hydrologischen Meßnetze stellt für den Hydrographischen Dienst eine der zentralen Aufgaben sowohl im Hinblick auf die Qualität der Daten als auch im Hinblick auf einen effizienten und sparsamen Einsatz der finanziellen Mittel dar. Diese Aufgabe kann optimal nur in Verbindung von Kenntnis der Anforderungen, praktischer Erfahrung und Einsatz statistischer Verfahren bewältigt werden.

Die Auswahl charakteristischer Meßstellen für hydrographisch ähnliche Teilgebiete eines Grundwassergebietes nach hydrogeologischen und meßstellenspezifischen Kriterien ist zur raschen und hinreichend genauen, generellen Beschreibung der Grundwasserstandsverhältnisse erforderlich.

Durch die Kombination verschiedener Methoden zur Erarbeitung eines flächendeckenden einheitlichen Grundwasserstandsbeobachtungsnetzes für das systematische Grundwasser-Monitoring mit Zusatzinformationen zur Gewinnung von Detailkenntnissen aus den systematischen Aufzeichnungen (Fehlerwahrscheinlichkeit bei der flächenhaften Interpolation, Optimierung des Beobachtungsintervalls für die unterschiedlichen Meßstellen etc.) kann auf der Basis des vorgeschlagenen optimierten Meßstellennetzes mit einer Verringerung der Gesamtkosten aller Betreiber für die Grundwasserstandsbeobachtung gerechnet werden. Die Erfahrungen, die aus der Verknüpfung von geostatistischen, statistischen und hydrogeologischen Methoden bei der Optimierung von Meßstellennetzen im Leibnitzer Feld gewonnen werden, können bei der Anwendung in anderen Grundwassergebietes zu entscheidenden Verbesserungen in der Planung und Weiterentwicklung von Monitoringsystemen führen.

## 2. Natürliche Einflußgrößen auf das zeitliche Verhalten und die räumliche Ausformung des Grundwasserspiegels

Das raumzeitliche Verhalten des Grundwasserspiegels in einem freien Aquifer wird entscheidend von der Art, der Menge, der zeitlichen und räumlichen Verteilung der Grundwasserneubildung sowie der räumlichen Verteilung der Aquiferkennwerte im Untersuchungsgebiet gesteuert.

Der Hauptfaktor der Anreicherungsmechanismen des Grundwassers im Leibnitzer Feld ist die Erneuerung durch Infiltration von Niederschlägen über die Bodenzone

und die ungesättigten Deckschichten. Untergeordnet von Bedeutung sind daneben auch noch die Anreicherung über infiltrierende Oberflächenwässer, einerseits im Kontakt mit dem Grundwasserkörper, andererseits als Tropfkörper über ungesättigten Deckschichten.

Eine gewisse Bedeutung hat sicherlich auch die Grundwasserneubildung aus Hangzuflüssen vom Hinterland der quartären Schotterflächen. Aus den Randbereichen älterer Terrassen mit geringmächtigen Aquiferen infiltriert teilweise Grundwasser in die wärmzeitlichen Schotter. In Teilbereichen des Leibnitzer Feldes werden die quartären Würmschotter von verkarsteten Leithakalken unterlagert. In diesen Bereichen wurde auch eine geringfügige Grundwasseranreicherung durch aufsteigende Wässer nachgewiesen.

Zur Ermittlung von Menge und Verteilung der Grundwasserneubildung werden in der Literatur verschiedenste Methoden vorgestellt (ARBEITSKREIS GRUNDWASSERNEUBILDUNG DER FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE DER DEUTSCHEN GEOLOGISCHEN GESELLSCHAFT, 1977, J. FANK, 1992 etc.). Neben der Beschreibung der unterschiedlichen Methoden werden in allen Arbeiten auch Hinweise für Auswahlkriterien und Anwendung der Methoden zur flächenbezogenen Bestimmung der Grundwasserneubildungsrate angeboten. Generell wird empfohlen, nach Möglichkeit mehrere, voneinander unabhängige Verfahren einzusetzen. Detaillierte Literaturangaben verweisen auf eine große Anzahl von Detailarbeiten zur Methodenverfeinerung unter unterschiedlichen Randbedingungen.

Während über die Grundwassersysteme, die Grundwasserströmungsrichtungen und -geschwindigkeiten in den großen Grundwassergebieten Österreichs umfangreiche Untersuchungen vorliegen, werden die Neubildungsmechanismen über die wasserungesättigten Deckschichten erst seit wenigen Jahren unter Berücksichtigung der lokalen meteorologischen und hydrogeologischen Faktoren systematisch untersucht (H. P. NACHTNEBEL, 1994, J. FANK & T. HARUM, 1994).

Entscheidende Bedeutung für die räumlich-zeitliche Verteilung der Grundwasserneubildungsrate kommt dabei neben meteorologischen Faktoren der Ausformung und Verteilung der ungesättigten Deckschichten zu. Der Boden wirkt als hydrologisches Speicher-, Regler- und Verteilersystem, das nach Maßgabe seines Profilaufbaues, d. h. seiner horizontspezifischen Porenausstattung unter einem gegebenen Niederschlags- und Verdunstungsregime die Infiltrationsraten auf Speicherung, Evapotranspiration und Versickerung verteilt.

Im Aquiferbereich kommt der Kenntnis der räumlichen Verteilung von hydrogeologischen Kenngrößen als steuerndes Element der Grundwasserströmungsrichtung und -geschwindigkeit eine große Bedeutung zu. Zu diesen gehören neben anderen die flächenhafte Ausbildung des begrenzenden Grundwasserstauers, die Mächtigkeit des Grundwasserleiters und die räumliche Verteilung der Durchlässigkeitsbeiwerte bzw. der Transmissivitäten. Die Kenntnis des geologischen Aufbaues des Untersuchungsgebietes ist eine unabdingbare Voraussetzung für die hydrographische Beschreibung des Grundwassersystems.

Von großer Bedeutung für das räumliche und zeitliche Verhalten des Grundwasserkörpers sind auch wasserwirtschaftliche Maßnahmen wie der Betrieb von Grundwasserentnahmen oder -anreicherungen, die Errichtung oder der Betrieb von Wasserkraftwerken oder anderen Stauhaltungen an Oberflächengewässern im Untersuchungsgebiet.

Aus den vorgenannten Einflußgrößen auf die zeitliche Entwicklung der Grundwasserspiegelganglinie und die flächenhafte Ausformung des Grundwasserspiegels läßt

sich ableiten, daß im Zuge einer optimalen Strukturierung des Grundwasser-Monitoringsystems auch die hydrogeologischen Basisdaten des Aquifers in ihrer räumlichen Verteilung erfaßt werden müssen. Eine ausgezeichnete Basis für eine Meßnetzoptimierung bildet die Erstellung von Grundwasserströmungsmodellen, da im Zuge ihrer Erarbeitung die hydrogeologischen Grundlagen aufgearbeitet werden, um die Parameter des Modells ableiten zu können. Im Leibnitzer Feld wurde in den Jahren 1989 bis 1993 ein Grundwasserströmungsmodell erarbeitet (J. FANK et al., 1993), sodaß die Aquiferparameter flächendeckend zur Verfügung stehen.

### 3. Statistische Methoden zum Vergleich von Ganglinien mehrerer Meßstellen

Für die regionale Darstellung des zeitlichen Verlaufes des Grundwasserspiegels wurde ein Verfahren gesucht, nach dem jene Meßstellen zu ermitteln sind, die zur Charakterisierung des Verlaufes der Grundwasserspiegellage eines hydrographisch ähnlichen Teilgebietes unbedingt notwendig sind. Im folgenden werden vier aus der Literatur bekannte statistische Methodenkomplexe dargestellt, um zwei Fragestellungen, die sich im Zusammenhang mit der zeitlichen Optimierung ergeben, zu untersuchen:

- Wie lassen sich Ähnlichkeiten des zeitlichen Verlaufes des Grundwasserstandes mehrerer Meßstellen quantifizieren und
- wie lassen sich  $r$  Meßstellen ( $r \leq s$ ), die zur Charakterisierung des Verlaufes des Grundwasserspiegels eines Gebietes unbedingt notwendig sind, aus der Menge der  $s$  Meßstellen auswählen?

Bei der Darstellung der Methoden wird weniger ihre theoretische Grundlage als vielmehr ihr Wert zur Problemlösung diskutiert.

#### 3.1. Klassische Zeitreihenverfahren

Ein Großteil der statistischen Theorie beschäftigt sich mit Zufallsvariablen aus unabhängigen Beobachtungen. Diese Voraussetzung trifft allerdings auf Zeitreihen  $Y_t$  nicht zu, da eine Beobachtung zum Zeitpunkt  $t$  von den Zeitpunkten  $t - 1$ ,  $t - 2$ , ... abhängig ist. Das bedeutet, daß bei Zeitreihenanalysen, die zeitliche Anordnung der Meßwerte berücksichtigt werden muß. Häufig setzt sich eine Zeitreihe additiv aus vier Komponenten zusammen, nämlich aus der Trendkomponente  $T_t$ , der zyklischen Komponente  $Z_t$ , der saisonalen Komponente  $S_t$  und der irregulären Komponente  $R_t$ , die oft auch als „white noise“ bezeichnet wird:

$$Y_t = T_t + Z_t + S_t + R_t.$$

Ein wichtiges Hilfsmittel zur Beurteilung der Eigenschaften einer Zeitreihe ist die Autokorrelation (C. CHATFIELD, 1982). Man versteht darunter ein Maß für den Zusammenhang zwischen Beobachtungsdaten, die einen bestimmten zeitlichen Abstand zueinander haben, wobei dieses jeden beliebigen Wert im Intervall  $[-1;+1]$  annehmen kann. So ist die Autokorrelation zum sogenannten lag (Zeitverschiebung) 1 ein Maß für den Zusammenhang von  $y_t$  und  $y_{t+1}$  ( $t = 1, 2, \dots, n - 1$ ), die zum lag 2 ein Maß für den Zusammenhang  $y_t$  und  $y_{t+2}$  ( $t = 1, 2, \dots, n - 2$ ) usw. Die Autokorrelation zum lag  $k = 1, 2, \dots, n - 1$  wird definiert als

$$\gamma_{(k)} = \frac{\sum_{t=1}^{n-k} (y_t - \bar{y})(y_{t+k} - \bar{y})}{\sum_{t=1}^n (y_t - \bar{y})^2} = \gamma_{(-k)}$$

wobei für  $k = 0$  gilt:  $\gamma_{(0)} = 1$ .

### 3.1.1. ARIMA-Modelle

Die bekanntesten Verfahren der klassischen Zeitreihenanalyse sind die sogenannten selbsterklärenden Zeitreihenmodelle oder ARIMA-Modelle. Sie verbinden folgende drei Prozeßtypen (vgl. G. E. P. BOX & G. M. JENKINS, 1976):

- Autoregressiver Prozeß (AR): Der Meßwert  $y_t$  wird als lineare Funktion seiner  $p$  Vorgänger dargestellt.

$$Y_t = \phi_1 Y_{t-1} + \phi_2 Y_{t-2} + \dots + \phi_p Y_{t-p} + \varepsilon_t$$

mit  $\varepsilon_t$  als white noise-Prozeß.

- Moving Average (MA): Die Zeitreihe wird als gewogenes, gleitendes Mittel der Ordnung  $q$  eines white noise-Prozesses  $\varepsilon_t$  dargestellt.

$$Y_t = \varepsilon_t + \theta_1 \varepsilon_{t-1} + \theta_2 \varepsilon_{t-2} + \dots + \theta_q \varepsilon_{t-q}$$

- Integrationsfilter (I): Mit Hilfe dieses Filters (z. B. Differenzenbildung) kann eine eventuell vorhandene Instationarität der Zeitreihe beseitigt werden. Für einen ARIMA( $p, d, q$ )-Prozeß der Ordnung  $p = d = q = 1$  ergibt sich somit die Darstellung

$$\nabla Y_t = Y_t - Y_{t-1} = \phi_1 \nabla Y_{t-1} + \varepsilon_t + \theta_1 \varepsilon_{t-1} = \phi_1 Y_{t-1} + \phi_1 Y_{t-2} + \varepsilon_t + \theta_1 \varepsilon_{t-1}$$

Um ARIMA-Modelle zum Erkennen ähnlicher zeitlicher Verläufe von Meßstellen verwenden zu können (Fragestellung 1), müssen diese zuerst an jede der  $s$  Meßstellen angepaßt werden. Dabei sei hier nur auf die Probleme bezüglich der Stationarität, der Bestimmung der Ordnung  $p$  des AR- bzw. Ordnung  $q$  des MA-Prozesses oder der Anpassungsgüte, die sich bei solchen Modellanpassungen ergeben, hingewiesen. Es darf nicht außer acht gelassen werden, daß sich in der Praxis üblicherweise nur an einen Teil der Ganglinien ARIMA-Modelle anpassen lassen. Unter der theoretischen Annahme, daß es gelingt, an alle  $s$  Zeitreihen ein ARIMA-Modell anzupassen, kann mit Hilfe einer von G. A. SEBER & C. J. WILD (1989) vorgeschlagenen Teststatistik ermittelt werden, ob sich die Parameter der  $s$  ARIMA-Modelle signifikant voneinander unterscheiden, womit sich eine Art Gruppierung ergibt.

Der Versuch der ARIMA-Modellierung ist bei den vorliegenden Grundwasserstandsdaten gescheitert, da die starken Instationaritäten der einzelnen Zeitreihen, hervorgerufen durch zyklische Schwankungen ungleicher Frequenz, nicht beseitigt werden konnten. „Im vorliegenden Fall von stark klima- bzw. witterungsabhängigen (Schneeschnmelze, Niederschlagsmenge usw.) Daten haben die Schwankungen der wöchentlichen Werte keine Periode gleichbleibender Länge, was bewirkt, daß die differenzierte Zeitreihe keinen glatteren Verlauf hat, als die Originaldaten“ (J. FANK et al., 1993). Die Beseitigung der Instationaritäten ist aber, wie bereits oben angedeutet, eine Voraussetzung für die ARIMA-Modellierung. Die Jahresgänge der Grundwasserstandsdaten repräsentieren zwar eine Art von Zyklus, der sich aber aufgrund des sehr kleinen Beobachtungsintervalls (eine Woche) in verschiedenen Jahren an voneinander abweichenden Zeitpunkten zeigt.

Ein weiterer Nachteil der ARIMA-Modellierung in Zusammenhang mit Fragestellung I ist die Nichteindeutigkeit der Ergebnisse, die an einem Beispiel erläutert werden soll: Ausgehend von der Annahme, daß an die Ganglinie A ein Modell der Ordnung (1,1,0) angepaßt wurde, kann mit der oben angeführten Teststatistik getestet werden, ob eine Ganglinie B derselben Ordnung dieselben Koeffizienten hat oder nicht. Um zu testen, ob die Koeffizienten der Ganglinie A mit den Koeffizienten der Ganglinie B übereinstimmen, muß an diese ebenfalls ein (1,1,0)-Prozeß angepaßt werden. Es gibt aber bei der ARIMA-Modellierung kein allgemein gültiges Kriterium, um zu entscheiden, ob für die Ganglinie B das (1,1,0)-Modell wirklich das optimale ist, oder ob es nicht besser wäre, einen z. B. (1,0,1)-Prozeß anzupassen, der sich für den Vergleich mit Ganglinie C eignen würde.

Zusammenfassend muß festgehalten werden, daß es aufgrund der vorliegenden Datenstruktur (zyklische Schwankungen ungleicher Frequenz) der einzelnen Meßstellen nicht möglich ist, die Zeitreihen mittels eines ARIMA-Ansatzes zu modellieren. Aber auch wenn es möglich gewesen wäre, scheint diese Vorgehensweise zur Beantwortung der ersten Fragestellung (Gruppierung von Meßstellen) nicht sinnvoll, da der Prozeß der ARIMA-Modellierung in bezug auf obige Fragestellung zu nicht eindeutigen Ergebnissen führt.

### 3.1.2. Nichtparametrisches Verfahren zur Trendanalyse

Diese von R. M. HIRSCH et al. (1982) bzw. von G. VAN BELLE & J. P. HUGHES (1984) vorgeschlagenen Verfahren dienen zum Testen der Hypothese, ob die Trendkomponenten  $T_t$  mehrerer Meßstellen homogen sind. Das bedeutet, daß hier mehrere Meßstellen bezüglich der Gleichläufigkeit von Trends im Verhalten der Ganglinien beurteilt werden können. In der Diktion von  $Y_t = T_t + Z_t + S_t + R_t$ , bedeutet dies die Möglichkeit, die Hypothese zu testen, ob die Trendkomponenten  $T_t$  mehrerer Zeitreihen voneinander verschieden sind, was aber nur z. T. dem primären Ziel der Klassifizierung von Zeitreihen entspricht, da bei diesem Test nichts über die sonstigen Komponenten gesagt wird.

Weiters setzten diese Verfahren voraus, daß die Daten der Messungen weitgehend unabhängig voneinander sein sollten. Da dies für hydrologische Daten aber in der Regel nicht zutrifft (wie bereits eingangs erwähnt wurde, sind diese in den meisten Fällen autokorreliert), schlugen die oben zitierten Autoren vor, die wöchentlichen Meßwerte zu Monats- oder Quartalswerten zu verdichten, um so die Unabhängigkeit zu erreichen. Ob durch diese Verdichtung, die ja einen Verlust an wertvoller Information darstellt, was ein weiterer Nachteil dieser nichtparametrischen Verfahren ist, wirklich die Unabhängigkeit aufeinanderfolgender Datenpunkte gewährleistet wird, sei somit in Frage gestellt.

### 3.2. Clusteranalyse

Die Clusteranalyse (vgl. z. B. M. R. ANDERBERG, 1973) ist ein Instrumentarium zum Aufdecken von Strukturen (im Sinne einer Klassenbildung) in einer Menge von Objekten und in dieser Hinsicht auch auf Grundwasserstandsdaten verschiedener Meßstellen anwendbar (vgl. H. K. MAHLER, 1986). Ziel der Clusteranalyse ist es, eine Menge von Objekten (Meßstellen), die durch mehrere Eigenschaften (in diesem Fall der Grundwasserspiegel zu verschiedenen Zeitpunkten) charakterisiert ist, so zu gruppieren, daß die Objekte in jeder Klasse bezüglich dieser Eigenschaften eine möglichst große Ähn-

lichkeit aufweisen und die verschiedenen Klassen einander unähnlich sind. Das bedeutet, daß mit Hilfe der Clusteranalyse herausgefunden werden kann, welche Ganglinien einen ähnlichen Verlauf haben.

Das Ergebnis einer Clusteranalyse soll nun kurz an einem Beispiel demonstriert werden. Dazu wurden 37 Meßstellen auf der Hoch- und Niederterrasse des nordöstlichen Leibnitzer Feldes gewählt, die alle im Zeitraum 24. 7. 1989 bis 11. 6. 1990 einmal wöchentlich beobachtet wurden. Als Clusteralgorithmus wurde die WARD-Methode und als Ähnlichkeitsmaß der PEARSON'sche Korrelationskoeffizient verwendet. Wäre die EUKLIDISCHE Distanz verwendet worden, wären Ganglinien, deren Verlauf zwar ähnlich ist, die sich aber bezüglich der Höhe der Grundwasserspiegellage unterscheiden, in verschiedene Cluster gekommen. Dies stünde aber im Widerspruch zur Fragestellung 1, wo nur nach Ganglinien ähnlichen Verlaufes unabhängig von der Höhe gesucht wird. In Tab. 1 ist eine Clusterlösung mit fünf Clustern dargestellt.

Die Clusteranalyse liefert keine direkte zweidimensionale graphische Darstellung der Lösung. Eine Möglichkeit der Visualisierung besteht aber darin, die Clusterzugehörigkeit auf die GAUSS-KRÜGER-Koordinaten der einzelnen Meßpunkte zu projizieren.

Tab. 1: Ergebnisse der Clusteranalyse mit fünf Clustern.  
Results of the cluster analysis with five clusters.

Meßstellen	Cluster
B642, BVI, G5, HART15, 37618, 3765, 37652, 3769, 37695, 37711, N2, N3, N4, N5, SG1, SO21, X, ZB1	1
B678, B686, B711, B736, B745, B962, B969, B999, 3761, 37631	2
BX, 3783, 3789	3
37931	4
3773, 3785, N7, N8, N9	5

Durch die bisherige Vorgangsweise konnte zwar Fragestellung 1 beantwortet werden, doch steht bei der Clusteranalyse kein objektives Entscheidungskriterium zur Verfügung, welche Meßstellen je Cluster zur Charakterisierung des Grundwasserspiegels eines Gebietes notwendig sind (Fragestellung 2). Es könnte zwar durch „trial and error“ versucht werden, Meßstellen aus den einzelnen Clustern wegzulassen, um mit einer reduzierten Meßpunktmenge dieselbe Clustereinteilung wieder zu erhalten. Es gibt jedoch kein Kriterium, um zu entscheiden, ob das reduzierte Meßnetz ebenfalls repräsentativ zur Charakterisierung des Grundwasserstandes eines Gebietes ist. Anders ausgedrückt gibt es im Rahmen der Clusteranalyse keine Möglichkeit, den Verlust an Repräsentativität bei Reduktion des Meßnetzes zu quantifizieren.

### 3.3. Profilanalyse

Die Profilanalyse (vgl. J. HARTUNG & B. ELPELT, 1986) als Anwendungsmöglichkeit eines multivariaten linearen Modells ist ein Instrumentarium zur Untersuchung von Wachstums- und Verlaufskurven. Werden die Grundwasserbeobachtungen der einzelnen Meßstellen als Beobachtungen eines Merkmales an einem Objekt zu  $p$  verschiedenen Zeitpunkten angesehen, so erlaubt es die Profilanalyse, die mittleren Verlaufskurven verschiedener Gruppen (Faktorstufen) von Meßstellen auf Parallelität zu

testen. Dabei muß die Anzahl der Objekte pro Faktorstufe  $> 1$  sein. Das bedeutet, daß die Profilanalyse nur angewandt werden kann, wenn bereits Gruppen von Ganglinien vorliegen und getestet werden soll, ob die mittleren Verlaufskurven verschiedener Gruppen parallel verlaufen oder nicht. Die Profilanalyse könnte z. B. angewandt werden, um zu testen, ob die mittleren Verlaufskurven der fünf in Tab. 1 extrahierten Cluster parallel laufen bzw. um zu sehen, welche nicht parallel verlaufen.

### 3.4. Hauptkomponentenanalyse in Verbindung mit dem RV-Koeffizienten

Die Hauptkomponentenanalyse (vgl. z. B. B. FLURY & H. RIEDWYL, 1983) wurde als Standardverfahren zur Charakterisierung von Grundwassergebieten schon in einigen Anwendungen (vgl. J. E. DREHER et al., 1985, H. K. MAHLER, 1986) erprobt und dient zur Abgrenzung hydrographisch ähnlicher Bereiche bezüglich eines vorgegebenen Gesamtgebietes.

Mathematisch gesehen können mit Hilfe der Hauptkomponentenanalyse bei einem mehrdimensionalen Datensatz  $s$  korrelierte Variable (Meßstellen) durch eine kleinere Anzahl von neuen, unkorrelierten Variablen ersetzt werden, wobei die neuen Variablen durch eine lineare Transformation der ursprünglichen Variablen gebildet werden. Die neuen Variablen, die Hauptkomponenten oder Faktoren, entsprechen den Eigenvektoren der Korrelationsmatrix der ursprünglichen Variablen und geometrisch einer Drehung des Koordinatensystems im  $s$ -dimensionalen Raum, wobei die Koordinatenachsen senkrecht aufeinander stehen.

Wenn die ursprünglichen Variablen sehr hoch miteinander korreliert sind, kann es ausreichen, die ersten beiden Hauptkomponenten zu berechnen und die  $s$ -dimensionalen Beobachtungen so auf zwei Dimensionen zu reduzieren. Dies entspricht einer Projektion des  $s$ -dimensionalen Punkteschwarmes auf jene eine Ebene, in deren Koordinatenrichtungen die transformierten Beobachtungen die größte Variabilität besitzen. Diese Darstellung ist dann sinnvoll, wenn der Anteil der Varianz der ersten beiden Hauptkomponenten an der Gesamtvariabilität sehr groß (Faustregel 90 %) ist. Die Varianz einer Hauptkomponente entspricht dem Betrag des entsprechenden Eigenwertes der Korrelationsmatrix, wobei der betragsgrößte Eigenwert die erste Hauptkomponente, der zweitgrößte Eigenwert die zweite Hauptkomponente usw. bestimmt.

Es gibt somit neben der Clusteranalyse ein weiteres Verfahren zur Beantwortung von Fragestellung 1, wobei im Gegensatz zur Clusteranalyse die Lösung im Koordinatensystem der ersten beiden Faktoren mit ihren Faktorladungen (Eigenvektoren der Korrelationsmatrix) als Koordinaten zweidimensional dargestellt werden können. Diese Art der Darstellung hat aber den Nachteil, daß zwei Faktoren nur einen Teil der in den Meßstellendaten enthaltenen Information widerspiegeln. Aus diesem Grund kann zusätzlich noch die Q-Analyse (S. STEPHENSON, 1938), die als Hauptkomponentenanalyse der transponierten Beobachtungsmatrix aufgefaßt werden kann, durchgeführt werden, um durch eine Dimensionsreduktion der  $n$  Zeitpunkte eine zweidimensionale graphische Darstellung der  $s$  Meßstellen zu erhalten, die einen visuellen Eindruck von der Ähnlichkeit zwischen Meßstellen liefert. Dabei wird eine Reduktion des Raumes der  $n$  Zeitpunkte auf zwei fiktive, durch die ersten beiden Hauptkomponenten bestimmte, Zeitpunkte durchgeführt, die als Linearkombinationen aus allen Zeitpunkten errechnet werden. Bei der Q-Analyse ist im Vergleich zur üblichen Hauptkomponentenanalyse der Anteil der in den ersten beiden Hauptkomponenten enthaltenen Information bedeutend größer.



In Tab. 2 sind die Ergebnisse der Q-Analyse wieder für die 37 Meßstellen auf der Hoch- und Niederterrasse des nordöstlichen Leibnitzer Feldes für den Zeitraum 24. 7. 1989 bis 11. 6. 1990 dargestellt. Dabei bedeutet **Faktor** die Nummer der Hauptkomponente, **Eigenwert** den zur entsprechenden Hauptkomponente gehörigen Eigenwert der Korrelationsmatrix der Zeitpunkte, **Spur** den Anteil der entsprechenden Hauptkomponente an der Gesamtvariabilität aller Hauptkomponenten in Prozent und **Summe** die kumulierte Summe von **Spur**.

Tab. 2: Ergebnisse der Q-Analyse für den Zeitraum 24. 7. 1989 bis 11. 6. 1990 (voller Datensatz).  
Results of the Q-analysis for the period between 24. 7. 1989 and 11. 6. 1990 (full dataset).

Faktor	Eigenwert	Spur [%]	Summe [%]
1,000	46,699	99,359	99,359
2,000	0,208	0,443	99,802
3,000	0,045	0,096	99,898
4,000	0,015	0,032	99,930
5,000	0,014	0,030	99,959

Da die ersten beiden Hauptkomponenten (**Faktor**) mehr als 99,8 % der Gesamtvariabilität (**Summe**) erklären, können die 47-dimensionalen Beobachtungen auf die Ebene der ersten beiden Hauptkomponenten projiziert werden, quasi ohne an Information zu verlieren.

Die Fig. 1 zeigt die graphische Darstellung der Meßstellen in der Ebene der ersten beiden Hauptkomponenten, die einen ersten Rückschluß auf die Ähnlichkeit zwischen Meßstellen zuläßt.

Grundsätzlich läßt sich sagen, daß Meßstellen, die miteinander hoch korreliert sind (d. h. sich ähnlich sind), auch in der Ebene der ersten beiden Hauptkomponenten nahe beieinander liegen. Die Meßstellen 37931, 3783, 3789, BX liegen deutlich von den restlichen entfernt, leicht abgesetzt zeigen sich auch 3785, 3773, N7, N8 und N9. Dies entspricht auch den Ergebnissen der Clusterlösung von Tab. 1. Wäre in Tab. 1 eine 4-Clusterlösung dargestellt, so wären die Cluster 1 und 2 zu einem verschmolzen. In Fig. 1 ist die verschiedene Skalierung der x- bzw. y-Achse zu beachten. Auf der x-Achse ist der Wert der ersten Hauptkomponente aufgetragen, und somit ist beim Vergleich der Skalierungen der beiden Achsen zu ersehen, daß die erste Hauptkomponente einen größeren Einfluß ausübt.

Ohne hydrogeologische Vorkenntnisse, nur auf Basis von Grundwasserstandsdaten verschiedener Meßstellen, können durch die eben beschriebenen Verfahren Ähnlichkeiten zwischen Meßstellen erkannt werden (vgl. Fragestellung 1). Es entsteht wie bei der Clusteranalyse eine „Klasseneinteilung“ der vorhandenen Meßstellen, die aber nur mit Hilfe detaillierter hydrogeologischer Kenntnisse sinnvoll interpretiert werden kann. Es gibt auch hier kein statistisches Verfahren, um eine Teilmenge von Meßstellen auszuwählen, die zur Charakterisierung des Grundwasserverhaltens eines Gebietes minimal notwendig sind.

Allerdings gibt es mit dem RV-Koeffizienten (P. SCHLICH et al., 1987) ein Kriterium, um den Verlust an Repräsentativität zur Charakterisierung des Grundwasserstandes eines Gebietes, der bei einer Reduktion des Meßnetzes entsteht, zu quantifizieren (Fragestellung 2). Ist ein (vom Fachmann unterbreiteter) Reduktionsvorschlag von Meßstellen vorhanden, so kann mit Hilfe des RV-Koeffizienten die Ähnlichkeit zwischen

zwei Teilmengen von Variablen eines mehrdimensionalen Datensatzes gemessen werden:

$$RV_{(X, Y)} = \sqrt{\frac{\text{tr}\left(\frac{Y'X}{n} \cdot \frac{Y'X}{n}\right)}{\text{tr}\left(\frac{X'X}{n} \cdot \frac{X'X}{n}\right) \cdot \text{tr}\left(\frac{Y'Y}{n} \cdot \frac{Y'Y}{n}\right)}$$

mit

X: Datenmatrix mit s Variablen und n Beobachtungen,

Y: Datenmatrix mit r < s Variablen (im speziellen einer Teilmenge der Variablen von X) und n Beobachtungen,

X' bzw. Y': transponierte Datenmatrizen,

tr(X): Spur einer Matrix X.

Der RV-Koeffizient kann Werte zwischen 0 und 1 annehmen und als verallgemeinerter Korrelationskoeffizient zwischen den beiden Hauptkomponentenanalysen (volle und reduzierte Meßpunktzahl) betrachtet werden (d. h. je größer der RV-Koeffizient zwischen zwei Variablenmengen, desto ähnlicher sind die Ergebnisse der zu-

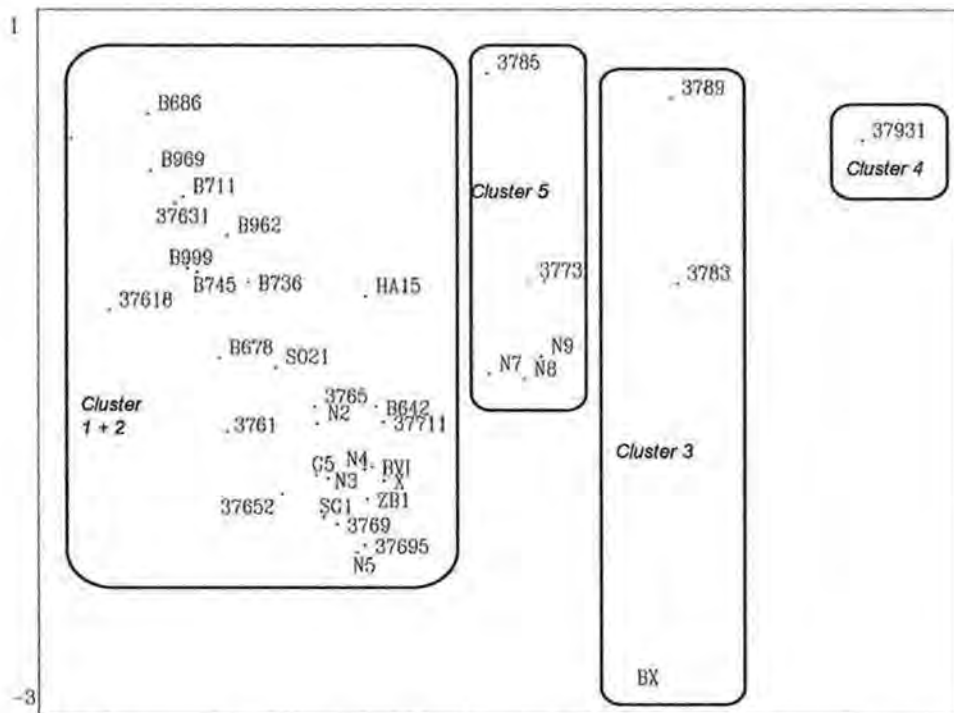


Fig. 1: Darstellung von 37 Meßstellen auf der Hoch- und Niederterrasse des nordöstlichen Leibnitzer Feldes in der Ebene der ersten beiden Hauptkomponenten für den Zeitraum 24. 7. 1989 bis 11. 6. 1990.

Graph of 37 groundwater observation points on the terraces of the northeastern Leibnitzer Feld. Main component level for the period between 24. 7. 1989 and 11. 6. 1990.

gehörigen Hauptkomponentenanalysen). Er liefert somit ein Maß zur Reduktion der Anzahl der Variablen.

Wird als reduzierter Datensatz jener betrachtet, bei dem die kurz beobachteten Meßstellen eliminiert wurden, so besteht er aus den 18 Meßstellen B678, B686, B711, B736, B745, B969, B999, 37931, 3789, 3785, 3783, 3773, 37695, 37711, 3769, 3765, 3761, 37631 (Fig. 1).

Der RV-Koeffizient zwischen der Beobachtungsmatrix aller 37 Meßstellen und der Matrix der 18 ausgewählten Meßstellen ist mit  $RV = 0,9879$  so hoch, daß die kurz beobachteten Meßstellen keine nennenswerte Bedeutung für die Charakterisierung des Grundwasserspiegels im Gebiet der Hoch- und Niederterrasse des nordöstlichen Leibnitzer Feldes für den Zeitraum 24. 7. 1989 bis 11. 6. 1990 (Tab. 3) haben.

Tab. 3: Ergebnisse der Q-Analyse für den Zeitraum 24. 7. 1989 bis 11. 6. 1990 (reduzierter Datensatz).  
Results of the Q-analysis for the period between 24. 7. 1989 and 11. 6. 1990 (reduced dataset).

Faktor	Eigenwert	Spur [%]	Summe [%]
1,000	46,856	99,694	99,694
2,000	0,124	0,264	99,958
3,000	0,011	0,023	99,980
4,000	0,004	0,009	99,989
5,000	0,002	0,004	99,993

### 3.5. Beurteilungskriterien für die Güte von Schätzung und Prognose

Als Maß zur Beurteilung der Güte der nach dem Optimierungsverfahren für die Charakterisierung von Teilgebieten ausgewählten Grundwassermessstellen wird versucht, alle in der Optimierung ausgeschiedenen Meßstellen durch die Meßdaten der verbliebenen Meßstellen zu schätzen. Da die weggelassenen Meßstellen aber in weiterer Folge nicht mehr oder nur mehr in einem eingeschränkten zeitlichen Raster beobachtet werden sollen, wird diese Schätzung aus vergangenen Meßdaten um die Prognose des Verlaufes der Grundwasserspiegelganglinie an den weggelassenen Meßstellen ergänzt.

Mathematisch gesehen bedeutet die Schätzung des Grundwasserspiegels zum Zeitpunkt  $t$  den Wert  $y$  einer weggelassenen Meßstelle als Funktion  $f$  der zum Zeitpunkt  $t$  verbliebenen Meßstellen  $x_1, x_2, \dots, x_n$  darzustellen:

$$y_t = f(x_{1t}, x_{2t}, \dots, x_{nt}) \quad t = 1, \dots, p.$$

Ein Standardansatz zur Lösung dieses Problems ist die Verwendung regressionsanalytischer Methoden. Das bekannteste Verfahren in diesem Zusammenhang ist die multiple, lineare Regression, für deren Anwendung allerdings fünf Voraussetzungen erfüllt sein müssen (D. G. KLEINBAUM et al., 1988). Eine dieser Voraussetzungen ist die Unabhängigkeit der  $y$  Werte, das bedeutet, daß die Werte  $y_t, t = 1, \dots, p$  von einander unabhängig sein müssen. In diesem Fall der Zeitreihen ist aber zu erwarten, daß der Wert  $y_t$  mit dem Wert zum Zeitpunkt  $y_{t-1}$  korreliert ist (Autokorrelation). Dies bedeutet aber, daß die Voraussetzung der Unabhängigkeit verletzt und somit das Modell der multiplen, linearen Regression nicht anwendbar ist. Wird diese Verletzung der Voraussetzung mißachtet, so entstehen Schätzer, die nicht die minimalste Schätzvarianz besitzen.

Eine Möglichkeit zu prüfen, ob die Unabhängigkeitsvoraussetzung angenommen werden kann, ist die Verwendung der DURBIN-WATSON-Statistik (J. DURBIN & G. S. WATSON, 1951), wobei eine Faustregel sagt, daß die Hypothese der zeitlichen Unabhängigkeit gilt, wenn die DURBIN-WATSON-Statistik bei etwa 2 liegt.

Im Falle von autokorrelierten Daten empfiehlt sich die Verwendung generalisierter Regressionsmethoden (N. DRAPER & H. SMITH, 1976). Werden nicht nur die weggelassenen Ganglinien mit Hilfe der verbliebenen Meßstellen geschätzt, sondern auch der zukünftige Verlauf prognostiziert, ist die Verwendung der ARIMA-Modelle geeigneter als Regressionsmethoden. Da aber der Verlauf einer Ganglinie nicht nur aus dem vergangenen Verhalten der Ganglinie geschätzt werden soll (selbsterklärendes Modell), sondern auch die Information der verbliebenen Meßstellen bei der Prognose verwendet werden sollen, werden diese Meßstellen als zusätzliche Größen in das Schätz- und Prognosemodell aufgenommen, was in der einschlägigen Fachliteratur (siehe z. B. B. ABRAHAM & J. LEODOLTER, 1983) unter dem englischen Begriff „transfer function model“ bekannt ist.

Das „transfer function model“ stellt somit eine Verbindung zwischen den ARIMA-Modellen und den Regressionsmodellen dar, indem es zur Schätzung eines Wertes an der Ganglinie Y zum Zeitpunkt t neben dem Wert der Ganglinie Y zum Zeitpunkt t - 1 auch die Werte der Ganglinien von räumlich entfernten Meßstellen verwendet. Sowohl der Einfluß des Autokorrelationsanteiles, als auch derjenige benachbarter Grundwassermeßstellen wird über Gewichtungsfaktoren in das Schätzverfahren einbezogen. Die Berechnung des Schätzwertes  $y_t$  erfolgt nach der Formel:

$$y_t = B_{\text{CONSTANT}} + \sum_{i=1}^n B_{\text{REGRESSOR}(i)} \cdot Y_{\text{REGRESSOR}(i)} + \frac{\Phi_z}{\Theta_z}$$

$$\Phi_z = 1 - B_{\text{MA1}} \cdot y_{t-1}$$

$$\Theta_z = 1 - B_{\text{AR1}} \cdot y_{t-1}$$

wobei B die Gewichtungsfunktionen aus dem Modell und CONSTANT, REGRESSOR, MA1 und AR1 die aus dem Modell ermittelten Regressoren darstellen.

Diese Art der Schätzung führt zu wesentlich besseren Ergebnissen als eine Schätzung nur über Regressionsmethoden, impliziert aber, daß auch frühere Meßwerte der zu schätzenden Meßstelle in das Modell einfließen, daß dieses Modell immer wieder überprüft werden sollte. Es wird daher vorgeschlagen, einen Teil der in den Optimierungsschritten eliminierten Meßstellen mit geringer Häufigkeit weiter zu beobachten, um Veränderungen an den Abhängigkeiten der Regressoren erkennen zu können. Diese Beobachtung soll mit den für das räumliche Verteilungsmodell notwendigen Stichtagsmessungen kombiniert werden, da zur Erstellung des räumlichen Modelles eine wesentlich höhere Meßstellendichte notwendig ist. Berechnungen mit Hilfe des „transfer function models“ unter Verwendung dieser Zusatzmessungen zeigen im Vergleich zu den Gewichtungsfaktoren aus früheren Modellrechnungen eine Änderung der Modellgrundlagen und damit die Notwendigkeit eines Modellupdates an.

Im folgenden werden die Kriterien für die Güte von Schätzung und Prognose am Beispiel der Meßstelle 3785 erläutert. In Tab. 4 ist der Output der Modellrechnung für die Meßstelle 3785 (Variable) angegeben, wobei als Transferfunktion die Meßstellen 37931 und 3773 (Regressors) verwendet wurden. Danach kommen einige Statistiken, die angeben, wie gut das Modell die Ganglinie schätzt, eine einfache Varianzanalysetabelle und die Modellvariablen. Bei den „goodness-of-fit“ Statistiken bezeichnet AIC das Akaike Informationskriterium und SBC das Schwarz Bayesian Kriterium. Ganz

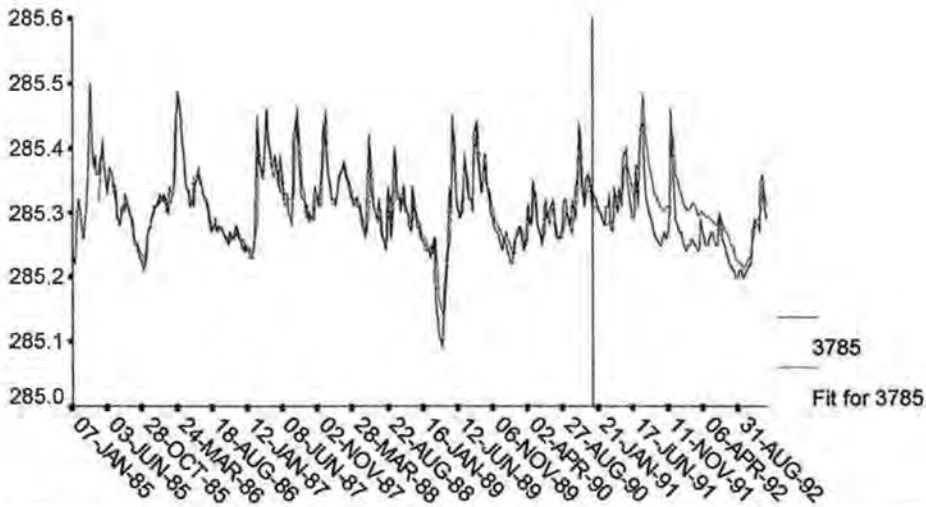
Tab. 4: Modellbeschreibung des „transfer function model“ für die Meßstelle 3785.  
Transfer function model for observation well 3785.

Variable:	3785			
Regressors:	37931, 3773			
Number of residuals:	297			
Standard error:	0,02739611			
Log likelihood:	648,60426			
AIC:	-1289,2085			
SBC:	-1274,4336			
ANALYSIS OF VARIANCE				
	DF	Adj. sum of squares	Residual variance	
Residuals:	293	0,22048847	0,00075055	
VARIABLES IN THE MODEL				
	B	SEB	T-RATIO	APPROX. PROB.
AR1:	0,73591	0,0403945	18,218145	0,00000000
37931:	0,09816	0,0205150	4,785017	0,00002277
3773:	0,09434	0,0136875	6,892709	0,00000000
CONSTANT:	231,21086	5,1811594	44,625314	0,00000000
Non seasonal differencing: 0				

allgemein gesprochen verwendet man das AIC für autoregressive Modelle, während das SBC ein generelles Kriterium ist. Man kann diese beiden Kriterien zum Vergleich mehrerer Modellvarianten verwenden, wobei gilt, daß jenes Modell mit dem kleinsten AIC bzw. SBC das beste ist. In der Varianzanalysentabelle ist unter anderem die Residualvarianz angegeben, die ebenfalls ein Maß für die Güte der Anpassung ist. Auch hier ist jenes Modell am besten, bei dem die Residuenvarianz am geringsten ist. Im Punkt „Variables in the model“ sind schließlich die Koeffizienten der Modellparameter angegeben. Das endgültige Modell setzt sich aus einem autoregressiven Prozeß erster Ordnung (AR1) und den Regressoren 37931 bzw. 3773 zusammen, wobei kein Integrationsfilter (Non seasonal differencing: 0) verwendet wurde. Das bedeutet, daß in diesem Fall ein ARIMA(1,0,0)-Modell verwendet wurde.

In Fig. 2 ist neben der beobachteten Ganglinie (3785) auch die über das Modell geschätzte (Fit for 3785) dargestellt. Um die Güte der Schätzung bzw. Prognose zu beurteilen, wurde der gesamte Zeitraum in den Schätzzeitraum, erstes Prognosejahr und zweites Prognosejahr aufgeteilt, um zu sehen, ob sich die Prognose im Laufe der Zeit im Vergleich zum Schätzzeitraum verschlechtert. Wird nun für jeden Zeitraum getrennt die Güte des Modells beurteilt, so besteht die Möglichkeit, sich das betragsmäßig größte Residuum (= beobachteter Wert der Ganglinie – geschätzter Wert der Ganglinie) zu berechnen, um zu erkennen, wie groß die maximale Abweichung zwischen beobachtetem und geschätztem Wert ist. Diese Vorgehensweise liefert dann aber ein falsches Bild von der Güte des Modells, wenn das betragsmäßig größte Residuum weit entfernt von den anderen Residuen liegt, d. h. einen Ausreißer darstellt. Aus diesem Grund wurde das 95 %-Quantil  $QR_{95}$  der betragsmäßig der Größe nach geordneten Residuen bestimmt. In Fig. 2 bedeutet  $QR_{95} = 0,06$  m für den Schätzzeitraum, daß 95 % aller Residuen  $< 0,06$  m sind. Oder anders ausgedrückt bedeutet dieses Ergebnis, daß in 95 % der Fälle der Schätzfehler  $< 0,06$  m ist.

Dieses Ergebnis scheint auf den ersten Blick außergewöhnlich, dennoch sollte diese Größe in Relation zur tatsächlichen Schwankungsbreite der Ganglinie gebracht werden, da es ein Unterschied ist, ob  $QR_{95} = 0,06$  m für eine Ganglinie mit einer maxima-



	getrimmte Streuung ( $S_e$ )	95 %-Quantil der Residuen ( $QR_{95}$ )	$QR_{95}/S_e$
Schätzzeitraum: 01. 01. 1985-31. 12. 1990	0,22 m	0,06 m	27,3 %
Prognosezeitraum 1: 01. 01. 1991-01. 12. 1991	0,18 m	0,08 m	44,4 %
Prognosezeitraum 2: 01. 01. 1992-31. 12. 1992	0,14 m	0,06 m	42,9 %

Fig. 2: Gemessene Grundwasserganglinie, deren Schätzung über die Transferfunktion für den Schätzzeitraum, die Prognose der Grundwasserganglinie für den Prognosezeitraum und statistische Kennwerte zur Beurteilung der Güte von Schätzung und Prognose.  
Measured groundwater hydrograph, estimation with the transfer function for estimation period, forecast of the hydrograph for the forecasting period and statistical values for the review of estimation and forecasting.

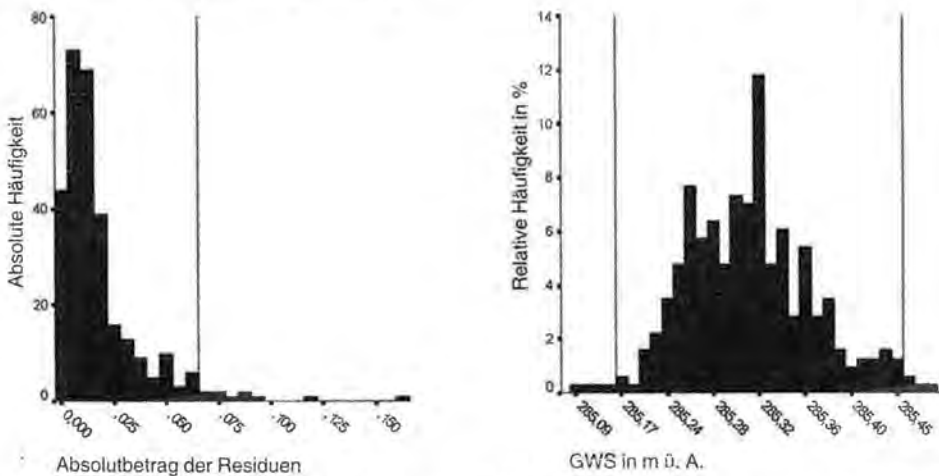


Fig. 3: Absolutbetrag der Residuen und getrimmte Verteilung der Grundwasserspiegellage für die Meßstelle 3785.  
Absolute values of the residua and trimmed distribution of the groundwater table on observation well 3785.

len Schwankung von 50 cm oder für eine Ganglinie mit 4 m Schwankungsbreite berechnet wurde. Um bei den beobachteten Werten dem Problem von Ausreißern zu entgehen, wurden am linken und rechten Rand der Verteilung der Grundwasserspiegel-lagen jeweils 2,5 % der Werte weggelassen, die Verteilung wurde also am linken und rechten Rand getrimmt (Fig. 3). Von den restlichen Werten wurde dann die getrimmte Streuung  $S_g$  (Maximum – Minimum) berechnet. Als Maß für die Güte des Modells in den drei Phasen Schätzzeitraum, Prognosejahr 1 und Prognosejahr 2 dient dann der Quotient aus  $QR_{95}/S_g$ .

### 3.6. Vorgangsweise zur Auswahl charakteristischer Meßstellen

Zur Beantwortung der Frage nach der Quantifizierbarkeit von Ähnlichkeiten des zeitlichen Verlaufes des Grundwasserstandes mehrerer Meßstellen und zur Frage der Reduktion auf jenes Minimum an Meßstellen, die zur Charakterisierung des Verlaufes des Grundwasserspiegels eines Teilgebietes unbedingt notwendig sind, wird folgende Vorgangsweise vorgeschlagen (siehe auch Fig. 4):

- a) Berechnung der Hauptkomponenten der transponierten Beobachtungsmatrix (Q-Analyse) für alle Meßstellen im betrachteten Zeitraum,

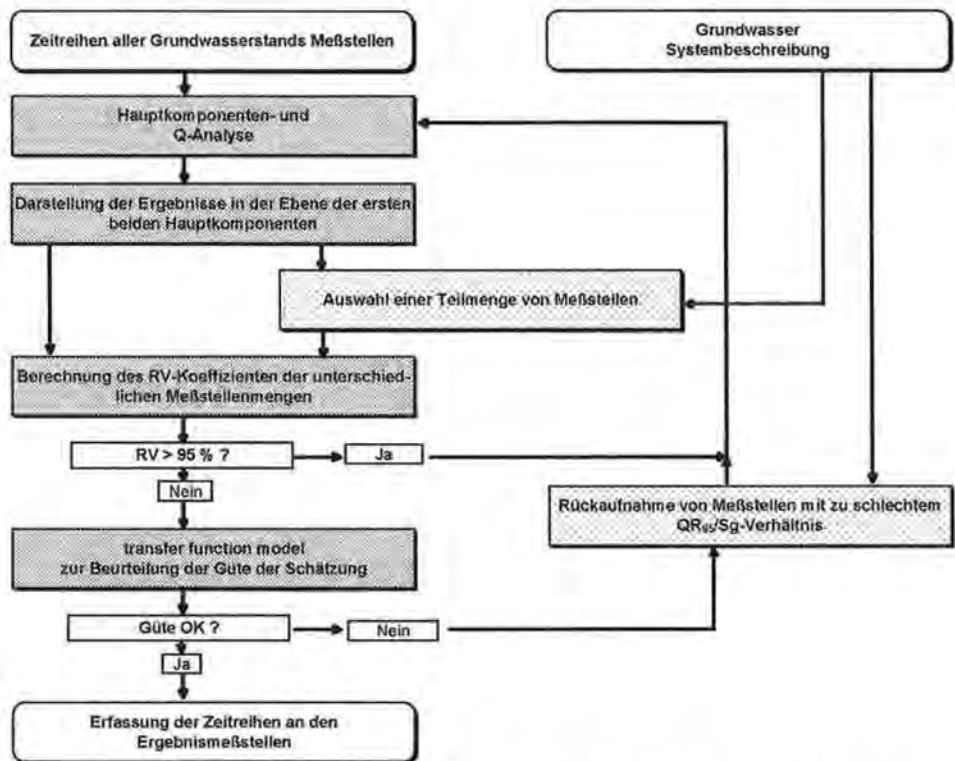


Fig. 4: Ablaufschema zur Auswahl charakteristischer Meßstellen aus einem vorhandenen quantitativen Grundwasser-Monitoringnetz.  
Schematic flow chart for the selection of characteristic observation points in an existing quantitative groundwater monitoring net.

- b) Darstellung der Meßstellen in der Ebene der ersten beiden Hauptkomponenten,
- c) Auswahl einer Teilmenge von Meßstellen aufgrund hydrogeologischer Überlegungen unter Berücksichtigung aller jener Faktoren, die die Grundwasserneubildung eines Gebietes bestimmen,
- d) Berechnung des RV-Koeffizienten zwischen der Menge aller Meßstellen und den ausgewählten Meßstellen,
- e) Q-Analyse für die reduzierte Meßstellenmenge und Darstellung der Meßstellen,
- f) sofern der RV-Koeffizient noch groß genug ist (Faustregel  $RV > 95\%$ ), weitere Reduktion der Anzahl der Meßstellen nach den oben genannten Kriterien,
- g) Überprüfung der Schätzgüte mit Hilfe des „transfer function models“,
- h) Rückaufnahme von ausgeschiedenen Meßstellen und neuerliche Berechnung der HKA und Q-Analyse.

### 3.7. Optimierungsergebnisse für die zeitliche Komponente

Die hydrogeologischen Grundlagen im Bereich des Leibnitzer Feldes wurden im Rahmen der Bearbeitung des Projektes „Hydrogeologie und Grundwassermodell Leibnitzer Feld“ (J. FANK et al., 1993) erarbeitet.

Die Analyse der Höhenlage und des zeitlichen Verlaufes des Grundwasserspiegels im gesamten Leibnitzer Feld zum Zweck der Meßnetzoptimierung umfaßt verschiedene Arten von Grundwassermessstellen, die sich in Beobachtungsintervall und Beobachtungszeitraum unterscheiden. Trotz einer eingehenden Analyse der Urdaten kann nicht ausgeschlossen werden, daß kleinere Meß- bzw. Erfassungsfehler in den Datensätzen enthalten sind, deren Einfluß auf die angewandten statistischen Methoden aber vernachlässigbar ist.

In einem **ersten Optimierungsschritt** wurden von den 251 zur Analyse anstehenden Meßstellen all jene weggelassen, die nur sehr kurz beobachtet wurden. In einem **zweiten Optimierungsschritt** wurden dann aufgrund einer neuerlichen Durchführung der HKA- bzw. Q-Analyse und unter Zuhilfenahme des RV-Koeffizienten weitere Meßstellen eliminiert, wobei die Meßstellen des Hydrographischen Dienstes gegenüber allen anderen bevorzugt beibehalten wurden, da sie sich durch eine hohe Datengüte auszeichnen. Nach diesem zweiten Schritt verblieben noch 92 Grundwassermessstellen.

Wurden in den ersten beiden Schritten fast ausschließlich statistische Kriterien zur Optimierung herangezogen, erfolgte im **dritten Schritt** eine weitere Reduktion des Meßnetzes aufgrund hydrogeologischer Gesichtspunkte, wobei die Auswahl dann mit Hilfe statistischer Methoden überprüft wurde. In diesem dritten Optimierungsschritt wurden unter Berücksichtigung der hydrogeologischen Lage der jeweiligen Grundwassermessstelle sowie der Beobachtungsdauer und des Beobachtungsintervalles charakteristische Grundwassermessstellen für die jeweiligen Teilgebiete ausgewählt.

Weitere Auswahlkriterien stellten der Vergleich der Grundwasserganglinien, der mittleren Grundwasserganglinien (zur Methodik siehe J. FANK et al., 1993) einzelner Meßstellen und eine Regionalisierung der Grundwassergebiete auf der Basis der Kennwerte der mittleren Grundwasserjahrganglinien dar. In einer vom Hydrographischen Dienst des Landes Steiermark (Referat Grundwasser) veranlaßten Zusammenstellung (AMT DER STEIERMÄRKISCHEN LANDESREGIERUNG, 1993) wurden die Ganglinien der Grundwassermessstellen des Leibnitzer Feldes dokumentiert und detailliert beschrieben (hydrologische Hauptwerte, Überschreitungsdauerlinien, Grundwasserganglinien, mittlere Grundwasserjahrganglinie etc.). Die Basis für den dritten Optimierungsschritt bilden die graphischen und tabellarischen Repräsentationen dieses Berichtes.



Das Ergebnis der Optimierung des Grundwassermessnetzes im Leibnitzer Feld hinsichtlich der zeitlichen Komponente ist in Fig. 5 dargestellt. Für den Bereich der **Hoch- und der Niederterrasse im nordöstlichen Leibnitzer Feld** wurden die Messstellen 3789, 37931, 3773, 3765 und 3769 als charakteristisch und den zeitlichen Verlauf des Grundwasserspiegels ausreichend beschreibend ausgewählt. Im Bereich der **Autalstufe der Mur** wurden im **nordöstlichen Leibnitzer Feld** die Grundwasserbeobachtungsstellen 3767, 37631, 37751, 37771, 37812, 38011, 3805, B643, B674 als charakteristische Messstellen ermittelt. Im **westlichen Leibnitzer Feld** wurden im **Bereich der Jößer Riffterrasse** die Messstellen 3764, 3784, 37664, 37682 und 3776 als charakteristische Messstellen mit typischen Grundwasserganglinien ausgewählt.

Aufgrund der Unterschiedlichkeit der Grundwasserganglinien und der räumlichen Verteilung der Messstellen erschien es nicht sinnvoll, weitere Messstellen aus den Untersuchungen zu eliminieren. Eine Sensitivitätsanalyse erbrachte bei Weglassen von jeweils einer Messstelle RV-Koeffizienten von  $< 0,95$ . Im Bereich der **Niederterrasse und der Austufe im westlichen Leibnitzer Feld** tritt der Schotterkörper als relativ homogener Grundwasserleiter hervor, sodaß zu erwarten war, daß gerade in diesen Teilgebieten eine starke Reduktion des Messstellennetzes möglich sein sollte. Andererseits gibt es gerade in diesem Raum sehr viele menschliche Aktivitäten, die auf den Grundwasserkörper einwirken.

Diese Aktivitäten führten aber auch zu einem sehr dichten Messstellennetz, sodaß auch aus diesem Grund eine Ausdünnung möglich schien. Aus der Vielzahl von Messstellen in diesem Bereich (40 Messstellen nach dem Optimierungsschritt 2) verblieben nach dem dritten Optimierungsschritt die neun Messstellen 3778, 37845, 38203, 38109, 3806, 38206, 3798, 3812 und 3834.

Der RV-Koeffizient zwischen den 40 oben genannten Messstellen und den neun verbliebenen beträgt  $RV = 0,97$ , womit diese weitere Reduktion um 31 Messstellen auch aus statistischer Sicht gerechtfertigt erscheint. Deutlich erkennbar ist an den Ergebnissen der zeitlichen Optimierung, um wieviel besser sich der zeitliche Verlauf des Grundwasserspiegels in homogenen Aquiferen durch nur wenige Messstellen im Vergleich zu kleinräumig inhomogenen Gebieten beschreiben läßt.

Die notwendige Messnetzdichte ist umso größer, je schneller sich die hydrogeologischen Rahmenbedingungen auf nur kurze Distanz verändern. Im Bereich der **Wagendorfer Terrasse** und im **Randbereich zur Helfbrunner Terrasse (Riß)** im **südlichen Leibnitzer Feld** konnte aufgrund der ersten beiden Optimierungsschritte die Anzahl der Messstellen von ursprünglich 12 auf fünf reduziert werden. Es verblieben die Messstellen 3819, 38232, 38311, 38352 und 38412. Nach den ersten beiden Optimierungsschritten verbleiben im **südlichen Leibnitzer Feld (Aubereich der Mur und Würm-Niederterrasse)** 13 Messstellen.

Aus diesem Set von Grundwassermessstellen wurden weitere Grundwassermessstellen aufgrund ihrer hydrogeologischen Lage, der Ähnlichkeiten der Ganglinien mehrerer Messstellen, Ähnlichkeiten in der Grundwassererneuerung etc. in einem dritten Optimierungsschritt ausgeschieden und mit den verbleibenden Grundwassermessstellen eine Q-Analyse durchgeführt, um die Zulässigkeit der Elimination zu dokumentieren. Nach dem dritten Optimierungsschritt verbleiben die Messstellen 38251, 38315, 3839, 3835 und 38371 als Grundwasserbeobachtungsstellen mit charakteristischen Ganglinien.

Die Q-Analyse mit den 13 Messstellen nach den Optimierungsschritten 1 und 2 ergab einen RV-Koeffizienten von  $RV = 0,958$ , womit diese Messstellenreduktion auch statistisch gerechtfertigt erscheint. Eine Möglichkeit der Beurteilung, ob die nach der

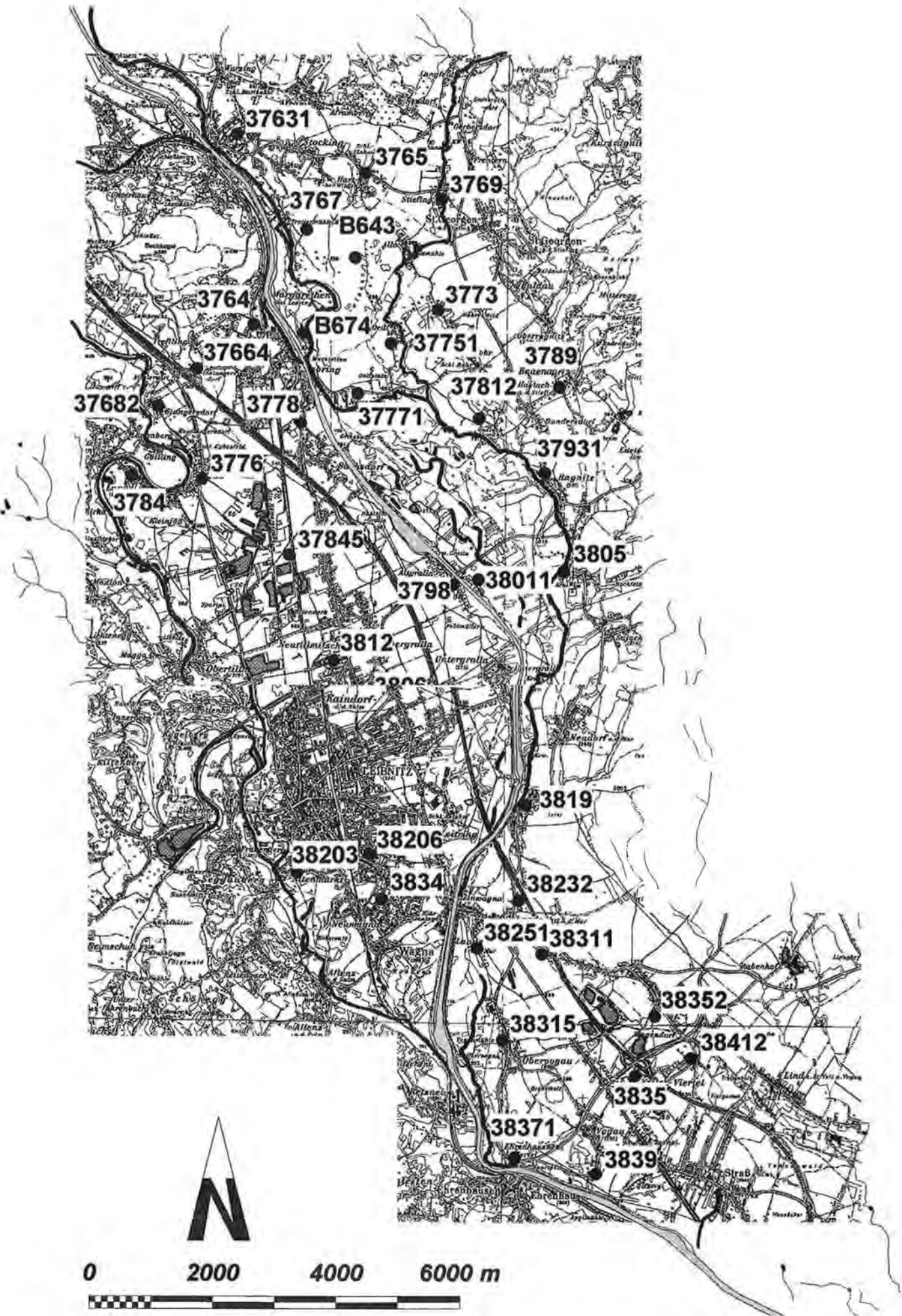


Fig. 5: Lage der verbliebenen Messstellen nach der Durchführung der Optimierungsschritte 1 bis 3. Ergebnis der zeitlichen Messnetzoptimierung.  
 Position of the remaining observation wells after performing optimization steps 1 to 3. Result of the optimization procedure in the time domain.

Optimierung verbliebenen Meßstellen ausreichen, um den Verlauf des Grundwasserspiegels eines Gebietes ausreichend zu charakterisieren, ist der Versuch, die Ganglinie einer weggelassenen Meßstelle aus den verbliebenen zu schätzen.

Grundsätzlich wurde versucht, die Ganglinien der in den Optimierungsschritten 2 und 3 weggelassenen Meßstellen für den Zeitraum 1. 1. 1985 bis 31. 12. 1990 mittels der in den einzelnen Teilbereichen nach dem Optimierungsschritt 3 verbliebener Meßstellen zu schätzen und deren Verlauf für den Zeitraum 1. 1. 1991 bis 31. 12. 1992 zu prognostizieren.

In Tab. 5 wurden – beispielhaft für das nordöstliche Leibnitzer Feld – für alle in den

Tab. 5: Schätzung der in den Optimierungsschritten 1 und 2 eliminierten Meßstellen über das „transfer function model“ mit Parametern zur Beurteilung der Güte der Schätzung (getrimmte Streuung der Verteilung der Grundwasserspiegellagen  $S_g$  [m], 95 %-Quantil der betragsmäßig der Größe nach geordneten Residuen  $QR_{95}$  [m], Quotient aus  $QR_{95}/S_g$  [%]).

Estimation of the groundwater hydrograph of the wells not taken into account in the optimization steps 1 and 2 using the transfer function model. Statistical values for the review of estimation.

Meßstelle	Regressoren (geordnet nach der Gewichtung)						$S_g$ [m]	$QR_{95}$ [m]	$QR_{95}/S_g$ [%]		
NE LF Terrasse											
3785	37931	3773					0,22	0,06	27,3		
3783	3765	3789					1,08	0,12	11,1		
37711	37931	3773	3769				2,04	0,12	5,9		
37695	37931	3769	3765				2,24	0,16	7,1		
3761	37931	3789	3773	3765			1,81	0,14	7,7		
B736	37931	3769					1,47	0,19	12,9		
B678	3765						1,84	0,32	17,4		
B711	37931	3769	3773				1,29	0,23	17,8		
B999	37931	3765					1,45	0,24	16,6		
B969	37931	3773	3769				1,34	0,24	17,9		
B686	3773	3769					1,10	0,33	30,0		
NE LF Austufe											
B604	37771	38011					0,62	0,24	39,0		
B607	3767	3805					0,76	0,17	22,7		
B644	37631	3767	B643	B674	37771	38011	1,16	0,16	13,5		
B675	B643	37771					0,99	0,26	26,5		
B676	37631	B643					0,70	0,15	22,0		
B680	B643	B674	37771	38011			0,59	0,15	25,2		
B735	37631	3767	B674	37751	37771		1,45	0,21	14,3		
B738	3767	B643	37771				0,98	0,25	26,0		
B741	B643	37771	3805				0,50	0,18	36,7		
B742	37631	3767	B643	B674	37771		0,96	0,14	14,9		
B745	B643	37631	3767	37751	38011		1,51	0,26	16,9		
37635	B643	37631	3767	B674	37751	37771	3805	38011	1,31	0,14	11,0
3775	37631	B643	37751	38011	3805				1,59	0,19	12,0
B671	37771	38011					1,10	0,52	47,5		
B672	3767	B643	37751				1,34	0,29	22,0		
B673	3767	B674	37771	38011	3805		0,87	0,26	29,6		
B639	37751	38011	3805	B643			1,69	0,43	25,6		
3809	37631	B643	B674	38011	3805		0,69	0,14	20,5		
B902	B643	B674	38011				0,84	0,26	31,0		
3781	37631	3767	3805				0,48	0,09	18,7		

Optimierungsschritten 1 und 2 weggelassenen Meßstellen die Regressoren nach ihrer Gewichtungsfunktion geordnet, die Streuung  $S_g$  der Meßwerte sowie das 95 %-Quantil  $QR_{95}$  angeführt und zur Beurteilung der Güte der Schätzung der Quotient aus  $QR_{95}/S_g$  berechnet. Auffällig, aber aufgrund der vorherrschenden Prozesse der Grundwasserneubildung und der hydrogeologischen Rahmenbedingungen leicht erklärbar, ist die schlechtere Schätzung von Meßstellen in den Auebereichen im Vergleich zu den Meßstellen auf der Niederterrasse.

## 4. Räumliche Datenanalyse

### 4.1. Allgemeine Grundlagen

Zur Bestimmung der räumlichen Abhängigkeit zwischen Meßwerten einer Variablen (z. B. Grundwasserspiegel) im Raum steht das Methodenspektrum der Geostatistik bzw. die Theorie „der regionalisierten Variablen“ zur Verfügung (siehe A. G. JOURNEL & Ch. H. HUIJBREGTS, 1978).

Unter einer regionalisierten Variablen wird eine Variable  $Z(\mathbf{s})$  verstanden (fett gedruckte Buchstaben bezeichnen Vektoren bzw. Matrizen), die Meßwerte in einem bestimmten Bereich in Abhängigkeit vom Ort  $\mathbf{s}$  bezeichnet. Eine Zufallsfunktion wird durch die Verteilung der einzelnen Zufallsvariablen  $Z(\mathbf{s})$  an jeder Stelle  $\mathbf{s}$  und die gegenseitigen Abhängigkeiten von  $Z(\mathbf{s})$  an verschiedenen Stellen  $\mathbf{s}$  charakterisiert. Betrachtet man zwei Punkte  $\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}$  und  $\mathbf{s}_2 = \mathbf{s} + \mathbf{h}$  mit Abstand  $h = |\mathbf{h}|$ , so stellt die Variogramm-funktion

$$2\gamma(h) = \text{Var}[Z(\mathbf{s}) - Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})]$$

ein effizientes Maß für die Abhängigkeit zwischen  $Z(\mathbf{s})$  und  $Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})$  dar.

Allerdings steht von jeder Zufallsvariablen  $Z(\mathbf{s})$  nur eine Realisierung  $z(\mathbf{s})$  zur Verfügung, weshalb bezüglich der Wahrscheinlichkeitsstruktur üblicherweise folgende Annahmen getroffen werden müssen.

Intrinsische Hypothese:

1.  $E[Z(\mathbf{s})] = m$  (der Erwartungswert existiert und ist ortsunabhängig).
2.  $\text{Var}[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{s})] = E[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{s})]^2 = 2\gamma(h)$ .

Für alle  $h$  und  $\mathbf{s}$  besitzt das Inkrement  $[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{s})]$  eine endliche Varianz, die nicht vom Ort abhängt. Anders ausgedrückt, bedeutet die intrinsische Hypothese, daß die Varianz des „Belastungsunterschiedes“ zwischen zwei Orten  $\mathbf{s}$  und  $\mathbf{s} + \mathbf{h}$  nur von der Entfernung  $h$  zwischen den Orten und ihrer Orientierung zueinander abhängt, und nicht von den Orten selbst.

### 4.2. Das Variogramm

#### 4.2.1. Experimentelle Variogramme

Das Variogramm  $2\gamma(h)$  stellt das Grundwerkzeug der geostatistischen Strukturanalyse dar, und läßt sich folgendermaßen berechnen:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n_h} \sum_{i=1}^{n_h} [Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_i + \mathbf{h})]^2,$$

wobei

$n_h$  die Anzahl der Beobachtungspaare für einen bestimmten Abstand  $h$ ,  
 $Z(s_i)$  der Meßwert an der Stelle  $s_i$  und  
 $Z(s_i + h)$  der Meßwert in der Entfernung  $h$  von  $s_i$  ist.

Da Meßpunkte meist auf keinem regelmäßigen Gitter liegen, müssen bestimmte Bereiche definiert werden, innerhalb derer die Meßdaten zur Berechnung eines Variogrammpunktes herangezogen werden. Die Berechnung erfolgt dabei meist in beliebig wählbaren horizontalen und vertikalen Richtungen und in wählbaren Abstandsklassen (lags), wobei die Parameter

- Richtung ( $\alpha$ ),
- Richtungstoleranz ( $\delta(\alpha)$ ),
- Abstandsklassen (Lag) und
- Bandbreite ( $b$ )

gewählt werden können (Fig. 6).

Ein experimentelles Variogramm kann für verschiedene Richtungen verschiedene Formen aufweisen, da es vektorwertig ist, d. h. sich aus einem Betrag  $|h|$  und einer Richtung  $\alpha$  zusammensetzt. Ist dies der Fall, liegt eine **Anisotropie** vor. Weisen Variogramme ein und desselben Datensatzes in verschiedenen Richtungen denselben Schwellenwert (Variogrammwert ab der  $2\gamma(h)$  konstant bleibt) und dieselbe Nuggetvarianz (Un-

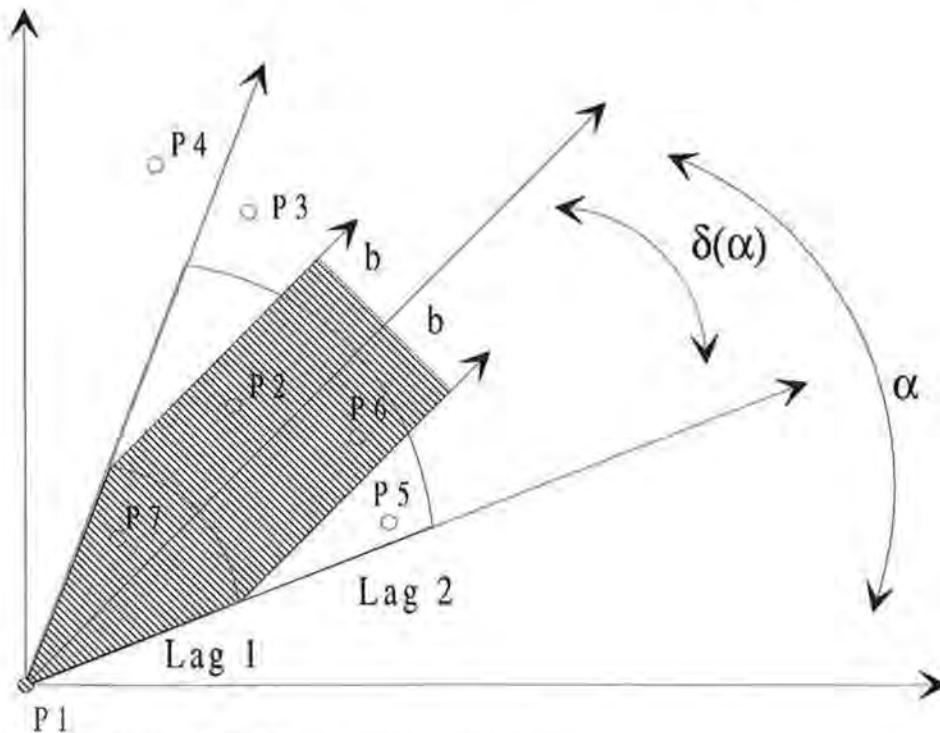


Fig. 6: Illustration der wählbaren Variogrammparameter.  
Illustration of the selectable parameters of a variogram.

stetigkeiten im Ursprung des Variogramms) jedoch unterschiedliche Steigungen auf, so liegt eine **geometrische Anisotropie** vor.

Experimentelle Variogramme aus verschiedenen Bereichen eines Aquifers weichen manchmal dadurch voneinander ab, daß lediglich ihr Schwellenwert unterschiedliche Größe aufweist. Dies ist mit der Proportionalität zwischen den Mittelwerten und den Standardabweichungen – d. h. je größer der Mittelwert, desto größer auch die Standardabweichung – verknüpft (Proportionalitätseffekt).

Andere Variogramme fallen nach einem erreichten Maximum wieder ab bzw. zeigen einen periodischen Verlauf, was auf voneinander abgrenzbare, sich eventuell wiederholende geologische Strukturen hinweist (**Holeffekt**).

In Fig. 6 wird das Paar  $P_1, P_7$  zur Berechnung des Variogrammwertes für die Abstandsklasse Lag 1 verwendet. Für Lag 2 sind es die Punktpaare  $P_1, P_6$  und  $P_1, P_2$ .

#### 4.2.2. Anpassen von Variogrammodellen

Ebenso wie an Häufigkeitsverteilungen formale Verteilungstypen (z. B. Normalverteilung) zur einfacheren Weiterverarbeitung angepaßt werden, ist es möglich an experimentelle Variogramme mathematische Modelle anzupassen.

Diese werden für weitere Berechnungen, insbesondere für Kriging weiterverwendet. Die Auswahl der Modelle konzentriert sich meist auf einige wesentliche Gesichtspunkte, z. B.:

- Verhalten in der Nähe des Ursprungs (Nuggetvarianz),
- Existenz eines Schwellenwertes,
- geschachtelte Strukturen,
- periodisches Verhalten,
- Anisotropien.

In der Praxis haben sich zur Anpassung an die experimentellen Variogramme einige Modelle bzw. deren Kombination bewährt, die ausreichend flexibel und verhältnismäßig leicht zu handhaben sind (I. CLARK, 1979). Man unterscheidet prinzipiell zwischen Modellen mit bzw. ohne Schwellenwert.

Es existieren zwar objektive statistische Prüfmethoden, wie etwa Kreuzvalidierung (vgl. B. M. DAVIS, 1987), mit denen festgestellt werden kann, ob ein experimentelles Variogramm gut approximiert wird, praktisch jedoch erfolgt die Anpassung heuristisch und visuell in einem interaktiven Prozeß.

Bei der Kreuzvalidierung werden die Punkte, die der Berechnung des experimentellen Variogrammes dienen, einer nach dem anderen aus dem vorhandenen Datensatz entfernt und mit Hilfe des Variogrammodells geschätzt. Aus den  $n$  Meßwerten  $z(s_i)$  und ihren  $n$  Schätzwerten  $\hat{z}(s_i)$  entstehen  $n$  Differenzwerte  $[z(s_i) - \hat{z}(s_i)]$ . Diese werden quadriert und durch die zugehörigen Krigevarianzen  $\sigma_k^2(s_i)$  für jeden Punkt dividiert, d. h. die Differenzen werden standardisiert:

$$\frac{[z(s_i) - \hat{z}(s_i)]}{\sigma_k^2(s_i)}$$

Der Mittelwert dieser standardisierten Werte soll dann nahe bei 0 liegen und die Standardabweichung nahe 1 sein, d. h. es sollte eine Standardnormalverteilung vorliegen. Mit Hilfe dieses Verfahrens können verschiedene Variogrammodellvarianten getestet und diejenige mit der kleinsten Abweichung vom Mittelwert 0 und von der Standardabweichung 1 ausgewählt werden.

### 4.3. Interpolationsverfahren

Wurde, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, aufgrund der an  $s_i$  Meßpunkten erhobenen Werte  $z(s_i)$  eine Strukturanalyse für ein Gebiet  $D$  durchgeführt, so stellt sich sehr oft die Frage, ob es nicht möglich ist, die Punktinformationen unter Zuhilfenahme der Strukturanalyse in die Fläche zu übertragen. Das Problem der räumlichen Schätzung liegt darin, den besten Schätzer eines mittleren Wertes einer regionalisierten Variablen in einem Bereich zu finden, wobei die Größe dieses Bereiches im Vergleich zum intrinsischen Prozeß des Gesamtgebietes  $D$  sehr klein ist. Gesucht ist also die Schätzung des mittleren Wertes

$$Z_V(s_0) = \frac{1}{V} \int_{V(s_0)} Z(s) ds$$

im Bereich  $V(s_0)$ , wobei die Werte der benachbarten Punkte  $z(s_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$  benutzt werden sollen (Fig. 7).

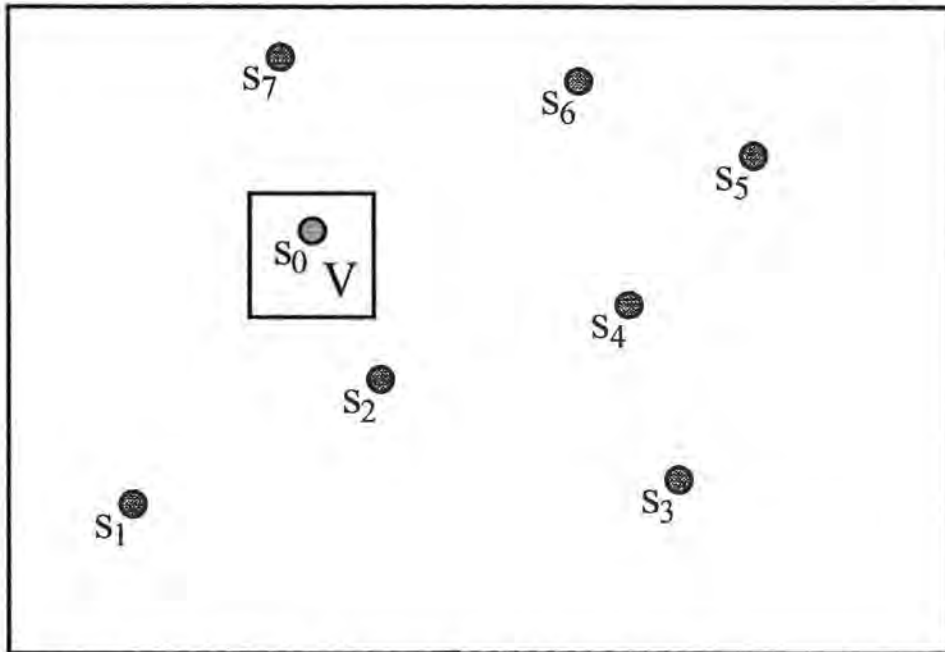


Fig. 7: Datenkonfiguration zur Illustration der räumlichen Schätzung.  
Dataset to illustrate spatial estimation.

An jedem Punkt, an dem eine Punktschätzung durchgeführt wird, ergibt sich ein geschätzter Wert  $\hat{z}(s_0)$  und ein wahrer Wert  $z(s_0)$ . Der Schätzfehler  $r$  kann als Differenz zwischen wahrem und geschätztem Wert definiert werden  $r = \hat{z}(s_0) - z(s_0)$  (Residuum). Bei Betrachtung der Verteilung der Residuen erwartet man, daß der Mittelwert dieser Verteilung bei 0 liegt (unverzerrte [unbiased] bzw. erwartungstreue Schätzung). Eine andere erwünschte Eigenschaft ist, daß die Streuung der Residuen möglichst klein ist.

Eine Statistik, die sowohl die Unverzerrtheit als auch die Streuung der Residuenverteilung berücksichtigt, ist der quadrierte mittlere Fehler:

$$\text{Mean Squared Error} = \text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_i^2.$$

#### 4.3.1. Triangulationsmethode

Dieser Algorithmus erzeugt Dreiecke, indem Linien zwischen den Punkten  $s_i$  so gezogen werden, daß sich die Dreiecke nicht überschneiden. Die bekannteste Methode zur Dreiecksfindung ist die DELAUNAY-Triangulation siehe (D. T. LEE & B. J. SCHACHTER, 1980).

Die Schätzung im Punkt  $\hat{z}(s_0)$  kann folgendermaßen durchgeführt werden,

$$\hat{z}(s_0) = \frac{A_{s_0 s_i s_k} z(s_i) + A_{s_0 s_i s_k} z(s_j) + A_{s_0 s_j s_k} z(s_k)}{A_{s_i s_j s_k}},$$

wobei die  $A_{s_i s_j s_k}$  die Fläche des jeweiligen Dreiecks darstellt.

Der Triangulationsschätzer entspricht einer gewichteten Linearkombination, wo jeder Wert  $z(s_i)$  gemäß der Fläche des gegenüberliegenden Dreiecks gewichtet wird. Diese Gewichtung entspricht der intuitiven Vorstellung, daß nähere Punkte ein größeres Gewicht erhalten. Durch die Division der individuellen Gewichte durch  $A_{s_i s_j s_k}$  kommt es zu einer Normalisierung, sodaß die Summe der Gewichte 1 ergibt, womit die Erwartungstreue der Schätzer garantiert werden soll.

#### 4.3.2. Inverse Distanzmethoden

Bei den inversen Distanzmethoden werden die Datenpunkten während der Interpolation so gewichtet, daß der Einfluß eines Punktes  $s_i$  in Relation zu den anderen Punkten mit steigender Entfernung zum gesuchten Punkt  $s_0$  sinkt. Statt Gewichte zu benutzen, die invers proportional zur Distanz sind, kann man auch Gewichte erzeugen, die invers proportional zu jeder beliebigen Power der Distanz sind:

$$\hat{z}(s_0) = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i^p} z(s_i)}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i^p}},$$

mit

$d_i$ : Distanz zwischen  $s_i$  und  $s_0$  und

$p$ : Exponent.

Diese generelle inverse Powerdistanz bringt ein großes Maß an Flexibilität. Für  $p \rightarrow 0$  wird der Schätzer zum einfachen arithmetischen Mittel der benachbarten Werte. Für  $p \rightarrow \infty$  wird er zum „nearest neighbour“ Schätzer, der dem gesuchten Punkt  $s_0$  den Wert des am nächsten liegenden Datenpunktes  $s_i$  zuordnet.

Dieser „nearest neighbour“ Schätzer kann als gewichtete Linearkombination angesehen werden, der das gesamte Gewicht auf den distanzmäßig zum gesuchten Punkt nächsten Nachbarn legt.



### 4.3.3. Kriging

Der Krigingalgorithmus ist eine Schätzmethode, die oft mit dem Akronym B.L.U.E. für „best linear unbiased estimator“ in Zusammenhang gebracht wird. Linear deshalb, da die Schätzer gewichtete Linearkombinationen der verfügbaren Daten sind und die Einschränkung auf die Klasse der linearen Schätzer quasi natürlich ist, da diese nur stationäre Zufallsfunktionen zweiter Ordnung (also Kovarianz oder Variogramm) voraussetzen.

#### Ordinary Kriging

Gegeben sei eine Zufallsfunktion  $Z(s) = m + \delta(s)$  mit konstantem Mittelwert  $m$ , einem stationären Prozeß zweiter Ordnung  $\delta(s)$  und einer bekannten Variogrammfunktion  $\gamma(h)$ . In seiner einfachsten Form, bekannt als Ordinary Kriging (OK), berechnet der Krigingalgorithmus den folgenden Schätzer:

$$\hat{Z}_{OK}(s) = \sum_{i=1}^n \lambda_i(s) z_i(s).$$

Die Gewichte  $\lambda_i(s)$  müssen so gewählt werden, daß die Schätzer

- (a) unverzerrt sind und
- (b) minimale Varianz haben, also  $\sigma_{OK}^2 \rightarrow \text{Min}$  gilt.

Die bisher vorgestellten Schätzmethoden der Triangulation und der inversen Distanzmethode sind ebenfalls linear und theoretisch auch unverzerrt. Der zusätzliche Vorteil von Kriging ist also der Umstand, daß die Schätzvarianz minimiert wird. Um Unverzerrtheit zu erreichen, reicht es

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i(s) = 1$$

zu fordern, denn

$$E(\hat{Z}_{OK}(s)) = m \sum_{i=1}^n \lambda_i(s) = m = E(Z_V(s)) \Rightarrow E\{Z_V(s) - \hat{Z}_{OK}(s)\} = 0.$$

Die Schätzvarianz ergibt sich als der Erwartungswert der quadrierten Differenzen zwischen tatsächlichen und berechneten Werten für einen betrachteten Block  $V$ :

$$\sigma_{OK}^2 = E(Z_V - \hat{Z}_V).$$

Die besten Schätzer (geringste Schätzvarianz) erhält man, wenn die partiellen Ableitungen nach  $\lambda_i$  0 gesetzt werden:

$$\frac{\partial \sigma_{OK}^2}{\partial \lambda_i} = 0.$$

Daraus entsteht ein System von  $n + 1$  Gleichungen mit  $n + 1$  Unbekannten, das als Krigesystem bezeichnet wird:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \lambda_j \bar{\gamma}(s_i, s_j) + \mu &= \bar{\gamma}(s_i, V), \quad i = 1, \dots, n, \\ \sum_{j=1}^n \lambda_j &= 1. \end{aligned}$$

Ordinary Kriging System

Dabei bezeichnet  $\gamma(s_0, V)$  das durchschnittliche Variogramm eines Punktes zum Gesamtvolumen und  $\mu$  den LAGRANGE'schen Parameter. Durch das Einsetzen der Lösungen für  $\lambda_i$  als

$$\sigma_{OK}^2(s_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \bar{\gamma}(s_0, V) + \mu - \bar{\gamma}(V, V)$$

ergibt sich die minimale Schätzvarianz oder Krigevarianz.

### Universal Kriging

Beim Ordinary Kriging wird von einem unbekanntem aber konstanten Mittelwert  $m$  ausgegangen. Angenommen, der Erwartungswert  $E(Z(s)) = m(s)$  ist nicht mehr konstant (Drift!), sondern läßt sich als Linearkombination von unbekanntem Funktionen  $m(s) = a_0 f_0(s) + \dots + a_p f_p(s)$  darstellen, so bedeutet UK (Universal Kriging) eine räumliche Schätzung, bei der der Zufallsprozeß  $Z(s)$  folgendermaßen dargestellt wird:

$$Z(s) = \sum_{j=0}^p a_j f_j(s) + \delta(s).$$

Es gilt die Definition  $f_0(s) = 1$  für alle  $s$ . Das heißt im Falle  $p=0$  erhält man den OK-Schätzer mit einem konstanten aber unbekanntem Mittelwert  $m(s) = a_0$ .

Der Trend (Drift) wird normalerweise als Polynom niedriger Ordnung ( $< 3$ ) der Koordinaten von  $s$  modelliert. Mit  $s = (x, y)$  erhält man z. B.:

- einen linearen Trend in 1-D:  $m(s) = a_0 + a_1 x,$
- einen linearen Trend in 2-D in 45°-Richtung:  $m(s) = a_0 + a_1(x + y)$  oder
- einen quadratischen Trend in 2-D:  $m(s) = a_0 + a_1 x + a_2 y + a_3 x^2 + a_4 y^2 + a_5 xy.$

Das zu lösende Gleichungssystem bei Universal Kriging hat folgendes Aussehen:

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \bar{\gamma}(s_i, s_j) + \sum_{l=1}^k \mu_l b_{s_i}^l, \quad \forall i = 1, \dots, n,$$

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j b_s^l = b_V^l, \quad \forall l = 1, \dots, k,$$

Universal Kriging System

mit

$$b_s^l = \frac{1}{S} \int_S f_l(s) ds.$$

Die minimale Schätzvarianz oder Krigevarianz ergibt sich nun durch das Einsetzen der Lösungen für  $\gamma_i$  als

$$\sigma_{UK}^2(s_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \bar{\gamma}(s_0, V) + \sum_{l=1}^k \mu_l b_V^l - \bar{\gamma}(V, V).$$

### 4.3.4. Vergleich der Interpolationsmethoden

Der größte Vorteil von Kriging gegenüber den anderen Verfahren liegt wie bereits erwähnt im Umstand begründet, daß Krigingschätzer mit minimaler Varianz liefert. Ein weiteres Kriterium zur Auswahl der Interpolationsmethode ist die Anzahl der zur Verfügung stehenden Datenpunkte. Für kleine Datensätze ( $< 250$  Meßpunkte) erzeugt

die Triangulationsmethode ein dreieckiges Facettenmuster zwischen den Datenpunkten. Erst für Datensätze zwischen 250 und 1000 Meßpunkten wird durch die Triangulation ebenso wie bei Kriging eine gute flächenhafte Repräsentation erreicht, wobei die Triangulation geringere Rechenzeiten benötigt. Dieser Vorteil der schnelleren Rechenzeit wirkt sich bei großen Datensätzen ( $> 1000$  Punkte) noch stärker zugunsten der Triangulation aus. Für sehr kleine Datensätze ( $< 15$  Punkte) ist die Triangulationsmethode ungeeignet. Der größte Nachteil bei Verwendung inverser Distanzen ist das kreisförmige Muster, das bei der Interpolation um die Datenpunkte herum entsteht. Die Flächenrepräsentanz ist also in Form konzentrischer Kreise um die Datenpunkte herum gekennzeichnet. Ein Vorteil der inversen Distanzalgorithmien liegt bei großen Datenmengen in der Schnelligkeit.

#### 4.4. Vorgangsweise bei der räumlichen Meßnetzoptimierung

In Fig. 8 ist die Vorgangsweise bei der räumlichen Meßnetzoptimierung schematisch dargestellt. Die oben vorgestellten geostatistischen Verfahren werden für die Optimierung eines Grundwasserspiegellagen-Monitoringnetzes genutzt. Ziel ist die flächenhafte Schätzung der Spiegellagen mit einem vorgegebenen maximalen Fehler im Vergleich

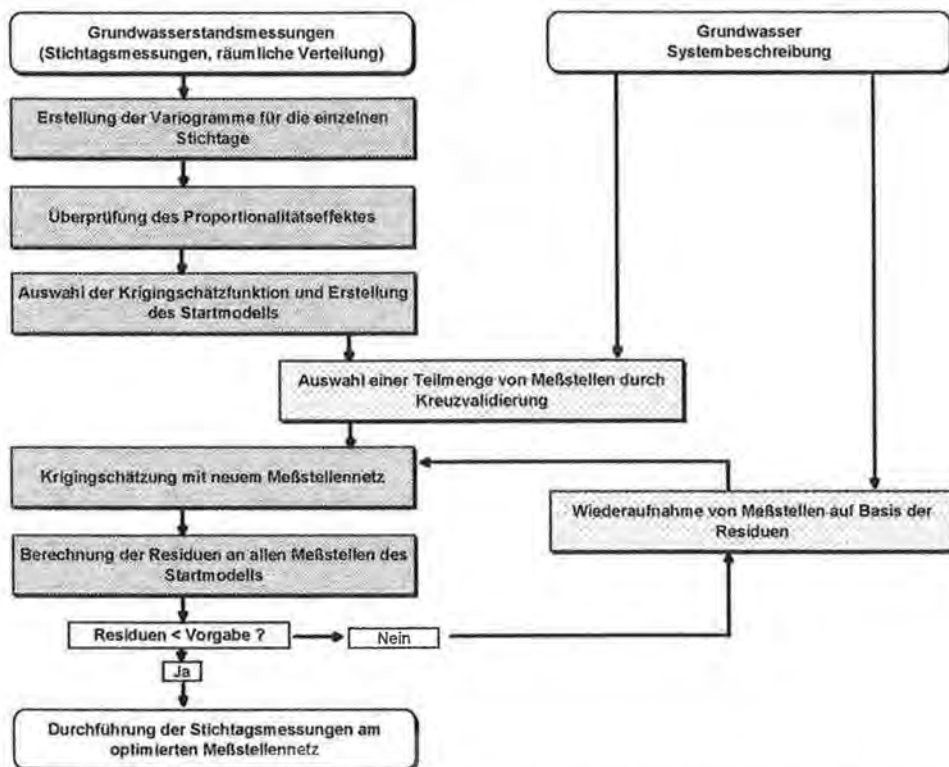


Fig. 8: Ablaufschema zur räumlichen Optimierung eines vorhandenen quantitativen Grundwasser-Monitoringnetzes.  
Schematic flow chart for the spatial optimization of an existing quantitative groundwater monitoring net.

zur Schätzung mit allen Meßstellen. Das Schätzverfahren soll ein mathematisch definiertes und nachvollziehbares sein.

Aus dem Bereich der Geostatistik kann die Krigingschätzung verwendet werden, um die Spiegellagen zu interpolieren und eine Überprüfung der räumlichen Optimierung des Meßnetzes durchführen zu können. Besonderes Gewicht erhält in diesem Zusammenhang die Variographie, d. h. die experimentelle Ermittlung von Variogrammen anhand der zur Verfügung stehenden Daten und die Anpassung von Modellvariogrammen, deren Parameter ermittelt werden.

Eine eventuell vorhandene Driftkomponente (generelles Grundwassergefälle) wird durch die Anwendung von „Universal Kriging“ berücksichtigt. Von besonderer Bedeutung ist dabei, daß sowohl die Variographie als auch die Ermittlung der Krigingparameter und der Suchkriterien für einzelne Teilgebiete eines Grundwassergebietes – wenn eindeutige Trennlinien vorhanden sind – getrennt durchzuführen sind.

Das Phänomen der Proportionalität von Variogrammen zu verschiedenen Zeitpunkten muß untersucht werden. Dieses kann genutzt werden, um zu einem Overall-Variogramm für alle Stichtagsmeßzeitpunkte zu kommen.

Die Frage der räumlichen Optimierung des Meßstellennetzes wird unter Zuhilfenahme der Kreuzvalidierung durchgeführt. Dieses Verfahren bedingt, daß bei einer sehr dichten Meßstellenverteilung weggelassene Stützstellen durch eng benachbarte mit geringen standardisierten Differenzen geschätzt werden. Der zweite Optimierungsschritt besteht daher in einer Überprüfung der Daten aus der Kreuzvalidierung und deren Parameter sowie – falls erforderlich – in einer Auswahl zusätzlicher Meßstellen im Vergleich zum ersten Optimierungsschritt in einem „trial and error“-Verfahren.

#### 4.5. Optimierungsergebnisse für die räumliche Komponente

Die Abgrenzung des Grundwassergebietes „Leibnitzer Feld“ erfolgt aufgrund der hydrogeologischen Grundlagen (J. FANK et al., 1993). Durch die Mur, die das Leibnitzer Feld in N-S-Richtung durchschneidet, erfolgt eine Auftrennung des Untersuchungsgebietes in das nordöstliche Leibnitzer Feld, in das westliche Leibnitzer Feld und in das südliche Leibnitzer Feld, das im Raum Vogau-Sträß ohne hydrologisch-morphologische Grenze in das Grundwassergebiet „Unteres Murtal“ übergeht. Aufgrund der hydraulischen Grenze „Mur“ ist es notwendig, die einzelnen Teilgebiete des Leibnitzer Feldes hinsichtlich der flächenhaften Ausbildung des Grundwasserkörpers getrennt zu betrachten.

Da die Messungen des Grundwasserspiegels nicht nur zu einem Zeitpunkt durchgeführt, sondern immer wieder wiederholt werden (Stichtagsmessungen), stellt sich die Frage, inwieweit es notwendig ist, für jeden Zeitpunkt (Stichtag) eigene Variogramme zu berechnen. Da die gemessenen Grundwasserspiegellagen an den einzelnen Grundwassermessstellen Zeitreihen darstellen, ist es theoretisch notwendig, für jeden Meßzeitpunkt ein eigenes Variogramm zu berechnen. Was man also für die räumliche Strukturanalyse benötigt, ist ein Overall-Variogramm, das die zu jedem Meßtermin ermittelten empirischen Variogramme möglichst gut repräsentiert. Exploratorische Datenanalysen und deskriptive Zeitreihenanalysen zeigten, daß sich der Grundwasserspiegel an den beobachteten Meßstellen von Woche zu Woche nur geringfügig ändert, womit in der weiteren Strukturanalyse 38 Zeitpunkte betrachtet werden, was den Daten jeweils der letzten Woche jedes Monats von Juli 1989 bis Jänner 1993 entspricht. In Fig. 9 sind die entsprechenden 38 empirischen Variogramme des nordöstlichen Leibnitzer Feldes

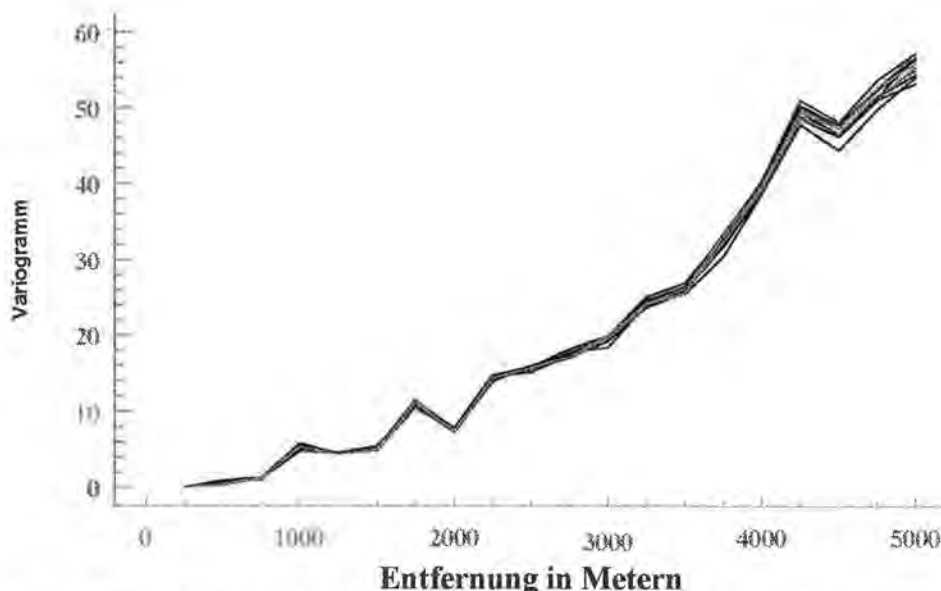


Fig. 9: Achtunddreißig Variogramme aus dem nordöstlichen Leibnitzer Feld zu verschiedenen Zeitpunkten.  
*Thirtyeight variograms in the northeastern Leibnitzer Feld at different times.*

zu eben diesen Zeitpunkten dargestellt, wobei der Proportionalitätseffekt der Variogramme deutlich zu erkennen ist. E. H. ISAAKS & R. M. SRIVASTAVA (1989) zeigten, daß es beim Kriging mit Variogrammen, die lediglich einen Proportionalitätseffekt aufweisen, keine Rolle spielt, welches Variogramm man zugrunde legt, da der Krigingalgorithmus unabhängig vom Skalierungsfaktor ist. Das bedeutet, daß man bei Vorliegen eines Proportionalitätseffektes jedes der genannten Variogramme dem Kriging zugrunde legen kann, da bei einer Reskalierung des ausgewählten Variogramms mit einer beliebigen Konstante die Krigingschätzer nicht beeinflusst werden.

Am 1. 7. 1991 wurde vom Hydrographischen Dienst des Landes Steiermark (Referat Grundwasser) eine Stichtagsmessung des Grundwasserspiegels an 302 Meßstellen durchgeführt. Diese Messung ist die derzeit in diesem Umfang aktuellste Stichtagsmessung im Leibnitzer Feld. Aufgrund des von K. FUCHS et al. (1995) nachgewiesenen Porportionalitätseffektes werden diese 302 am 1. 7. 1991 beprobten Meßstellen als Datenbasis zur Durchführung der Strukturanalyse gewählt, um so die maximal zur Verfügung stehende Information in die Analyse und die daran anschließende Meßnetzoptimierung zu integrieren.

#### 4.5.1. Variographie im Untersuchungsgebiet

In der Fig. 10 sind beispielhaft die empirischen Variogramme für die ersten beiden Hauptrichtungen (N-S-Richtung:  $\alpha = 90^\circ$ ;  $\delta\alpha = 45^\circ$  bzw. W-E-Richtung:  $\alpha = 0^\circ$ ;  $\delta\alpha = 45^\circ$ ) im nordöstlichen Leibnitzer Feld dargestellt.

Man erkennt in beiden Richtungen einen parabolischen Anstieg der empirischen Variogramme. Das bedeutet theoretisch, daß die Zufallsvariable  $Z(s)$  eine unbegrenzte räumliche Dispersion aufweist, womit weder ein Schwellenwert noch die Kovarianz definiert werden kann. Das heißt, daß weder die Hypothese der Stationarität noch die

intrinsische Hypothese Gültigkeit haben. Solche Variogramme mit  $\gamma(h) = p \cdot h^\alpha$  für  $\alpha \in ]1,2[$  sind nicht von parabolischen Drieffekten zu unterscheiden (A. G. JOURNAL & Ch. J. HUIJBREGTS, 1978), was die Anwendung des Universal Kriging zur Schätzung der Grundwasserisohypsen notwendig macht.

Um zu einem theoretischen Variogramm zu kommen, das für das Universal Kriging benötigt wird, muß in einem ersten Schritt der Trend (Drift) modelliert werden. Dies passiert normalerweise über ein Polynom niedriger Ordnung ( $< 3$ ) der Koordinaten von  $s = (x, y)$ . Im Fall des nordöstlichen Leibnitzer Feldes wird versucht, mit Hilfe eines quadratischen Polynoms  $m(s) = a_0 + a_1x + a_2y + a_3x^2 + a_4y^2 + a_5xy$  den Trend entsprechend zu schätzen, wobei die Methode der multiplen linearen Regression als Schätzalgorithmus verwendet wird.

Das Ergebnis dieser Schätzung, wobei als Selektionskriterium „stepwise selection“ verwendet wurde, zeigt, daß der Erklärungsgrad  $R^2$  bzw. der adjustierte Erklärungsgrad (= adjusted R square) der Regression mit 0,97 sehr hoch ist. Es ist sehr leicht zu erkennen, daß lediglich die Variablen  $x$  und  $y$  in das Regressionsmodell aufgenommen wurden, während die Variablen  $x^2$ ,  $y^2$  und  $xy$  keine Berücksichtigung fanden. Entgegen der ersten visuellen Annahme eines parabolischen Drifts deutet das Ergebnis der Regressionsschätzung darauf hin, daß die Drift durch eine lineare Funktion in  $x$  und  $y$  mit ausreichender Genauigkeit beschrieben werden kann.

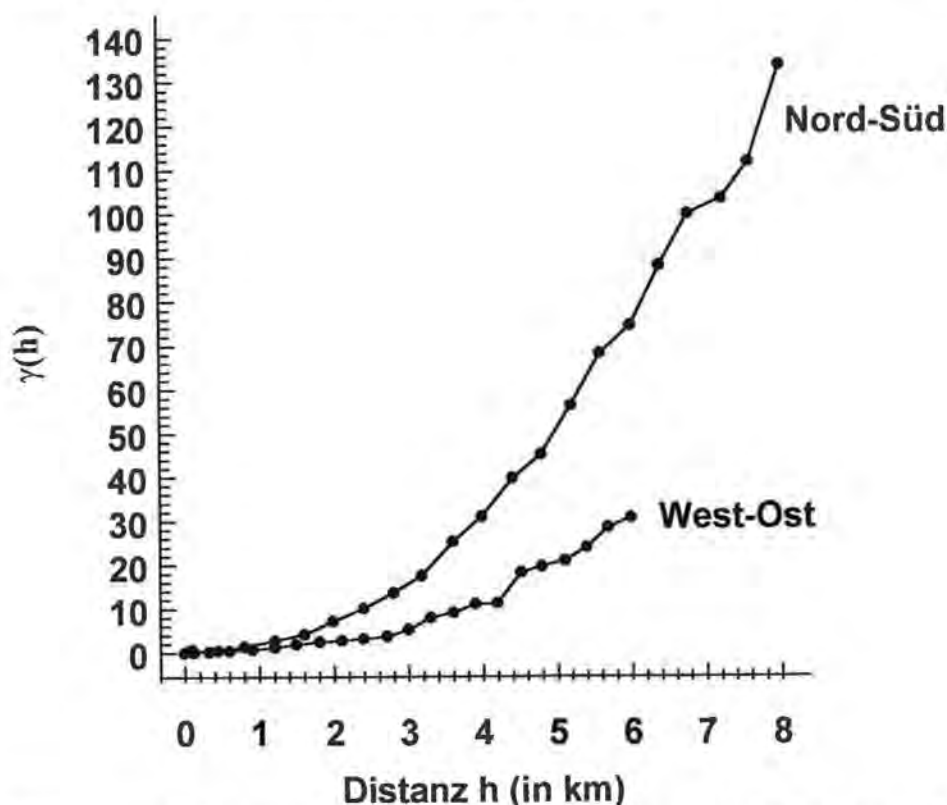


Fig. 10: Empirische Variogramme für die beiden Hauptrichtungen im nordöstlichen Leibnitzer Feld.  
Empirical variograms for the two main directions in the northeastern Leibnitzer Feld.

Die Toleranz (Tol) einer Variablen ist das Standarddiagnosetool zur Prüfung der Multikollinearität. Multikollinearität bedeutet, daß hohe Korrelation zwischen unabhängigen Variablen vorliegt. Die Toleranz der Variablen  $i$  ist definiert als  $1 - R_i^2$ , wobei  $R_i^2$  den multiplen Korrelationskoeffizienten darstellt, wenn die  $i$ -te Variable mit Hilfe der anderen unabhängigen Variablen geschätzt wird. Wenn die Toleranz einer Variablen sehr klein ist, dann kann man sie als Linearkombination der anderen unabhängigen Variablen darstellen, womit diese Variable nicht in das Regressionsmodell aufgenommen wird. Infolge der großen Standardabweichung bei Vorliegen von Multikollinearität liefert der entsprechende Test der Regressionskoeffizienten gegen 0 unter Umständen keine Ablehnung, doch man ist unsicher, ob das von der Bedeutungslosigkeit der Koeffizienten für die Regressionsfunktion oder aber von der bestehenden Multikollinearität herrührt (K. FUCHS, 1995). Die Toleranz der drei nicht in das Modell aufgenommenen Variablen liegt sehr nahe bei 0, was bedeutet, daß sie als Linearkombination der sich im Modell befindlichen Variablen  $x$  und  $y$  dargestellt werden können.

Eine Voraussetzung bei der Verwendung der multiplen linearen Regression ist die Unabhängigkeit der Regressoren, die über die eben beschriebenen Methoden der Kollinearitätsuntersuchung überprüft werden kann. Eine weitere Voraussetzung ist die Unabhängigkeit der Residuen. Eine Möglichkeit, um diese Voraussetzung zu prüfen, ist die Verwendung der DURBIN-WATSON-Statistik (J. DURBIN & G. S. WATSON, 1951), wobei eine Faustregel sagt, daß die Hypothese der Unabhängigkeit gilt, wenn die DURBIN-WATSON-Statistik bei etwa 2 liegt. Im Falle der Daten des nordöstlichen Leibnitzer Feldes liegt keine Autokorrelation der Residuen vor, was durch die DURBIN-WATSON-Statistik, die bei 1,862 liegt, bestätigt wird. Im Residuenplot gegen die geschätzten Werte ist kein systematisches Muster zu erkennen.

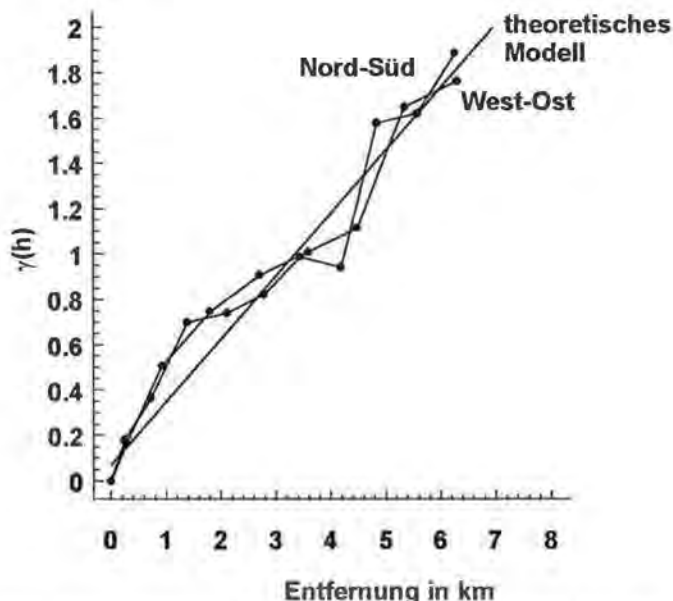


Fig. 11: Theoretische und empirische Variogramme der Residuen im nordöstlichen Leibnitzer Feld. Theoretical and empirical variograms of the residuals in the northeastern Leibnitzer field.

Nachdem nun für den nichtstationären Prozeß  $Z(s) = m(s) + Y(s)$  der Trend  $m(s)$  über ein lineares Polynom in  $x$  und  $y$  geschätzt wurde, fehlt nun noch das Variogramm  $\gamma(h)$  für den Residualterm  $Y(s)$ , um Universal Kriging durchführen zu können. Das benötigte Variogramm  $\gamma(h)$  kann berechnet werden, wobei als Werte  $z(s)$  die Residuen der eben durchgeführten Regression verwendet werden. Die experimentellen Variogramme nebst zugehörigem theoretischen Modell sind in Fig. 11 für das nordöstliche Leibnitzer Feld dargestellt. Man sieht in beiden Hauptrichtungen eine lineares Verhalten der Residuenvariogramme. Die beiden Variogramme können somit recht gut durch ein theoretisches lineares Variogramm der Form  $\gamma(h) = C_0 + p \cdot h$  approximiert werden, wobei  $C_0 = 0,07$  den Nuggeteffekt darstellt und  $p = 0,00027$  geschätzt wurde. Für den Sill bzw. den Scale-Parameter ergibt sich dann 2,23.

#### 4.5.2. Interpolationsparameter

Die Kriginginterpolation zur Schätzung der Grundwasserisohypsen im nordöstlichen Leibnitzer Feld wurde unter Verwendung des Programms „Surfer for Windows™“ (GOLDEN SOFTWARE, INC., 1994) durchgeführt, wobei die in Fig. 12 angeführten Parametereinstellungen verwendet wurden.

Der „Drifttyp“  $m(s)$  wurde aufgrund der Ergebnisse in Kap. 4.5.1. als linear angenommen. Als Variogramm verwenden wir das oben geschätzte Residuenvariogramm (vgl. Fig. 11) mit „Type Linear“, „Scale = 2,23“ und einem Nuggeteffekt von 0,07. Da

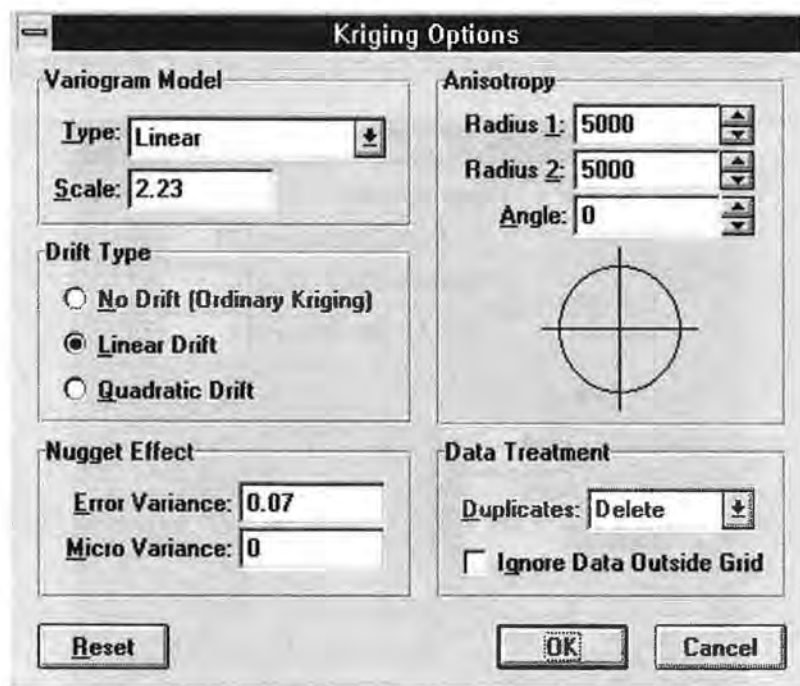


Fig. 12: Parametereinstellungen für die Kriginginterpolation des Grundwasserspiegels im nordöstlichen Leibnitzer Feld.

Parameters for Kriging interpolation of the groundwater table in the northeastern Leibnitzer Feld.



die beiden Variogramme der Residuen in beide Richtungen ein ähnliches Verhalten aufweisen, konnte ein theoretisches Variogramm an beide angepaßt werden, womit für den Residualterm isotropes Verhalten angenommen wird, d. h. daß man die Radien zur Beschreibung der „Anisotropie“ gleich setzen kann.

Aufgrund des Ergebnisses der Trendschätzung und des Vorliegens von Multikollinearität wurde über die Kreuzvalidierung der Drifttyp (Ordinary Kriging, linearer Drift bzw. quadratischer Drift) für das Kriging überprüft. Für das Ordinary Kriging wurde auf die Idee von A. G. JOURNEL & Ch. J. HUIJBREGTS (1978) zurückgegriffen, einen quasistationären Prozeß  $\gamma(h) = p \cdot h$  für kleine Entfernungen zu modellieren, wobei ausgehend von Fig. 10  $p = 0,05$  und  $b = 3000$  (mit  $b$  als Grenze des quasistationären Prozesses) gewählt wurde. Als Ergebnis der Validierung wurde das Modell mit linearem Drift gewählt, da bei diesem im Vergleich zu den anderen der Mittelwert über die  $d_i$  am nächsten 0 und die Standardabweichung der Größen  $d_i$  am nächsten bei 1 lag.

Als Suchstrategie für das Kriging wurden die in Fig. 13 angeführten Einstellungen gewählt. Die Empfehlungen von M. SOPHOCLEOUS et al. (1982) jeweils mindestens acht Punkte für die Schätzung eines Blocks  $V$  zu verwenden, konnten nicht eingehalten werden, da aufgrund der zu geringen Punktdichte eine Einstellung der „Minimum Total Data = 8“ in Fig. 13 zu sehr vielen Blocks geführt hätte, die nicht schätzbar gewesen wären. Daher konnte aufgrund der Datenlage die „Minimum Total Data“ nur auf 5 gesetzt werden. Zur Ermittlung der Radien für die Suchellipse wurde wieder eine Kreuzvalidierung durchgeführt, wobei Modelle mit „Search Radius 1 = Search Radius 2 = 4000, 5000, 6000 und 7000“ verglichen wurden und sich (aufgrund des oben genannten Kreuzvalidierungskriteriums zur Auswahl eines Modells) das Modell mit Radius 2 = 5000 als das günstigste erwies.

Fig. 13: Einstellungen der Suchstrategie für die Kriginginterpolation des Grundwasserspiegels im nord-östlichen Leibnitzer Feld.  
 Setting of the search strategy for Kriging interpolation of the groundwater table in the north-eastern Leibnitzer Feld.

Mit diesen Einstellungen wird beim Kriging nun für jedes Gridelement ein Wert geschätzt. Da wie bereits beschrieben, der Wert eines Gridelements die durchschnittliche Spiegellage dieses Gridelements ist, hat man, obwohl Kriging exakte Werte in den Einzelpunkten liefert, an den Meßstellen, die außerhalb des geometrischen Zentrums des Gridelements liegen, ebenfalls Abweichungen des geschätzten Wertes von den tatsächlich gemessenen Werten. Die Werte der Residuen hängen somit auch von der gewählten Maschenweite ab, wobei grundsätzlich gilt, daß die Residuen an den bekannten Meßstellen mit Verringerung der Maschenweite ebenfalls kleiner werden. Im gegenständlichen Fall wurden alle Kriginginterpolationen in allen drei Teilbereichen (nordöstliches, westliches und südliches Leibnitzer Feld) in einem Raster von  $50 \times 50$  m durchgeführt.

Ebenso wie im nordöstlichen Leibnitzer Feld zeigen die empirischen Variogramme im westlichen Leibnitzer Feld einen parabolischen Anstieg. Eine weitere Möglichkeit der Schätzung der Blocks  $V$  ist, wie eben diskutiert, die Verwendung des Ordinary Kriging für einen quasistationären Prozeß  $\gamma(h) = p \cdot h$  für kleine Entfernungen.

Im Rahmen der Kreuzvalidierung wurden wieder die drei Modelle Ordinary Kriging, linearer Drift bzw. quadratischer Drift miteinander verglichen, wobei sich im Falle des westlichen Leibnitzer Feldes das Modell des Ordinary Kriging als das günstigste der drei erwies.

Somit wurden für den quasistationären Bereich mit  $b = 3000$  die empirischen Variogramme berechnet und an diese theoretische Variogramme der Form  $\gamma(h) = p \cdot h$  angepaßt, mit  $p_{W-E} = 0,007$  und  $p_{N-S} = 0,0003$ . Damit ergibt sich für die Sills 21,9 bzw. 9,7. Die lineare Anpassung zeigt, daß die Variogrammwerte in N-S-Richtung kleiner sind als in W-E-Richtung, was auf Anisotropie hinweist. Da das Verhältnis der Sills ungefähr im Verhältnis 2 : 1 steht, wurden auch Radien 1 und 2 im Verhältnis 2 : 1 gewählt.

Die Kriginginterpolation zur Schätzung der Grundwasserisohypsen im westlichen Leibnitzer Feld wurde daher mit folgenden Parametereinstellungen durchgeführt:

Variogram model type:	linear	Anisotropy	Radius 1:	1500
Scale:	21,9		Radius 2:	3000
Drift type:	no drift		Angle:	0
Nugget effect:	0,0			

Die Suchstrategie bezogen auf die zu verwendenden Punkte wurde gleich wie im nordöstlichen Leibnitzer Feld gewählt. Als Suchellipse wurde Radius 1 auf 1500 und Radius 2 auf 3000 gesetzt. Der Suchradius wurde wieder über Kreuzvalidierung ermittelt, wobei Variante 1 (500, 1000), Variante 2 (1000, 2000) und Variante 3 (1500, 3000) miteinander verglichen wurden.

Im südlichen Leibnitzer Feld liegt ebenfalls ein starker Drift vor, der wie im nordöstlichen Leibnitzer Feld mittels eines Trendpolynoms geschätzt wurde (K. FUCHS et al., 1995). Auch hier deutet das Ergebnis der Trendschätzung mit Hilfe der multiplen linearen Regression auf das Vorliegen eines linearen Trends in  $x$  und  $y$  hin.

Im Rahmen der Kreuzvalidierung wurden wieder die drei Modelle Ordinary Kriging, linearer Drift bzw. quadratischer Drift miteinander verglichen, wobei sich im Falle des südlichen Leibnitzer Feldes das Modell mit linearem Drift als das günstigste der drei erwies. Die Kriginginterpolation zur Schätzung der Grundwasserisohypsen im südlichen Leibnitzer Feld wurde daher mit folgenden Parametereinstellungen durchgeführt:

Variogram model type:	linear	Anisotropy	Radius 1:	4200
Scale:	2,9		Radius 2:	2100
Drift type:	linear		Angle:	0
Nugget effect:	0,0			

Die Suchstrategie wurde mit Ausnahme der Suchradien (im südlichen Leibnitzer Feld: Radius 1:4200; Radius 2:2100) gleich wie im nordöstlichen Leibnitzer Feld gewählt. Der Suchradius wurde wieder über Kreuzvalidierung ermittelt, wobei Variante 1 (3200, 1600), Variante 2 (4200, 2100) und Variante 3 (5200, 2600) miteinander verglichen wurden.

#### 4.5.3. Das räumlich optimierte Meßnetz

Als Ausgangsbasis für die Optimierung der räumlichen Verteilung der Grundwassermeßstellen im Leibnitzer Feld dient ein Grundwasserisohypsenplan, der für die einzelnen Teilgebiete des Leibnitzer Feldes nach den im vorherigen Abschnitt diskutierten Einstellungen mit Hilfe der 302 Meßpunkte geschätzt wurde. Der Grundwasserisohypsenplan aus dem Krigingstartmodell stellt somit den Verlauf des Grundwasserspiegels im Leibnitzer Feld derart dar, daß dieser in einem Raster von  $50 \times 50$  m nach einem mathematisch definierten Verfahren mit den in Kapitel 4.5.2. ermittelten Parametern geschätzt wurde. Erst dadurch wird es möglich, den flächenhaften Verlauf des Grundwasserspiegels jederzeit nachvollziehbar gestalten zu können. Im Zuge der Optimierungsschritte sollen nun Grundwasserisohypsenpläne geschätzt werden, die auf weniger Meßstellen basieren, aber nur geringfügig ungenauer sein sollen, als die Pläne, die mit Hilfe des Startmodells berechnet wurden. Die Genauigkeitsverluste, die durch das Weglassen einzelner Punkte entstehen, können unter Zuhilfenahme derselben Verfahren und Parameter ebenso mathematisch exakt berechnet und mit dem Krigingstartmodell verglichen werden. Erst dadurch besteht die Möglichkeit, die Qualität der Meßnetzoptimierung anhand der Residuen  $r_i$  zwischen den Schichtenplänen der optimierten Meßpunktzahl und dem Startmodell (mit 302 Punkten) zu bewerten.

Der Konturplot der Verteilung der Residuen (aufgrund der gewählten Maschenweite) im Untersuchungsgebiet kann verwendet werden, um die Güte des Schätzverfahrens beurteilen zu können. Die Abweichungen  $r_i$  (Residuum) zwischen Meßwert und geschätztem Wert, die in erster Linie von der Lage der Meßpunkte zu den geschätzten Rasterpunkten und damit von der Gridweite abhängen, liegen zwischen  $-0,1$  und  $+0,12$  m und sind zufällig über die Fläche verteilt. Ein Trend in eine bestimmte Richtung ist nicht erkennbar, die Qualität der Schätzung kann als sehr gut bezeichnet werden.

#### Erster Optimierungsschritt

Der erste Optimierungsschritt wurde unter Zuhilfenahme der Kreuzvalidierung und den oben angeführten Krigingseinstellungen und Suchstrategien durchgeführt. Die aus der Kreuzvalidierung berechneten standardisierten Differenzen  $d_i$  wurden der Größe nach sortiert und alle jene Meßstellen für die weitere Bearbeitung weggelassen, an denen die standardisierten Differenzen  $< 0,3$  waren. Dieser Schwellenwert von  $0,3$  ist ein auf der Basis der Häufigkeitsverteilung und der Anzahl der gewünschten Meßstellen willkürlich gewählter Wert. Es wurden also jene Meßstellen weggelassen, die sehr gut geschätzt werden konnten.

Unter Verwendung der in Kapitel 4.5.2. ermittelten Krigeparameter für die drei Teilbereiche des Leibnitzer Feldes wurde der Grundwasserspiegel mittels der verminderten Meßstellenanzahl neu geschätzt. Die Residuen  $r_i$  nach dem ersten Optimierungsschritt

schritt erreichen Werte bis zu  $< -0,40$  m und  $> +0,40$  m. Lag die Differenz zwischen Maximum und Minimum der Residuen beim Startmodell bei 24 cm, so ist diese nach dem ersten Optimierungsschritt auf 80 cm angewachsen und hat sich somit mehr als verdreifacht. Die Residuen  $r_i$  sind aber nach wie vor unregelmäßig über das Gesamtgebiet verteilt, ein Hinweis, daß die Schätzung ohne systematischen Fehler durchgeführt wurde.

Vergleicht man die Lage der Meßstellen, die für die Berechnung der beiden Modelle (Startmodell und erstes Optimierungsmodell) herangezogen worden waren, so ist deutlich erkennbar, daß die größten Differenzen in jenen Bereichen zu erkennen sind, die im Krigingstartmodell durch eine besonders dichte Meßstellenverteilung gekennzeichnet waren.

Die Ursache dafür ist im Verfahren der Kreuzvalidierung zu suchen: bei dieser werden nacheinander die einzelnen Stützstellen weggelassen und diese weggelassenen aus den verbliebenen übrigen Stützstellen geschätzt. Liegen nun zwei oder mehrere Meßstellen ähnlichen Verhaltens in geringer räumlicher Distanz, so wird jede Meßstelle, wenn sie im Zuge der Kreuzvalidierung weggelassen wird, durch die benachbarten Meßstellen sehr gut repräsentiert, die standardisierten Differenzen erreichen sehr kleine Werte. Verwendet man nun diese standardisierten Differenzen zur Beurteilung des Gewichtes der jeweiligen Meßstelle für die Schätzung der Spiegellage, treten gerade in Gebieten mit einer hohen Meßnetzdicke durchwegs Meßstellen mit geringen standardisierten Differenzen auf, die in unserem Falle im ersten Optimierungsschritt weggelassen und für die Schätzung der Grundwasserspiegel nicht mehr herangezogen wurden.

Beim „leaving one out“ der Kreuzvalidierung wird also ein Punkt durch einen sehr nahe liegenden anderen Punkt gut repräsentiert und umgekehrt, womit  $d_i$  für beide Punkte klein ist. Läßt man nun nach der oben beschriebenen Regel alle Punkte mit  $d_i < 0,3$  weg, läßt also zwei sehr nahe beieinander liegende Punkte gleichzeitig weg, so verliert man in diesem Fall den wechselseitigen Einflußeffect, womit die Residuen an diesen Stellen durchaus groß werden können. Um nun die Residuen an diesen Stellen entsprechend zu verkleinern, ist es notwendig, gewisse Meßstellen, die im ersten Optimierungsschritt eliminiert wurden, wieder ins Beobachtungsnetz aufzunehmen.

### Zweiter Optimierungsschritt

Der zweite Optimierungsschritt hinsichtlich der räumlichen Verteilung der Grundwassermessstellen im Leibnitzer Feld bestand nun in einer exploratorischen Analyse in den kritischen Bereichen – jene Bereiche mit den größten Residuen  $r_i$  – unter Berücksichtigung der herrschenden hydrogeologischen Rahmenbedingungen. Ausgehend von der Lage der Meßstellen im Startmodell und nach der ersten Optimierung wurden in den Bereichen mit hohen Differenzen zwischen Startmodell und erster Optimierung vom Hydrogeologen sukzessive Meßstellen aus dem Startmodell in die Krigingschätzung rückübernommen, die Spiegellageninterpolation neuerlich durchgeführt, die Residuen bewertet und den Ergebnissen nach der ersten Optimierung gegenübergestellt. Diese Vorgehensweise stellt für den Substanzwissenschaftler ein sehr praktikables Validierungssystem dar, wo in einem interaktiven Prozeß (dem Hydrogeologen wichtig erscheinende) Meßstellen wieder in das Meßnetz aufgenommen und die aus den Krigingschätzern resultierenden Residuen visualisiert werden. Das Ziel dieses interaktiven Validierens war es, die Grundwasserspiegellage mit einer Genauigkeit von  $\pm 0,20$  m an den Meßstellen des Startmodelles zu schätzen und zu diesem Zweck eine möglichst

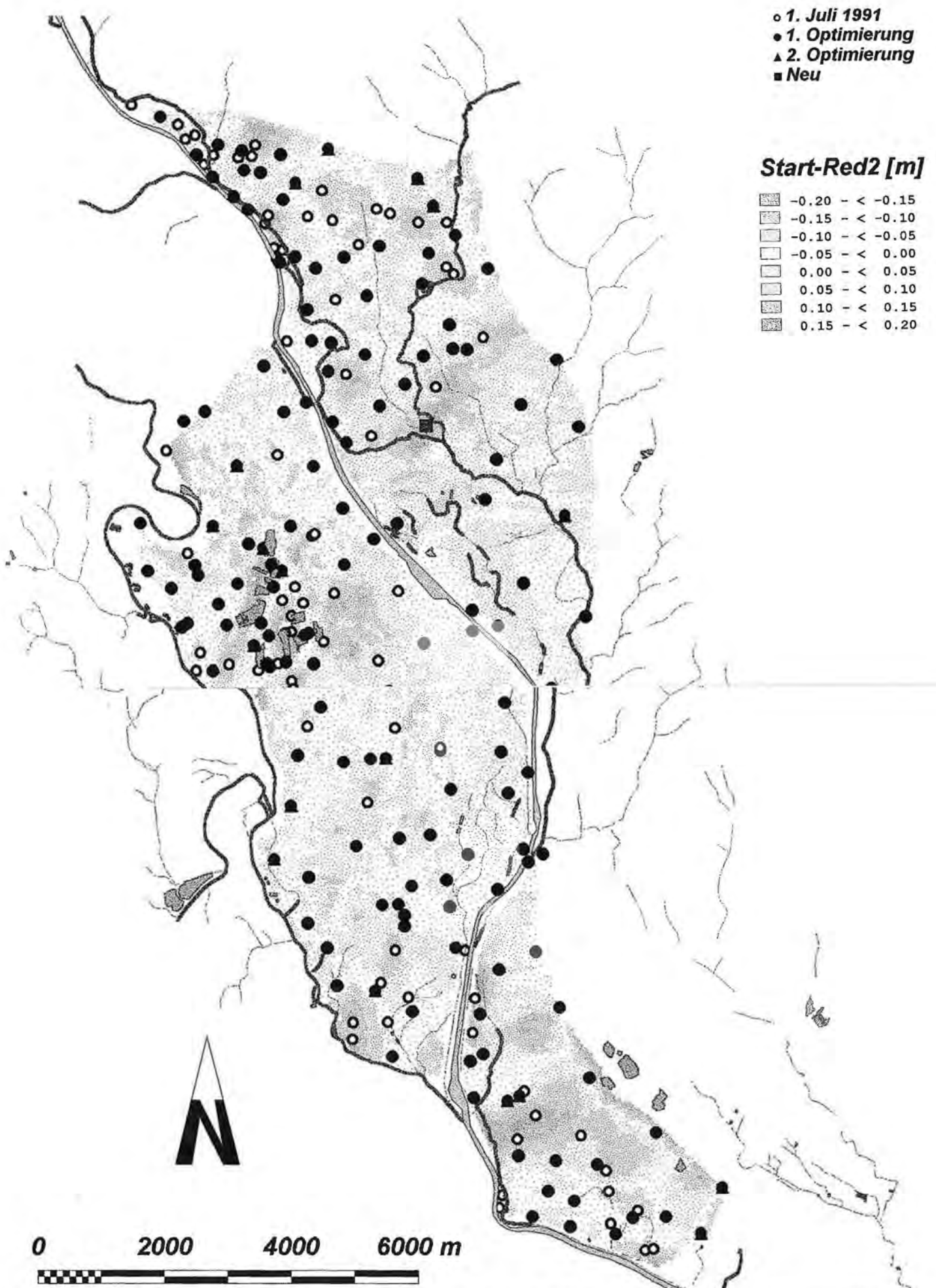
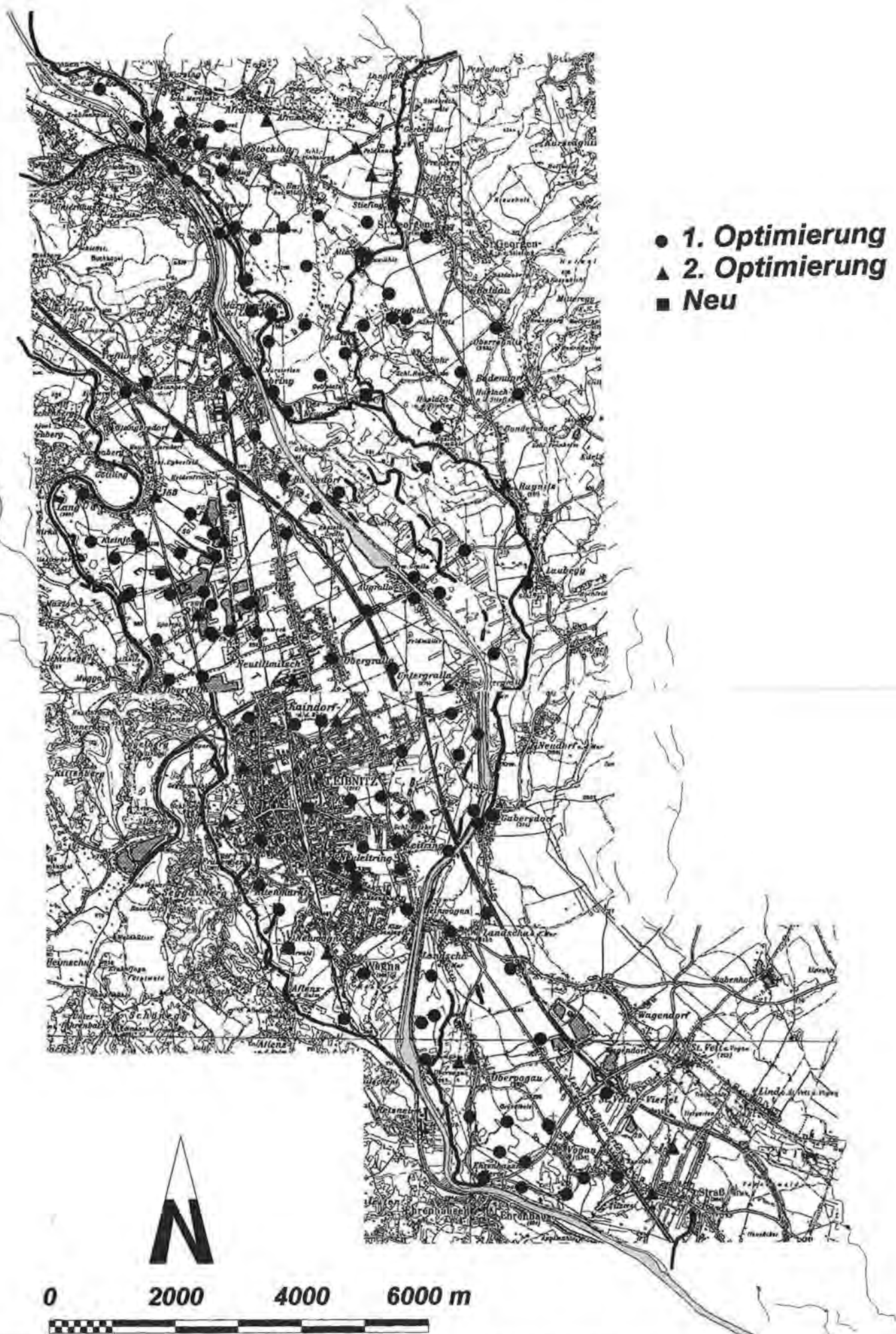


Fig. 14: Flächenhafte Verteilung der Differenzen zwischen dem Grundwasserisohypsenplan des Krigingstartmodells und dem Krigingmodell nach dem 2. Optimierungsschritt in den Teilgebieten des Leibnitzer Feldes. Berechnet als Differenz der  $50 \times 50$  m Gridelemente.  
 Areal distribution of the differences between the groundwater label obtained from the Kriging start model and the Kriging model after the 2<sup>nd</sup> optimization step in the different parts of the Leibnitzer Feld.



- 1. Optimierung
- ▲ 2. Optimierung
- Neu

ig. 15: Vorschlag für die Ausgestaltung eines räumlich optimierten Messnetzes zur flächenhaften Erfassung des Grundwasserspiegels.  
 Recommendation for setting up spatially optimum well network to determine groundwater table of an area.

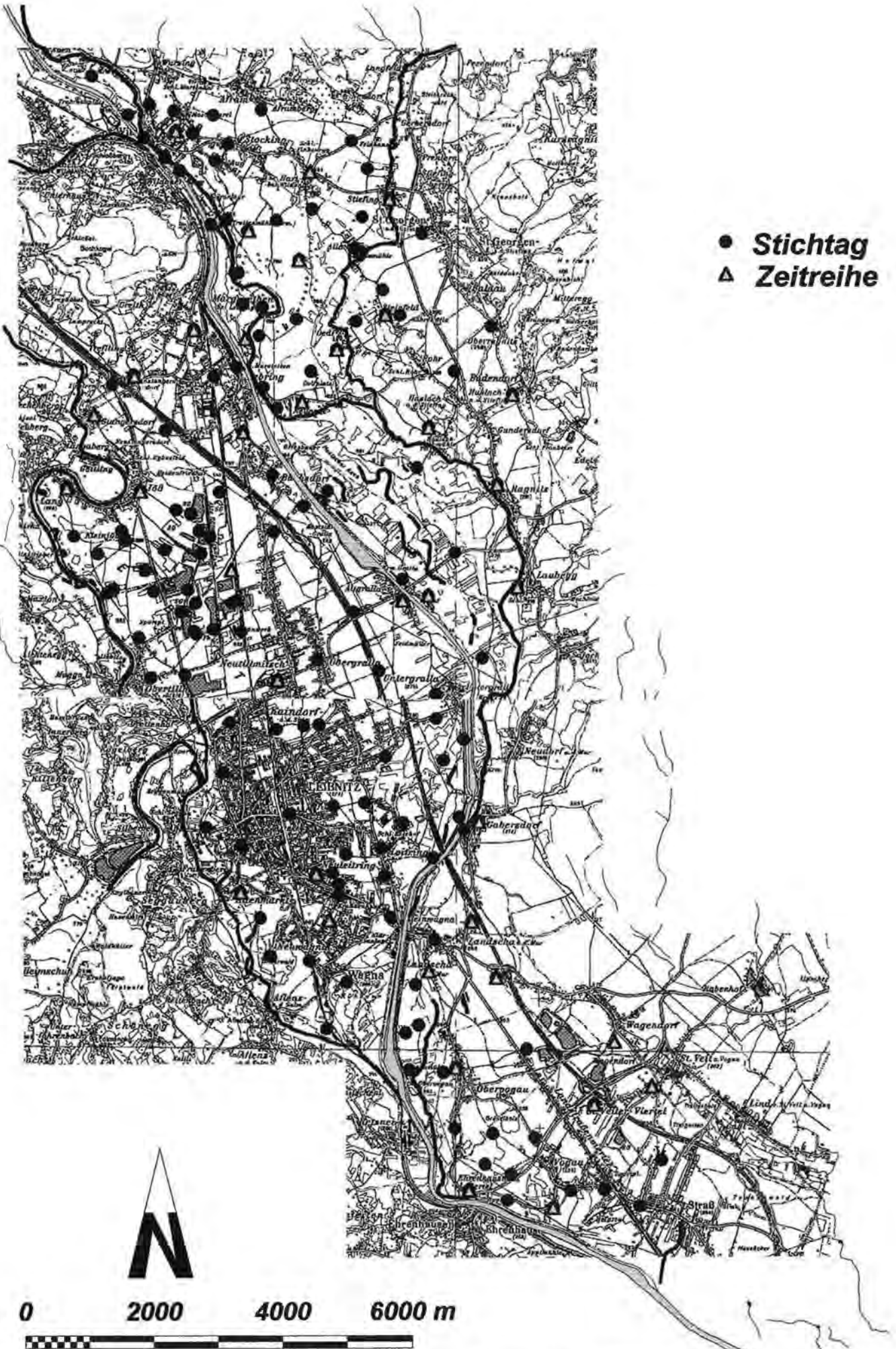


Fig. 16: Vorschlag für ein optimiertes Grundwasserbeobachtungsnetz im Leibnitzer Feld (zeitliche und räumliche Optimierung).  
 Recommendation for optimum groundwater monitoring network in the Leibnitzer Feld (time and spatial domain).

geringe Anzahl von Meßstellen aus dem Startmodell in das optimierte Modell zu übernehmen.

Die flächenhafte Verteilung der Differenzen der Grundwasserspiegellagen der Krigingschätzung nach dem zweiten Optimierungsschritt zu den Meßwerten vom 1. Juli 1991 (Fig. 14) zeigen tatsächlich, daß in allen Teilbereichen des Leibnitzer Feldes die Abweichungen zwischen Schätzung und Messung  $\leq \pm 0,20$  m sind. Die Residuen sind in den einzelnen Teilbereichen zufällig verteilt und zeigen keine Trends, die einen systematischen Fehler in der Schätzung erkennen ließen.

Für eine Schätzung des Grundwasserspiegels in den Teilgebieten des Leibnitzer Feldes wurden unter der Verwendung der aus der experimentellen Variographie ermittelten Krigingparameter und Suchkriterien von den vorhandenen 302 beobachteten Meßstellen nur 180 (siehe Fig. 15) verwendet, wobei der Fehler zwischen den beobachteten Spiegellagen und den geschätzten an allen Meßstellen in einem Bereich zwischen  $-0,20$  und  $+0,20$  m verblieb. Bei einer Reduktion des Meßnetzes auf etwa 60 % konnte in diesen Gebieten eine nur geringfügige Verringerung der Aussagegenauigkeit festgestellt werden.

## 5. Ergebnisse

In der vorliegenden Arbeit wird ein Verfahren vorgestellt, um unter Verwendung der Ergebnisse der statistischen Bearbeitung von Grundwasserstandsdaten und deren hydrogeologischer Interpretation eine optimalen Verteilung der Grundwassermeßstellen zu erreichen. In Fig. 16 sind die Ergebnisse der Optimierung des Grundwasserstandsmeßstellennetzes nach räumlicher Verteilung und nach dem Beobachtungsintervall für das Grundwassergebiet „Leibnitzer Feld“ zusammenfassend dargestellt.

Das vorgeschlagene optimierte Meßstellennetz basiert auf der Vorstellung, daß zur Erfassung des zeitlichen Verhaltens des Grundwasserspiegels eine intensive Meßtätigkeit an ausgewählten repräsentativen Beobachtungspunkten ausreichend ist. Diese vorgeschlagenen repräsentativen Meßpunkte sind in Fig. 16 als Zeitreihe bezeichnet. Für die übrigen Meßstellen des gesamten Leibnitzer Feldes werden Transferfunktionen ermittelt, die es ermöglichen, die Grundwasserspiegellage aus den Messungen an ausgewählten repräsentativen Meßstellen und aus vorangegangenen Messungen an der gesuchten Beobachtungsstelle zu berechnen und den dadurch entstehenden Schätzfehler zu beurteilen.

Aus dem Bereich der Geostatistik wurde nach dem Vergleich unterschiedlicher Interpolationsmethoden die allgemein anerkannte Methode der Krigingschätzung verwendet, um die Spiegellagen zu interpolieren und eine Überprüfung der räumlichen Optimierung des Meßnetzes durchführen zu können.

Besonderes Gewicht erhält in diesem Zusammenhang die Variographie, d. h. die experimentelle Ermittlung von Variogrammen anhand der zur Verfügung stehenden Daten und die Anpassung von Modellvariogrammen, deren Parameter ermittelt werden. Durch das Gefälle des Grundwasserspiegels in eine bevorzugte Richtung in Abhängigkeit von der generellen Fließrichtung des Grundwassers ist das „Ordinary Kriging“-Schätzverfahren aus statistischer Sicht nicht immer anwendbar. Diese Driftkomponente wird durch die Anwendung von „Universal Kriging“ berücksichtigt. Von besonderer Bedeutung ist dabei, daß sowohl die Variographie als auch die



Ermittlung der Krigingparameter und der Suchkriterien für einzelne Teilgebiete eines Grundwassergebietes – wenn eindeutige Trennlinien vorhanden sind – getrennt durchzuführen sind. Die räumliche Optimierung des Messstellennetzes wurde unter Zuhilfenahme der Kreuzvalidierung durchgeführt.

Dieses Verfahren bedingt, daß bei einer sehr dichten Messstellenverteilung weggelassene Stützstellen durch eng benachbarte mit geringen standardisierten Differenzen geschätzt werden.

Dieser erste Optimierungsschritt führt also in jenen Bereichen mit dichtem Messstellennetz zu relativ großen Abweichungen. Der zweite Optimierungsschritt hinsichtlich der räumlichen Verteilung der Grundwassermessstellen im Leibnitzer Feld bestand daher in einer Überprüfung der Daten aus der Kreuzvalidierung und deren Parameter, andererseits in einer Auswahl zusätzlicher Messstellen im Vergleich zum ersten Optimierungsschritt in einem „trial and error“-Verfahren. Mit den Spiegellagen an den ausgewählten Messstellen wurde unter Verwendung der ermittelten Parameter eine neuerliche Krigingschätzung durchgeführt und die Residuen sowie die Griddifferenzen zum Krigingstartmodell ermittelt und dargestellt. Trotz einer Reduktion des Messstellennetzes im gesamten Leibnitzer Feld auf etwa 65 % konnte der Grundwasserspiegel mit einem Fehler von weniger als  $\pm 0,20$  m gegenüber dem Ausgangsmodell geschätzt werden.

In Fig. 17 ist das Ablaufschema für die Optimierung von Grundwasserstandsmeßstellennetzen dargestellt. Durch die Überprüfung des Modells der zeitlichen Optimierung mit Hilfe des „transfer function models“ unter Einbeziehung der Stichtagsmessungen im räumlich optimierten Modell ist gewährleistet, daß eventuelle Veränderungen der naturräumlichen Rahmenbedingungen erfaßt werden.

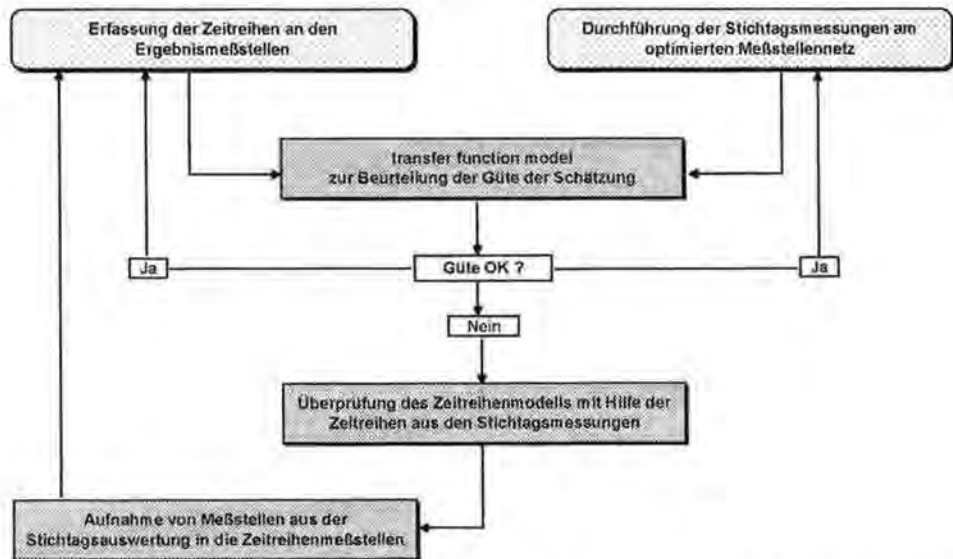


Fig. 17: Ablaufschema zur Überprüfung der Gültigkeit der Ergebnisse der zeitlichen Optimierung eines vorhandenen quantitativen Grundwasser-Monitoringnetzes.  
Schematic flow chart to test the validity of results of the optimization in time domain in an existing quantitative groundwater monitoring network.

## Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit diskutiert Methoden zur Optimierung von Grundwasser-Monitoringnetzwerken, die auf statistischen Verfahren und der hydrogeologischen Interpretation beruhen. Figur 16 zeigt das zeitlich und räumlich optimierte Meßstellennetz im Leibnitzer Feld.

Die erarbeitete optimierte Meßstellenverteilung basiert auf der Vorstellung, daß ein intensives Meßprogramm an charakteristischen Meßstellen ausreicht, das Verhalten des Grundwasserspiegels in seiner zeitlichen Entwicklung zu beschreiben. Diese Pegel sind in Fig. 16 als „Zeitreihe“ bezeichnet. Für alle übrigen Beobachtungsstellen im Leibnitzer Feld wurden Transferfunktionen ermittelt, die eine Schätzung des Grundwasserspiegels auf der Basis der Daten der charakteristischen Meßstellen und der zurückliegenden Meßdaten der weggelassenen Meßstellen erlauben. Die Residuen aus der Schätzung wurden zur Beurteilung der Güte herangezogen.

Im Vergleich zu anderen räumlichen Interpolationsverfahren wie Triangulation oder inverse Distanzenmethode ist Kriging das geeignetste Verfahren, den Grundwasserspiegel zu schätzen und das dazu notwendige Meßnetz in seiner räumlichen Ausprägung zu optimieren. Kriging basiert auf der Strukturanalyse des Untersuchungsgebietes, die auf der Erstellung von empirischen und der Berechnung theoretischer Variogramme beruht. Aufgrund eines starken Drifteffekts von N nach S muß anstelle von „Ordinary Kriging“ „Universal Kriging“ verwendet werden, wobei dieser Drift berücksichtigt werden kann. Wichtig ist, daß die Kriginginterpolation, die Suchstrategie und Berechnung der Variogramme für homogene Teilbereiche im gesamten Untersuchungsgebiet getrennt durchgeführt werden muß. Das Optimierungsverfahren für die räumliche Optimierung wurde unter Zuhilfenahme der Kreuzvalidierung durchgeführt.

## Literatur

- ABRAHAM, B. & J. LEODOLTER, (1983): *Statistical Methode for Forecasting*.— 190 S., New York (John Wiley & Sons).
- AMT DER STEIERMÄRKISCHEN LANDESREGIERUNG (1993): *Auswahl charakteristischer Grundwassermeßstellen in den Grundwasserfeldern der Steiermark (auf der Basis der Grundwassermessungen von 1965 bis 1991)*.— Unveröff. Bericht, Amt der Steiermärkischen Landesregierung, 256 S., Graz.
- ANDERBERG, M. R. (1973): *Cluster Analysis for Applications*.— 359 S., New York/San Francisco/London (Academic Press).
- ARBEITSKREIS GRUNDWASSERNEUBILDUNG DER FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE DER DEUTSCHEN GEOLOGISCHEN GESELLSCHAFT (1977): *Methoden zur Bestimmung der Grundwasserneubildungsrate*.— *Geologisches Jahrbuch, Reihe C* 19, 98 S., Hannover (Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung).
- BOX, G. E. P. & G. M. JENKINS (1976): *Time Series Analysis, Forecasting and Control*.— 238 S., San Francisco (Holden-Day).
- CHATFIELD, C. (1982): *Analyse von Zeitreihen*.— 239 S., München/Wien (Carl Hanser Verlag).
- CLARK, I. (1979): *Practical Geostatistics*.— 129 S., London (Applied Science Publisher).
- CRESSIE, N. (1992): *Statistics for spatial data*.— 900 S., New York/Chichester (John Wiley and Sons).
- DAVIS, B. M. (1987): *Uses and abuses of cross-validation in geostatistics*.— *Mathematical Geology*, 19, 241–248.
- DRAPER, N. & H. SMITH, (1976): *Applied Regression Analysis*.— 709 S., New York/Chichester/Singapore (John Wiley & Sons).

- DREHER, J. E., F. PRAMBERGER & H. REZABEK, (1985): Faktorenanalyse – eine Möglichkeit zur Ermittlung hydrographisch ähnlicher Bereiche in einem Grundwassergebiet.– Mitteilungsblatt des hydrographischen Dienstes in Österreich, **54**, 1–12, Wien.
- DURBIN, J. & G. S. WATSON (1951): Testing for Serial Correlation in least squares regression.– *Biometrika*, **38**, 159–178.
- FANK, J. (1992): Bilanzierung im Grundwasser.– Vortrag im Rahmen des ÖWWV-Seminars „Hydrogeologie und Wasserwirtschaft“ am 23. und 24. Juni 1992, Graz.
- FANK, J., K. FUCHS & U. KLEB (1993): Optimierung des Grundwassermessstellennetzes im Leibnitzer Feld. Teil 1: Zeitreihenanalyse und geostatistische Methoden.– Unveröff. Bericht der JOANNEUM RESEARCH Forschungsgesellschaft mbH, Inst. für Geothermie und Hydrogeologie und Inst. für Angewandte Statistik, 71 S., 1 Anhang, Graz.
- FANK, J., A. JAWECKY, H. P. NACHTNEBEL & H. ZOJER (1993): Hydrogeologie und Grundwassermodell des Leibnitzer Feldes.– *Berichte der wasserwirtschaftlichen Planung*, **74/I**, **74/II**, 1–255, Anhang A–I, 90 Abb., 119 Tab., 35 Kartenbeil., Amt der Steiermärkischen Landesregierung – Wasserwirtschaft und Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft – Wasserrwirtschaftskataster, Graz/Wien.
- FANK, J. & T. HARUM (1994): Solute transport and water movement in the unsaturated zone of a gravel filled valley: Tracer investigations under different cultivation types.– In: SOVERI, J. & T. SUOKKO (Hrsg., 1994): *Future Groundwater Resources at Risk (Proceedings of the Helsinki Conference, June 1994)*.– IAHS Publ., **222**, 341–354, Great Yarmouth (Galliard Ltd).
- FLURY, B. & H. RIEDWYL, (1983): *Angewandte multivariate Statistik*.– 187 S., Stuttgart/New York (Gustav Fischer Verlag).
- FUCHS, K. (1995): *Statistische Methoden zur Strukturanalyse raum-/zeitbezogener Umweltdaten*.– Diss. TU Graz, 107 S., Graz.
- FUCHS, K., U. KLEB & J. FANK (1994): Optimization of the groundwater observation well network „Leibnitzer Feld“.– In: SOVERI, J. & T. SUOKKO (Hrsg., 1994): *Future Groundwater Resources at Risk (Proceedings of the Helsinki Conference, June 1994)*.– IAHS Publ., **222**, 221–229, Great Yarmouth (Galliard Ltd).
- FUCHS, K., M. HUSSAIN & J. FANK, (1995): Optimization of an observation well network for monitoring groundwater level using statistical methods.– In: IAHS (1995): *Groundwater Quality: Remediation and Protection (Proceedings of the Prague Conference, May 1995)*.– IAHS Publ., **225**, 211–219, Great Yarmouth (Galliard Ltd).
- GOLDEN SOFTWARE, INC. (1994): *SURFER for Windows. Users's Guide*.– 546 S., Golden, Colorado.
- HARTUNG, J. & B. ELPET (1986): *Multivariate Statistik: Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik*.– 2. Aufl., 815 S., München/ Wien (Oldenburg Verlag).
- HIRSCH, R. M., J. R. SLACK & R. A. SMITH, (1982): Techniques of trend analysis for monthly water quality data.– *Wat. Resour. Res.*, **18** (1), 107–121.
- ISAAKS, E. H. & R. M. SRIVASTAVA (1989): *An Introduction to Applied Geostatistics*.– 561 S., New York (Oxford University Press).
- JOURNEL, A. G. & Ch. J. HUIJBREGTS (1978): *Mining Geostatistics*.– 600 S., London/New York (Academic Press).
- KLEINBAUM, D. G., L. L. KUPPER & K. E. MULLER (1988): *Applied Regression Analysis and other Multivariable Methods*.– 718 S., Boston (PWS-Kent Publ. Co).
- LEE, D. T. & B. J. SCHACHTER (1980): Two Algorithms for Constructing a Delaunay Triangulation.– *Intern. Journal of Computer Sciences*, **9** (3), 219–242.
- MAHLER, H. K. (1986): *Anwendung der Cluster- und Faktorenanalyse in der Grundwasserwirtschaft*.– Diplomarbeit am Inst. für Hydraulik, Gewässerkunde und Wasserwirtschaft der TU Wien, Wien.
- NACHTNEBEL, H. P. (Gesamtprojektleiter, 1994): *Hydrologie Österreichs – Schutz des Grundwassers in Tal- und Beckenlagen*.– Unveröff. zusammenfassender Endbericht in 4 Bd., Univ. für Bodenkultur, Wien.
- SCHLICH, P. & E. GUICHARD (1989): Selection and classification of volatile compounds of apricot using the RV coefficient.– *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, **37** (1), 142–150.

- SCHLICH, P., S. ISSANCHOU, E. GUICHARD, P. ETIEVANT & J. ADDA (1987): RV coefficient: a new approach select variables in PCA and to get correlations between sensory and instrumental data.— In: MARTENS, M., G. A. DALEN & H. RUSSWURM Jr. (Hrsg., 1987): *Flavour Science and Technology*.— 469–474, Chichester (Wiley & Sons).
- SEEBER, G. A. & C. J. WILD (1989): *Nonlinear Regression*.— 768 S., New York/Toronto/Singapore (Wiley & Sons).
- SOPHOCLEOUS, M., J. E. PASCHETTO & R. A. OLEA (1982): Groundwater network design for Northwest Kansas using the theory of regionalized variables.— *Groundwater*, 20 (1), 48–58.
- STEPHENSON, S. (1938): The inverted Factor technique.— *Britisch J. Psychol.*, 26 (4), 334–361.
- VAN BELLE, G. & J. P. HUGHES (1984): Nonparametric tests for trend in water quality.— *Wat. Resour. Res.*, 20 (1), 127–136.

## Summary

This paper discusses procedures to optimize a groundwater well network based on statistical procedures and their hydrogeological interpretation. Figure 16 shows the optimized well network Leibnitzer Feld in the time and space domain.

The proposed optimized well network bases on the idea that an intensive measurement program performed at several characteristic wells is sufficient to record the behaviour of the groundwater surface table in the time domain. These representative wells are labeled "Zeitreihe" in fig. 16. For the other wells of the Leibnitzer Feld transfer functions are calculated, which allow the estimation of the groundwater level using the data of the characteristic wells and the past data of the wells, not taken into account. The residuals are used to diagnose the estimation.

Compared to other spatial estimation procedures like triangulation or inverse distance method, kriging seems to be the best to estimate the groundwater surface level and to optimize the well network in the spatial domain. Kriging is based on the evaluation of the spatial distribution, which can be determined calculating empirical and theoretical variograms. As there is a strong drift effect from north to south, universal kriging, which takes this drift into account, is used instead of ordinary kriging. It is important to note that the search strategy and the variogram calculation have to be determined separately, if the whole region has to be divided into homogeneous subregions. Spatial optimization is performed using cross validation.

## Dank

Die Anregung zu diesem Projekt und dessen Finanzierung kam von den Referaten I-Hydrographie und II-Wawi. Plg-WV der Fachabteilung IIIa des Amtes der Steiermärkischen Landesregierung und vom Hydrographischen Zentralbüro (Referat Unterirdisches Wasser) im Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft. Für die fachliche und finanzielle Unterstützung sei diesen Institutionen und im Besonderen Herrn MR Dr. F. PRAMBERGER, Herrn Univ. Doz. Dr. H. ZETINIGG und Frau Mag. B. STROMBERGER herzlichst gedankt.