



JR-AquaConSol
ein Unternehmen der JOANNEUM RESEARCH

ISOSCAPES SCHWEIZ



GRAZ, 31.12.2023

Im Auftrag des Bundesamtes für Umwelt (BAFU)

Impressum

Auftraggeber: Bundesamt für Umwelt (BAFU), Abteilung Hydrologie, CH-3003 Bern. Das BAFU ist ein Amt des Eidg. Departements für Umwelt, Verkehr, Energie und Kommunikation (UVEK)

Auftragnehmer: JR-AquaConSol GmbH, Steyrergasse 21, 8010 Graz/Österreich

Autor/Autorin: Christian Reszler, Valentina Pelzmann, Albrecht Leis

Begleitung BAFU: Marc Schürch, Michael Sinreich

Hinweis: Diese Studie/dieser Bericht wurde im Auftrag des Bundesamtes für Umwelt (BAFU) verfasst. Für den Inhalt ist allein der Auftragnehmer verantwortlich.

Kurzfassung

Die Studie hatte das Ziel, ein Modell für räumliche Muster der Isotopengehalte im Niederschlag (Isoscapes) für die Schweiz zu entwickeln. Dabei wurde ein Tool erstellt, das Isoscapes in hoher räumlicher Auflösung (500 m) unter Berücksichtigung geographischer und klimatischer Variablen generiert. Das Tool besteht aus einer Mehrfachregression, bei welcher die Variablen ausgewählt werden können und einer nachgeschalteten Interpolation der Residuen mit Ordinary Kriging. Aus der Testung mehrerer Varianten anhand einer Kreuzvalidierung ging die Variante unter Verwendung der topographischen Variablen zusammen mit den monatlichen Niederschlagssummen als Zusatzinformation (Methode „GEO+N“) als beste Methode hervor. Die Fehleranalysen zeigten allerdings gewisse regionale Unterschiede in der Modellgüte. Während im Norden der Schweiz sehr gute Ergebnisse erzielt wurden, traten insbesondere im Osten der Schweiz, im Wallis und im Tessin höhere Fehler auf. Es wird daher empfohlen, die Stationsdichte in diesen Bereichen etwas zu erhöhen.

Das aktuelle Modell wurde für den Zeitraum 2007 bis 2020 entwickelt und liefert monatliche Rasterdaten der Isotopengehalte im Niederschlag in 500 m Auflösung für die Jahre 2013 und 2020. Es ist flexibel und kann jederzeit auf andere Zeiträume oder Regionen erweitert werden und ermöglicht bei Bedarf außerdem die Einbeziehung zusätzlicher Stationen oder Klimavariablen aus anderen Ländern.

Zur zusätzlichen Validierung der berechneten Isoscapes wurden Einzugsgebietsgrenzen von 50 ausgewählten Quellen- und Brunneneinzugsgebieten herangezogen. Dabei zeigte sich, dass die Isotopenkonzentrationen der in den unterschiedlichen EZG gebildeten Grundwässer durch die Isoscapes meist gut abgebildet werden. Abweichungen finden sich insbesondere in Flusstälern, die von Flüssen mit hoch reichenden Einzugsgebieten durchflossen werden. Hier treten durch partielle Interaktion des Grundwassers mit dem Flusswasser teilweise größere Unterschiede auf.

Exemplarisch wurde außerdem die Möglichkeit der Anwendung der Isoscapes zur Generierung von Input-Funktionen für Modelle zur Abschätzung von Verweilzeiten bzw. Fließzeiten des Grundwassers untersucht.

Der Anhang des Berichtes enthält einen Überblick über bisherige Präsentationen und Publikationen der Projektergebnisse.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	2
Inhaltsverzeichnis	3
Abbildungsverzeichnis	5
Tabellenverzeichnis	7
1 Einleitung	8
1.1 Ziel des Projekts	8
1.2 Forschungsstand	8
1.3 Vorgangsweise	11
2 Datenlage	12
2.1 Modellgebiet und Messstationen	12
2.2 Zusatzdaten	14
2.3 Manuelle Datenprüfung	14
3 Methodik	16
3.1 Modellbeschreibung	16
3.1.1 Pre-Processing	16
3.1.2 Automatisierte Datenprüfung	17
3.1.3 Abfolge der Berechnungen im Script	17
3.2 Verwendete Regressionsvarianten („Methoden“)	20
4 Ergebnisse	22
4.1 Plausibilitätsprüfung	22
4.2 Analyse der Residuen aus den Mehrfachregressionen	23
4.3 Ergebnisse der Kreuzvalidierung – Auswahl der „besten“ Methode	23
4.3.1 Auswirkung der Residueninterpolation	24
4.3.2 Auswertung nach Stationen	26
4.3.3 Auswertung nach Monaten	31
4.3.4 Schlussfolgerungen aus den Auswertungen für die Auswahl der „besten“ Methode	34
4.4 Detailanalyse der Ergebnisse der gewählten Methode	36
4.4.1 Darstellung und Analyse der statistischen Fehlermaße	36
4.4.2 Vergleich mit Ergebnissen aus der Literatur	38
4.5 Ergebnisse der Deuterium - Berechnung	40
4.6 Validierung der Isoscapes an Quellen- und Brunnenmessungen	43
4.7 Beispiele von Verweilzeitberechnungen mit den monatlichen Isoscapes	47
5 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	48

6	Literaturverzeichnis.....	50
7	Anhang	51
7.1	Flussdiagramm im R-Skript.....	51
7.2	Vergleichsgraphiken der drei besten Methoden in den Ausgabe-Jahren.....	54
7.2.1	Ausgabe-Jahr 2013.....	55
7.2.2	Ausgabe-Jahr 2020.....	67
7.3	Publikationen.....	79

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Übersichtskarte über das Modellgebiet (rot eingerahmt) mit allen verfügbaren Stationen.	12
Abbildung 2: Beispiel einer Gegenüberstellung des Datenverlaufs von ^{18}O Werten bei verschiedenen Stationen.	15
Abbildung 3: Gegenüberstellung des Datenverlaufs von ^{18}O -Werten an den Stationen Pontresina (CH) und Obergurgl (AT).	15
Abbildung 4: Beispiele einer manuellen / visuellen Prüfung der Streuung anhand der Gegenüberstellung mit der Seehöhe der Station. Rot: Stationen der Schweiz; blau: Stationen außerhalb. Abkürzungen der Stationsnamen siehe Tabelle 1).	16
Abbildung 5: Mittlere Korrelationskoeffizienten bei einer Regression nur mit einer geographischen Variable unter Verwendung der verfügbaren Stationen im Zeitraum 2007-2013.	20
Abbildung 6: Mittleren Absolutbeträge der Residuen aus den Mehrfachregressions-Varianten, über alle verwendeten Stationen gemittelt, für die Ausgabe-Jahre 2013 (links) und 2020 (rechts).	23
Abbildung 7: Statistische Größen der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).	25
Abbildung 8: Statistische Größen der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).	26
Abbildung 9: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 aller Schweizer Stationen.	28
Abbildung 10: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 der Stationen in Frankreich, Deutschland und Österreich. Die Ergebnisse von Haiming (HAI) sind aufgrund geringer Datenverfügbarkeit nicht aussagekräftig.	28
Abbildung 11: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 aller Schweizer Stationen. Die Ergebnisse von Pontresina_neu (PO2) sind aufgrund geringer Datenverfügbarkeit nicht aussagekräftig.	29
Abbildung 12: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 der Stationen in Frankreich, Deutschland und Österreich.	29
Abbildung 13: Ganglinie der gemessenen und durch Kreuzvalidierung gerechneten ^{18}O -Werte und des d-Exzesses der gemessenen Werte an vier beispielhaft ausgewählten Stationen der Schweiz im Zeitraum 2012-2020.	31
Abbildung 14: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 aller Stationen nach Monaten.	32
Abbildung 15: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 aller Stationen nach Monaten.	33
Abbildung 16: Ranking der Varianten der Variablenkombinationen unter der Verwendung der Kreuzvalidierung anhand der MAE in % für die Zeiträume 2007-2013 und 2014-2020.	33
Abbildung 17: Ranking der Varianten der Variablenkombinationen unter der Verwendung der Kreuzvalidierung anhand der MAE in % für die Jahre 2013 und 2020.	34

Abbildung 18: Einfluss des Niederschlags auf die ¹⁸ O-Muster am Beispiel Dezember 2013: ¹⁸ O-Verteilung aus der Methode „GEO“ (links) und Verteilung der Monatssumme des Niederschlages (rechts).....	35
Abbildung 19: Korrelation der MAE der Kreuzvalidierung der Methode „GEO+N“ mit dem Monatsniederschlag als Mittel über alle Stationen.	38
Abbildung 20: Vergleich der Fehlermaße (MAE) für Sauerstoff-18 zwischen dem im vorliegenden Projekt gewählten Modell („GEO+N“) und aus dem globalen Modell PISO.AI von Nelson et al. (2020). Es wurden Stationen herangezogen, die für die Entwicklung von PISO.AI nicht verwendet wurden.....	39
Abbildung 21: Gemeinsame Darstellung der Muster von Giustini et al. (2016) für Italien und der, mit der Methode „GEO+N“, berechneten, niederschlagsgewichteten Isoscapes für die Schweiz im Zeitraum 01/2007 bis 12/2012. Beides für Sauerstoff-18.....	40
Abbildung 22: Statistische Größen der Kreuzvalidierung der ² H-Isotopenwerte mit Residueninterpolation im Zeitraum 2007-2013 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).	41
Abbildung 23: Statistische Größen der Kreuzvalidierung der ² H-Isotopenwerte mit Residueninterpolation im Zeitraum 2014-2020 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).	42
Abbildung 24: Ganglinie der gemessenen und durch Kreuzvalidierung gerechneten ² H-Werte vier beispielhaft ausgewählten Stationen der Schweiz im Zeitraum 2012-2020.....	43
Abbildung 25: Vergleich der Mittelwerte der ¹⁸ O-Gehalte im Jahr 2013 an ausgewählten Quellen mit den gewichteten Mitteln über ein Jahr (links) und sieben Jahre (rechts) aus den Isoscapes.	44
Abbildung 26: Validierung anhand der Differenz zwischen Quellen- und Brunnenmessungen und einzugsgebietsgemittelten Rasterwerten aus den Isoscapes. Meist werden die Messwerte unterschätzt (orange und rot), in wenigen Fällen überschätzt (blau). Zur besseren Lesbarkeit sind die EZGs vergrößert abgebildet und nur jene namentlich gekennzeichnet, die außerhalb des geringen Differenzbereiches von -1 bis 1‰ liegen (weiß). Im Hintergrund dargestellt ist das N-gewichtete Mittel der monatlichen ¹⁸ O-Raster im Zeitraum 09/07 bis 09/13.	46
Abbildung 27: Abschätzung der Verweilzeit im Brunneneinzugsgebiet "NTG43 - Monthey – Boeuferrant" durch die „Sinus-Fit“-Methode. Für den Niederschlags-Sinus-Fit wurden die einzugsgebietsgemittelten monatlichen Isoscapes herangezogen.....	47
Abbildung 28: Flussdiagramm der Dateneingabe und –aufbereitung (Teil 1).	51
Abbildung 29: Flussdiagramm der Dateneingabe und –aufbereitung (Teil 2).	51
Abbildung 30: Flussdiagramm: Monatliche Regression und Residueninterpolation (Teil 1).	52
Abbildung 31: Flussdiagramm: Monatliche Regression und Residueninterpolation (Teil 2).	53

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Verwendete Messstationen im Modellgebiet. Die Stationen wurden mit einem Kürzel (Code) belegt, um sie in den Karten besser bezeichnen zu können.	13
Tabelle 2: Beschreibung der getesteten Methoden (Regressionsvarianten).	21
Tabelle 3: Verfügbarkeit der Isotopen-Messwerte an Schweizer Stationen für die Jahre 2013 und 2020.....	22
Tabelle 4: Mittleren Absolutwerte der Abweichungen (MAE) für die Schweizer Stationen für die Vergleichszeiträume 2007–2013 und 2014–2020.....	30
Tabelle 5: Gegenüberstellung der statistischen Fehlermaße der Kreuzvalidierung der gewählten Methode in den beiden Ausgabenjahren nach Monaten. Zusätzlich ist der Nugget-Wert der Residueninterpolation und die verbleibende Differenz zu den Messwerten an den Stationen (kein Weglassen einer Station) eingetragen.....	36
Tabelle 6: Mittelwerte der Interpolationsfehler aus der Kreuzvalidierung betreffend Sauerstoff-18 (¹⁸ O).	48
Tabelle 7: Mittelwerte der Interpolationsfehler aus der Kreuzvalidierung betreffend Deuterium (² H).	49

1 Einleitung

1.1 Ziel des Projekts

Die Internationale Atomenergiebehörde IAEA begann 1953 das weltweite Messnetz zur Beobachtung der stabilen Isotope im Niederschlag GNIP (Global Network of Isotopes in Precipitation) aufzubauen, um auf der Grundlage isopenhydrologischer Untersuchungen einen verbesserten Einblick in die vielfältigen Prozesse und die Dynamik des Wasserkreislaufs zu erhalten. Nationale Messnetze wie das schweizerische Isotopenmessnetz NAQUA ISOT tragen mit ihren Daten wesentlich zu diesen weltweiten Messnetzen bei. Gerade im alpinen Raum gibt es starke lokale Variationen des Isotopensignals im Niederschlag. Bedingt wird dies vor allem durch den ausgeprägten Höheneffekt im alpinen Raum und durch das Aufeinandertreffen von Luftmassen unterschiedlicher Herkunft. Lokale Bedingungen, die das Isotopensignal im Niederschlag maßgeblich beeinflussen, sind noch nicht vollständig verstanden, wären aber zur Charakterisierung des hydrologischen Kreislaufs eine wichtige Voraussetzung. Von besondere Bedeutung ist in diesem Zusammenhang ein verbessertes Verständnis der flächenhaften Verteilung des Isotopensignals im Niederschlag. Des Weiteren können die stabilen Isotope des Wassermoleküls als natürliche Umweltindikatoren eingesetzt werden, um besser zu verstehen wie sich Extremwetterereignisse und klimabedingte Änderungen auf den Wasserkreislauf (vor allem hinsichtlich Grundwasserneubildung und Abflussgeschehen) auswirken, was gerade im alpinen Raum zur Verbesserung des Wassermanagements entscheidend ist.

Im Rahmen des vorliegenden Projektes werden flächenhafte Karten mit räumlich interpolierten Isotopendaten der Verteilung von Sauerstoff-18 und Deuterium im Niederschlag – sogenannte „Isoscapes“ – auf Monatsbasis für die Schweiz erstellt und validiert. Neben der Wahl geeigneter Interpolationsmethoden erfordert dies die Ermittlung der maßgeblichen meteorologischen und geographischen Einflussgrößen auf die Verteilung der Wasserisotope im Niederschlag unter Berücksichtigung regionaler und orographischer Unterschiede (z.B. Differenzierung Alpennord-/Südseite, Ost-/Westalpen). Im Speziellen sollen mögliche orographische Unterschiede im Isotopensignal zwischen Jura, Mittelland, Alpenvorland, inneralpinen Täler und Föhngebiete untersucht und charakterisiert werden.

1.2 Forschungsstand

Zur Ermittlung von Isoscapes werden meist empirische bzw. Mehrfachregressionsansätze anhand verschiedener topographischer oder meteorologisch/klimatischer Variablen eingesetzt. Nachgeschaltet ist oft eine räumliche Interpolation der Residuen der Regression durch geostatistische Methoden. Bowen und Wilkinson (2002) und Bowen und Revenaugh (2003) testeten einige dieser Ansätze auf Basis globaler Daten von langjährigen mittleren Isotopengehalten. Seitens der IAEA ist das globale Modell ISOGRIDS (Isotopic Gridded Rainfall Data Software) für langjährige Mittel basierend auf den Ansatz von Bowen und Wilkinson (2002) als open-source verfügbar. Im Konkreten sind zwei Ansätze implementiert:

$$(1) \delta^{18}\text{O}, \delta^2\text{H} = f(\text{LAT}, \text{LAT}^2, \text{ELE})$$

$$(2) \delta^{18}\text{O}, \delta^2\text{H} = f(\text{LAT}, \text{ELE}, \text{N}, \text{T})$$

LAT ist die geographische Breite, ELE die Seehöhe, N der Niederschlag und T die Lufttemperatur. Eine Residuen-Interpolation ist nachgeschaltet. Die angeführten Ansätze bilden mit einer Erweiterung um sogenannte gemischte Modelle, mit denen auch räumliche Autokorrelationen berücksichtigt werden

können, die fachliche Grundlage der frei verfügbaren Anwendungssoftware ISORIX (Courtiol et al., 2016; Courtiol und Rousset, 2017). Die beiden obengenannten Softwareprogramme sind vor allem für globale Anwendungen, auch in Gebieten mit wenigen Daten, geeignet.

Terzer et al. (2013) setzten für ein globales Modell zusätzlich zu den Regressionsansätzen auch Cluster-Methoden ein, um die Verteilung in den verschiedenen klimatischen Regionen besser zu erfassen. Die Residuen der Regression werden mittels Kriging interpoliert und das auf diese Weise entstandene Raster zu dem Regressionsraster addiert. Vergleichende Tests mit den reinen Regressionsansätzen mit global festgelegten Variablen ergaben Verbesserungen von über 67 %. Der mittlere RMSE (Root Mean Square Error) für langjährige Mittelwerte beträgt z.B. für ^{18}O rund 1.5 ‰. Die erstellten Muster sind als GeoTIFF-Raster von der IAEA Website beziehbar.

In einem lokaleren Maßstab testeten Kern et al. (2014) im alpinen Raum, einschließlich dem Gebiet der Schweiz, eine Regressionsmethode unter Berücksichtigung der saisonalen Unterschiede in der Seehöhenabhängigkeit der Isotopengehalte und unter Verwendung von Daten über die Höhe der atmosphärischen Grenzschicht, bis zu welcher die physikalischen Vorgänge direkt von der Oberfläche beeinflusst werden. Der Test erfolgte anhand monatlicher Werte aus den Jahren 1995-1996. Die Residuen wurden mit Ordinary Kriging auf der Rastergröße des Digitalen Geländemodells (100 m) interpoliert. Die Daten der atmosphärischen Grenzschicht lagen aber in einer deutlich kleineren Auflösung von $1^\circ \times 1^\circ$ vor. Die Ergebnisse zeigen eine starke Höhenabhängigkeit in den Sommer- und Wintermonaten in niedrigeren Regionen. In hohen Lagen ist sie gering, was auf den Einfluss von Schneefall zurückgeführt wird. Diesen Zusammenhang führten Kern et al. (2014) außerdem auf die atmosphärische Durchmischung zurück, die im Winter geringer und im Sommer deutlich höher ausfällt. Als weiteres Ergebnis identifizierten sie „kritische“ Bereiche in der Schweiz, in denen die berechneten Muster der Isotopengehalte höhere Unsicherheiten aufwiesen. Dies betrifft vor allem das Wallis und den Osten der Schweiz; in letzterer Region wurden Interpolationsfehler von 2 bis 4 ‰ bei Sauerstoff-18 ausgewiesen.

Während die Ansätze von Kern et al. (2014) und Terzer et al. (2013) auf der Interpolation der Residuen aus einer Regression mit bestimmten Einflussvariablen basieren, verfolgen Seeger und Weiler (2014) mit einer Interpolation auf Meeresspiegelhöhe einen unterschiedlichen Ansatz. Die Messwerte an den Stationen werden dabei über einen durchschnittlichen Gradienten des jeweiligen Monats auf Meeresspiegelniveau korrigiert. Die erhaltenen Werte werden mittels Kriging interpoliert. Staudinger et al. (2020) nutzten die Methode nach Seeger und Weiler (2014) für eine Ermittlung von monatlichen Isotopenwerten im Niederschlag für die Schweiz. Die erhaltenen Isotopengehalte im Niederschlag wurden mit Messdaten aus dem "CH-IRP-Datensatz" von Oberflächengewässern (23 Einzugsgebiete) verglichen. Mit einer mittleren Abweichung von 2 ‰ zwischen interpolierten Isotopenwerten im Niederschlag und den gemessenen Isotopenwerten in den Oberflächengewässern wurde die Methode als geeignet eingestuft, um die saisonale Variabilität abzubilden. Sie weisen aber auch im alpinen Raum mit steiler Topographie auf deutlich höhere Unsicherheiten hin.

In der Schweiz wurde zudem in einer sehr kleinräumigen Studie von Fischer et al. (2017) die räumliche Variabilität der Isotopengehalte im Niederschlag und deren Einfluss auf die Abflussganglinienseparation in einem kleinen Einzugsgebiet untersucht. Die erhobenen Daten beziehen sich auf Einzelereignisse, und ein Vergleich mit monatlichen Isotopendaten ist daher schwierig. Die Ergebnisse zeigten, dass auf Ereignisbasis die typischen Einflussgrößen auf die

Isotopengehalte im Niederschlag nicht mehr identifizierbar sind. Räumlich-zeitliches Rauschen aufgrund der komplexen atmosphärischen Bedingungen verhindert klare Aussagen z.B. über Seehöhengradienten.

In einer weiteren lokalen Studie untersuchten Kern et al. (2020) Höhen- und Kontinentaleffekte in den Isotopengehalten des Niederschlages im pannonischen Raum. Entlang von ausgewählten Längen- und Höhenschnitten wurden typische Gradienten für den Höheneffekt (-1.2 ‰ pro km für ^{18}O und -7.9 ‰ pro km für ^2H) und für den Kontinentaleffekt (-2.4 ‰ pro 100 km für ^{18}O und -20 ‰ pro 100 km für ^2H) identifiziert.

In Italien wurde von Giustini et al. (2016) das Modell von Bowen und Wilkinson (2002) angewandt. Es wurde die Regression mit der Seehöhe und der geographischen Breite verwendet. Auf Basis von verschiedenen, auch bisher unpublizierter Daten mit teilweise divergierenden Messzeiträumen (Daten bis 2012), wurde eine Karte von mittleren Isotopengehalten für Italien ermittelt. Darüber hinaus wurde eine regional unterschiedliche Dominanz der beiden Einflussfaktoren identifiziert. Ebenfalls unter Verwendung des Modells von Bowen und Wilkinson (2002) wurden im gesamten Mittelmeerraum von Lykoudis und Argiriou (2007) $10' \times 10'$ Raster von Isoscapes erstellt. Schrittweise wurden bei den Modellen unterschiedliche Regressionsansätze (linear und stufenweise linear) sowie unterschiedliche Ansätze zur Interpolation der Residuen getestet.

Neben den topographischen Variablen (Seehöhe, geographische Länge und Breite) verwendeten Liebminger et al. (2006) zusätzlich klimatische Variablen, wie Temperatur und relative Luftfeuchtigkeit, und ermittelten saisonale Modelle zur Mehrfachregression für Isoscapes in Österreich. Mit diesen saisonalen Ansätzen wurden die gemessenen Isotopengehalte gut wiedergegeben.

In einem kürzlich publizierten innovativen Ansatz nutzen Nelson et al. (2020) Maschinelles Lernen (Machine Learning) zur Erstellung von Isoscapes im europäischen Raum (GNIP-Daten). Beim Maschinellen Lernen werden Trainingsdaten genutzt, um die Beziehung zwischen Variablen und Ergebnis zu erlernen. Diese können, durch die Möglichkeit der Gruppierung von Variablen, auch nichtlinear sein. Eine Split-Sample Validierung dieses Modells ergibt für ^{18}O einen RMSE von 1.68 ‰ und für ^2H einen RMSE von 13.0 ‰. Ein Vorteil dieses AI-Ansatzes ist die Ausgabe der relativen Wichtigkeit bzw. Einflussstärke der verfügbaren Variablen (z. B. Geogr. Länge, Geogr. Breite, Seehöhe und Klimavariablen). Dabei traten beispielsweise Sättigungsdampfdruck und die monatliche Temperaturschwankung als zwei der wichtigsten Einflussvariablen hervor. Nelson et al. (2020) halten fest, dass durch das Einbeziehen mancher Variablen andere an Wichtigkeit verlieren, die bei Abwesenheit der erstgenannten Variablen als wichtiger eingestuft werden würden. Die Erkenntnisse der Variablenanalyse von Nelson et al. (2020) ist auch eine wichtige Basis für Auswahl von Variablen im vorliegenden Projekt. Die Ergebnisse dieses Modells in 0.5° räumlicher Auflösung (Anm.: würde im Bereich der Schweiz eine Gitterweite von rd. 46 km bedeuten), bezeichnet als „Piso.AI“, sind als Open-Source verfügbar.

1.3 Vorgangsweise

Im vorliegenden Projekt wurde folgende Vorgehensweise gewählt:

(1) Erhebung und Analyse der benötigten bzw. vorhandenen Daten:

Bei den Isotopendaten erfolgt eine Aufbereitung der Rohdaten, wenn notwendig, und eine Plausibilitätskontrolle im regionalen Vergleich. Eine Plausibilitätsprüfung und eine Bewertung der Datengüte ist von besonderer Bedeutung, da diese einen großen Einfluss auf die Interpolationsgüte besitzt. Letztendlich kann es auch günstiger sein, einen unplausiblen Monatswert an einer Station nicht zu berücksichtigen. Datengrundlage für Entwicklung und Validierung des gewählten Algorithmus sind die vorhandenen Deuterium- und Sauerstoff-18-Daten der NAQUA-ISOT Niederschlagsmessstellen und der angrenzenden GNIP-Stationen für den Zeitraum der zu erstellenden Isoscapes.

Bezüglich der Zusatzdaten wird in einem ersten Schritt abgeklärt, welche flächenhaften Datensätze (Höhenraster, Niederschlag in fester oder flüssiger Form, Lufttemperatur, etc.) verfügbar sind. Auch in diesem Fall ist die Verwendung von der Güte und Auflösung der vorhandenen Datensätze abhängig.

(2) Test verschiedener Interpolationsmethoden bzw. -modelle unter Verwendung unterschiedlicher regionaler Einflussgrößen:

Es erfolgt eine Testung von verschiedenen geostatistischen Methoden [z.B. Kriging (Pebesma und Wesseling, 1998; Pebesma 2004) oder distanzgewichtete Verfahren] kombiniert mit Mehrfachregressionsansätzen auf Basis der oben angeführten Informationen bzw. Daten, angelehnt an die Methodik in der Literatur (z.B. Terzer et al., 2013). Für die Verwendung sind aber nur jene Daten sinnvoll, die flächenhaft mit entsprechender Genauigkeit verfügbar sind. Wie im vorangegangenen Kapitel erwähnt, werden Informationen aus Nelson et al. (2020) über die wichtigsten Prädiktoren aus einer Vielzahl von möglichen Datenquellen in Europa genutzt. Die Testung erfolgt durch Kreuzvalidierung.

(3) Zusätzliche Validierung:

Als zusätzliche Validierung der Isoscapes dient ein Vergleich der aus den Karten herausgelesenen Isotopengehalte mit Messdaten von ausgewählten Grund- und Oberflächengewässern mit bekanntem Einzugsgebiet. Vor allem der Unterschied zwischen dem Wert am Standort der Messung und dem über das Polygon des Einzugsgebietes aggregierten Wert ist dabei von Interesse. Eine derartige Auswertung ist besonders wichtig, um Aussagen über die Verwendung der Isoscapes zur Ermittlung der „Inputfunktion“ in Niederschlag-Abflussuntersuchungen und -modellen auf Einzugsgebietsebene zu treffen.

(4) Empfehlungen über die Verdichtung des Messnetzes:

Die Güte der räumlich interpolierten Felder kann auch wertvolle regionsspezifische Aussagen darüber liefern, ob die Datenlage bzw. das derzeitige Messnetz ausreichend ist, um hydrogeologische Fragestellungen zu bearbeiten oder Modellierungen durchzuführen und auf diese Weise das bestehende Messnetz eventuell noch weiter zu optimieren.

Verarbeitet und gespeichert werden die interpolierten Daten als Rasterdatensatz, wobei die Rastergröße im Zuge der Datenerhebung und -analyse festgelegt wird. Sie hängt in erster Linie von der Anzahl der betrachteten Stationen bzw. von der Entfernung der Stationen zueinander und von der räumlichen Auflösung der Zusatzdaten ab. Datenzeitraum für die Ausgabe der Raster sind die

Kalenderjahre 2013 und 2020. Zur Modellentwicklung werden aber Daten ab 2007 erhoben. Die Berechnung erfolgt auf Monatsbasis.

2 Datenlage

2.1 Modellgebiet und Messstationen

Das Modellgebiet wurde rechteckig, die Schweiz umfassend, jedoch die Schweizer Grenze nicht tangierend, mit einer West-Ost-Erstreckung von 430.5 km und einer Nord-Süd-Erstreckung von 412.5 km festgelegt (Abbildung 1). Mit diesem erweiterten Modellgebiet werden Messstationen der Nachbarländer in die Berechnung miteinbezogen, wodurch die Isotopenwerte an den Grenzgebieten der Schweiz realistischer dargestellt werden können und mögliche N-S bzw. W-O-Zusammenhänge deutlicher hervortreten.

Die monatlichen Messwerte des Isotopengehalts im Niederschlag an den Schweizer Stationen entstammen dem Isotopenbeobachtungsnetzwerk im Niederschlag der Schweiz (ISOT), ein Modul des Nationalen Grundwasser-Monitorings (NAQUA). Außerhalb der Schweiz werden Messstationen aus Deutschland, Österreich und Frankreich verwendet, deren Daten dem GNIP und dem Österreichische Messnetz für Isotope im Niederschlag (ANIP) entnommen wurden, sowie von deutschen Kollegen bereitgestellt wurden (Tabelle 1). Die Stationen sind relativ gleichmäßig über die Schweiz verteilt. Die Station Sion wurde 2013 aufgelassen, was in dieser Region (Wallis) eine kleine Lücke hinterließ. Auch im Osten und Süden mit hochalpinen Bereichen ist die Stationsdichte etwas geringer.

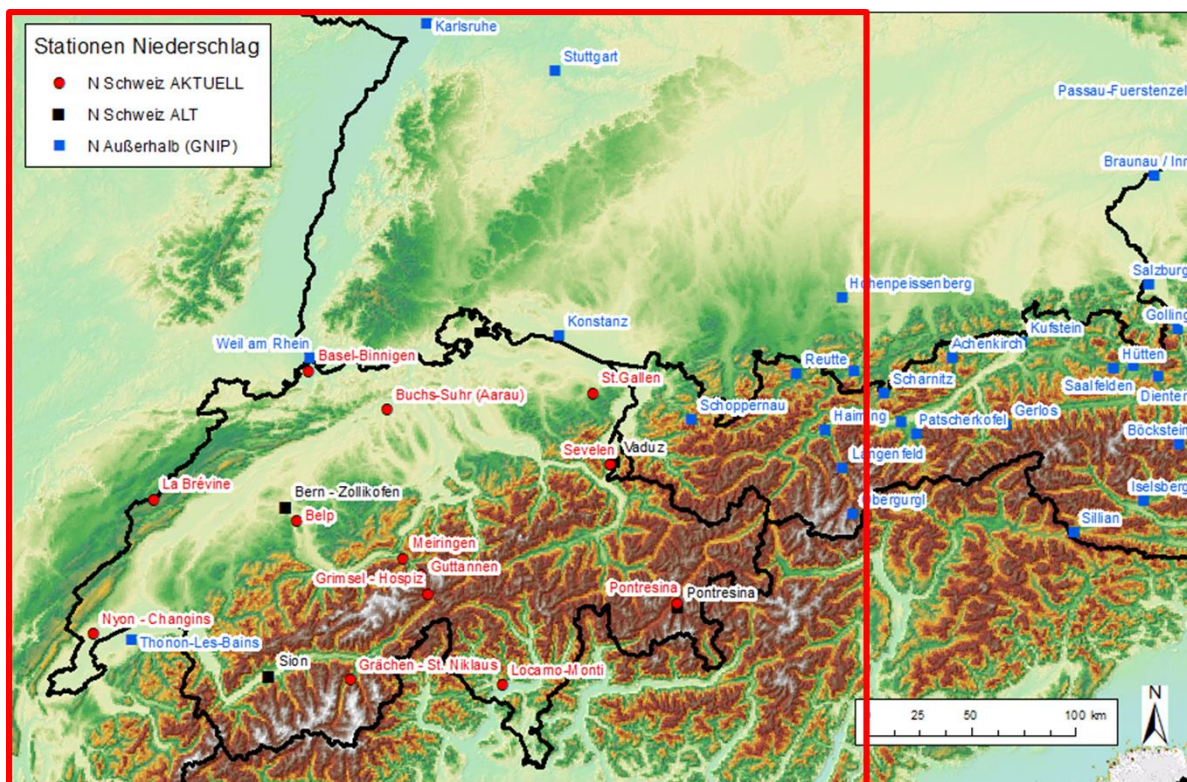


Abbildung 1: Übersichtskarte über das Modellgebiet (rot eingrahmt) mit allen verfügbaren Stationen.

Tabelle 1: Verwendete Messstationen im Modellgebiet. Die Stationen wurden mit einem Kürzel (Code) belegt, um sie in den Karten besser bezeichnen zu können.

ID	Messstation	Land	Code	Seehöhe [m]
1	Nyon	CH	NYO	436
2	Thonon-Les-Bains	FR	TLB	385
3	La Brévine	CH	LAB	1042
4	Sion	CH	SIO	482
5	Bern	CH	BER	541
6	Belp	CH	BEL	520
7	Basel	CH	BAS	316
8	Weil am Rhein	DE	WAR	249
9	Graechen-St. Niklaus	CH	GSN	1605
10	Buchs Suhr	CH	BUS	397
11	Meiringen	CH	MEI	632
12	Guttannen	CH	GUT	1055
13	Grimsel	CH	GRI	1950
14	Locarno	CH	LOC	379
15	Konstanz	DE	KON	443
16	St. Gallen	CH	STG	779
17	Sevelen	CH	SEV	460
18	Vaduz	CH	VAD	460
19	Pontresina_neu	CH	PO2	1790
20	Pontresina_alt	CH	PO1	1724
21	Bregenz	AT	BRE	410
22	Schopperrau	AT	SOP	835
23	Haiming	AT	HAI	695
24	Reutte	AT	REU	870
25	Längenfeld	AT	LAE	1180
26	Obergurgl	AT	OBE	1940
27	Hohenpeissenberg	DE	HOH	977
28	Karlsruhe	DE	KAR	112
29	Stuttgart	DE	STU	314

Stationen in Italien konnten keine bezogen werden. Einzelne verwendete Stationen lieferten im Modellentwicklungszeitraum nur sehr wenige Daten (z.B. Pontresina_neu), manche wurden aufgelassen und durch andere ersetzt (z.B. Bern, ersetzt durch Belp). Auf die verfügbaren Datenzeiträume, die Behandlung von Lücken und Einbeziehung bei der Bestimmung der Modellgüte wird später im Bericht eingegangen.

Aufgrund der Datenlage wird ein Berechnungsraster mit einer **Gitterweite von 500 m** gewählt. Dies ist ein Kompromiss zwischen dem in hoher Auflösung verfügbaren Digitalen Höhenmodell (DHM 25 m), den typischen Abständen zwischen den Stationen (der kleinste Abstand zwischen den Stationen in der Schweiz ist jener zwischen Guttannen (GUT) und Grimsel (GRI) von knapp 10 km Luftlinie) und der Auflösung der verwendeten meteorologischen / klimatologischen Rasterdaten (siehe folgendes Kapitel).

2.2 Zusatzdaten

Für das DHM für das Modellgebiet (Schweiz und Teile in Nachbarstaaten) wurde das Schweizer 25 m DHM und ein mitteleuropäischer Datensatz von der NASA mit einer Auflösung von rd. 100 m kombiniert und auf 500 m aggregiert.

In die Mehrfachregressionsvarianten fließen verschiedene zusätzliche meteorologisch / klimatische Größen ein. Für die Schweizer Stationen wurden zusätzlich zu den Isotopengehalten Monatsniederschläge, mittlere Lufttemperaturen und Dampfdruck geliefert. Neben den Stationswerten wurden diese auch als flächenhafte Raster erhoben. Die flächenhaften Daten (monatliche Raster) von Niederschlagssumme und Lufttemperatur (Monatsmittel und mittlere Tagesminima) wurden von Meteo-Swiss zur Verfügung gestellt. Die Daten liegen mit einer Pixelgröße von 1 km vor. Sie fließen für jeden Monat in die Berechnung ein und wurden mit einem Zeitstempel mit 15. des jeweiligen Monats versehen.

Zur zusätzlichen Validierung der Interpolationsmethode wurden TREND-Daten der Schweiz herangezogen. Diese beinhalten Isotopengehaltsmessungen von 52 Quellen, Förderbrunnen und Piezometermessstellen im Zeitraum 2006-2013 und die Grenzen der zugehörigen Einzugsgebiete als Shapes. Die Einzugsgebiete umfassen eine Größe von 0.1 bis 10 km². Exemplarisch werden Analysen bzw. Bewertungen der Lage der zugehörigen Einzugsgebiete und Fließzeiten abgeschätzt, indem durch einfache Ansätze ein Vergleich der „Input-Funktion“ mit den Messdaten vorgenommen wird.

2.3 Manuelle Datenprüfung

Die Datenaufbereitung und Plausibilitätsprüfung erfolgte in zwei Teilen: Der erste Teil wurde außerhalb des Modells, händisch, durchgeführt. Der zweite Teil der Datenprüfung erfolgt innerhalb des Modells in automatisierter Form für jeden Rechenschritt (Kap. 3.1.2).

Der erste Teil bezieht sich rein auf die Isotopendaten an den Stationen. Es wurde eine händische Plausibilitätsprüfung unter benachbarten Stationswerten durchgeführt. Abbildung 2 zeigt ein Beispiel auf Basis von Sauerstoff-18. Es wurde der Verlauf der Daten von benachbarten Stationen über einen längeren Zeitraum dargestellt und auffällige Abweichungen analysiert. So zeigen sich zum Beispiel generelle niedrigere Niveaus aufgrund höhere Lage (z.B. zwischen den nahegelegenen Stationen Meiringen und Grimsel, zweiter Plot von unten), die als plausibel eingeschätzt werden. Zwischen La Brévine und Belp (zweiter Plot von oben) ist diese Höhenabhängigkeit nicht mehr klar ersichtlich. Hier spielen andere Einflussgrößen eine große Rolle (z.B. kleinräumige Klimavariabilität). Die Stationen im Norden der Schweiz, zusammen mit den benachbarten Stationen in Deutschland (dritter Plot von oben) zeigen hingegen ein homogenes Bild. Die Variabilität unter den sehr hochgelegenen Stationen (unterster Plot) ist hoch. Dies wurde auch unter Verwendung der Stationen in den Nachbarländern veranschaulicht. Dieser Vergleich ist von besonderer Bedeutung, da es sich hier um von anderen Stellen betriebenen Stationen handelt und deren Daten auch von anderen Institutionen gemessen und verwaltet werden. Abbildung 3 zeigt dazu ein Beispiel anhand der Stationen Pontresina in der Ostschweiz und Obergurgl, in Österreich und ebenfalls sehr hoch gelegen. Aus dem Gleichklang der Daten ist ersichtlich, dass die beiden Stationen miteinander korrelieren und daher eine Interpolation in der Region zwischen den Stationen – für die Monate, in denen Daten verfügbar sind – als sehr zuverlässig eingeschätzt werden kann.

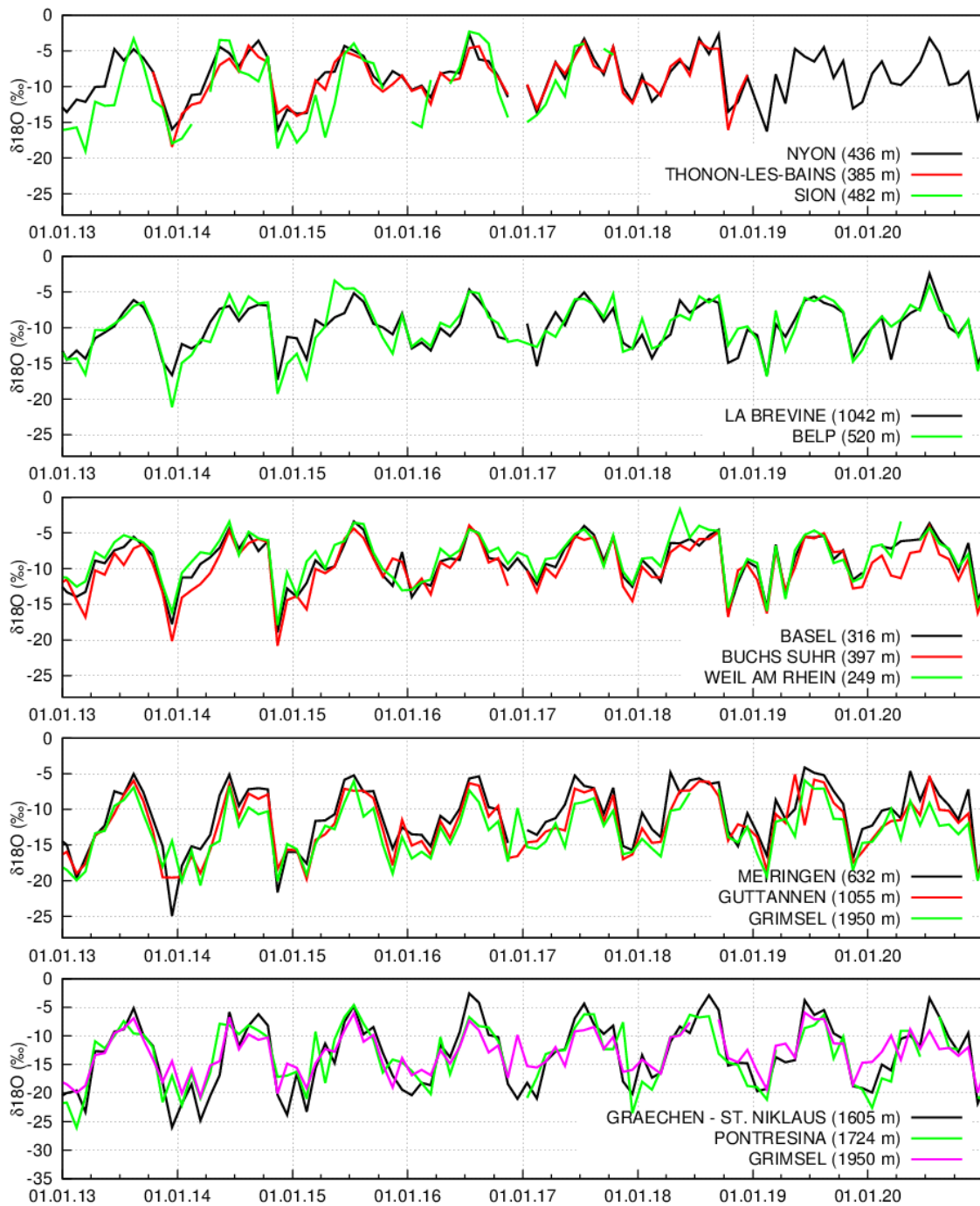


Abbildung 2: Beispiel einer Gegenüberstellung des Datenverlaufs von ^{18}O Werten bei verschiedenen Stationen.

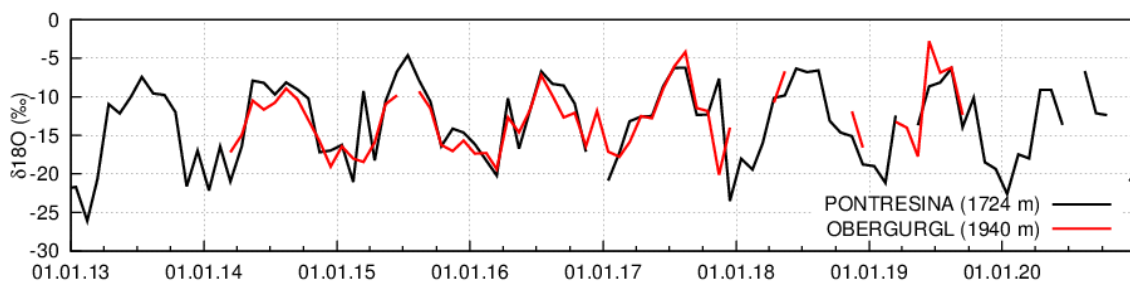


Abbildung 3: Gegenüberstellung des Datenverlaufs von ^{18}O -Werten an den Stationen Pontresina (CH) und Oberurgl (AT).

Ebenso wurde die Streuung der Stationen in Bezug auf die Seehöhe, die eine wichtige Einflussgröße darstellt, betrachtet. Dies machte bereits im Vorhinein auf Ausreißer aufmerksam. Abbildung 4 zeigt als Beispiel für eine manuelle / visuelle Ausreißerprüfung zwei Monate im Jahr 2013. Die $\delta^{18}\text{O}$ Werte wurden gegen die Seehöhe der Station aufgetragen. Im Januar 2013 (links) ist eine starke Seehöhenabhängigkeit gegeben, während im Dezember 2013 (rechts) andere Einflussgrößen die Seehöhenabhängigkeit überlagern. Stationen, deren Werte sehr stark von der Regressionsgeraden abweichen, sind hervorgehoben. Auffallend sind die Unterschiede im Dezember 2013 zwischen Stationen, die recht nahe aneinander liegen, wie z.B. Grimsel (GRI) und Guttanen (GUT) oder aber auch die Differenz zur Station Graechen-St.Niklaus (GSN). In diesem Monat traten kleinräumig sehr große Unterschiede auf, was eine räumliche Interpolation unsicherer macht.

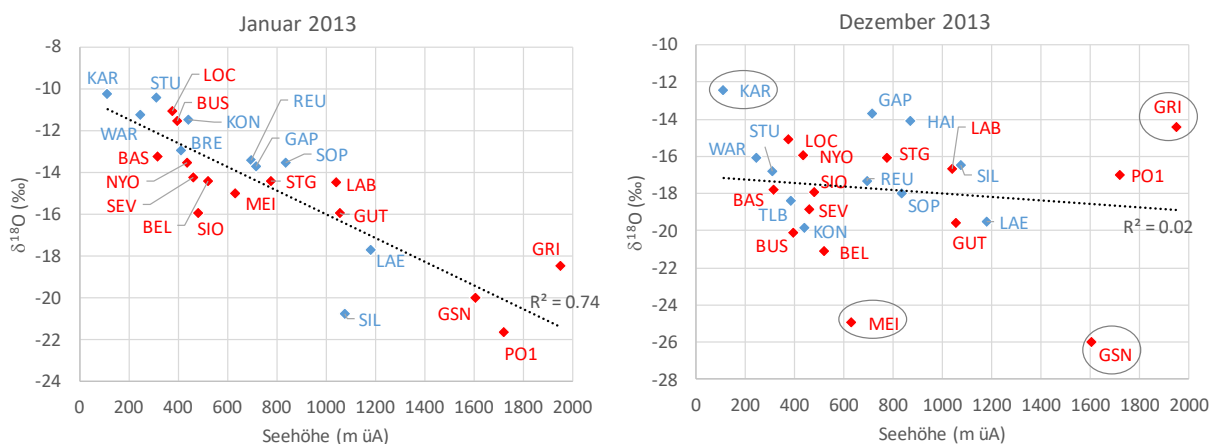


Abbildung 4: Beispiele einer manuellen / visuellen Prüfung der Streuung anhand der Gegenüberstellung mit der Seehöhe der Station. Rot: Stationen der Schweiz; blau: Stationen außerhalb. Abkürzungen der Stationsnamen siehe Tabelle 1)

3 Methodik

3.1 Modellbeschreibung

Für die Interpolation der Isotopendaten wurde ein Script in der Programmiersprache *R* geschrieben, das sich teilweise an Elementen der *gstat*-Software (Pebesma, 2004) bedient. Der Inhalt dieses Scripts ist im Folgenden zusammengefasst und als Flussdiagramm im Anhang (Kap. 7.1) dargestellt.

3.1.1 Pre-Processing

Am Beginn des Modellaufbaus steht ein Pre-Processing-Schritt, in dem die verschiedenen Daten für das Einlesen in das Skript vorbereitet werden.

- Zum Einpflegen der Daten ins Modell aus den verschiedenen Datenquellen wurde vorab eine Daten-Matrix (*.txt) für die Isotopengehalte aber auch für die zusätzlich verwendeten meteorologischen Variablen erstellt. Lücken wurden hierbei mit dem Wert „999.99“ gefüllt. Diese Fehlwerte finden sich auch in den ausgegebenen Modellergebnissen. Die Stationsmetadaten (ID, Land, Code, LON, LAT, ELE) werden dem Modell ebenfalls per *.txt-Datei bereitgestellt. Es gibt zwar für jede Station im Metadatensatz eine zugehörige Seehöhe, zur Berechnung werden jedoch die Seehöhen aus dem digitalen Höhenmodell (DHM 500m)

extrahiert. Dadurch ergibt sich an den Schweizer Stationen ein mittlerer absoluter Höhenunterschied von rd. 20 m im Vergleich zu den Metadaten der Stationen.

- Es wurde ein ArcGIS Projekt aufgebaut, in welches zusätzliche Datensätze (z.B. Landesgrenzen vom Bundesamt für Landestopographie, kurz „swisstopo“) zur räumlichen Orientierung und Visualisierung der Ergebnisse eingespielt wurden.
- Des Weiteren wurde das verwendete 500 m DHM in eine Tabelle („e_grid“) überführt, in der jedem Rasterpunkt LON, LAT und ELE zugewiesen sind. Dieses Format ist bei der Verwendung des Modells *gstat* nach Pebesma (2004) erforderlich.
- Die meteorologischen Rasterdaten wurden heruntergeladen und in einem separaten Ordner gespeichert. Für jeden Zeitschritt wird geprüft, ob Daten zur Verfügung stehen; dann kann die meteorologische Variable einbezogen werden. Die im *.ncdf-Format vorliegenden Raster mit meteorologischen Daten wurden von 1000 m auf 500 m disaggregiert und in das 500 m DHM eingepasst. Die Niederschlagsraster wurden aus rechentechnischen Gründen außerhalb der Schweiz mit dem Fehlwert von „999.99“ belegt. Für die Stationen außerhalb des durch das Schweizer Raster abgedeckte Gebiet (AT, DE) wurden die Niederschläge und Lufttemperaturen aus den mitgelieferten Metadaten zur Station verwendet.
- Vor der monatlichen Berechnung wurde ebenso eine „grid_list“ erstellt. Eine Liste, die aus drei Matrizen mit der jeweiligen LON, LAT und ELE Information pro Rasterpunkt besteht und im Modellauf für die Berechnung der gerasterten Isotopenwerte benötigt wird.

3.1.2 Automatisierte Datenprüfung

Wie oben erwähnt, erfolgt der zweite Schritt der Datenaufbereitung und Datenprüfung innerhalb des R-Scripts. Folgende Arbeiten werden für den ganzen Berechnungszeitraum durchgeführt:

Für jeden Monat wird eine automatisierte Plausibilitätsprüfung der Isotopenwerte durchgeführt. Dies erfolgt auf Basis des Deuterium-Exzess (d-Exzess) nach der Formel $d_E = \delta^2H - 8 * \delta^{18}O$. Mit dem Deuterium-Exzess wird der rechnerische Überschuss von Deuterium im Wasserdampf bezeichnet, der sich immer auf die Steigung 8 der linearen Korrelation von ^{18}O und 2H bezieht. Wenn der d-Exzess außerhalb des Bereiches von $0 < d_E > 25 \text{ ‰}$ liegt, gelten die Werte nicht mehr als plausibel und werden aus der Berechnung ausgeschlossen.

Eine weitere Plausibilitätsprüfung wird anhand der gemessenen Niederschläge an den Stationen vorgenommen. Bei einer Menge von $< 0.5 \text{ mm}$ akkumulierten Niederschlags pro Monat gelten die Isotopenwerte aufgrund möglicher Verdunstungseffekte bzw. der Schwierigkeit des Handlings von kleinen Volumina als nicht aussagekräftig und werden ebenso ausgeschlossen.

Alle auf diese Weise ausgeschlossenen Datenpunkte werden in zwei Textfiles (elog.txt und plog.txt) gespeichert.

3.1.3 Abfolge der Berechnungen im Script

In einem ersten Schritt werden die meteorologischen Daten für die Stationen innerhalb des Schweizer Rasters aus dem Raster extrahiert und für die Stationen außerhalb der Raster aus den Stationsdaten-Matrizen ausgelesen.

Alle Eingangsdaten werden monatlich in einem „data.frame“ zusammengeführt („regr.data“). Stationen, an denen ein Isotopenwert oder ein meteorologischer Wert fehlt, werden nicht in die Berechnung der Regression miteinbezogen. Zudem besteht die Möglichkeit Stationen manuell auszuschließen.

Nun wird eine multivariate lineare Regression mit den geographischen (LON, LAT, ELE) und meteorologischen Variablen (MV) durchgeführt (siehe Formel). Im Script wurde die Regressionsgleichung so formuliert, dass sie um beliebig viele meteorologische Variablen erweiterbar ist.

$$\delta^{18}O, \delta^2H = LON * a + LAT * b + ELE * c + MV1 * m_1 + MV2 * m_2 + \dots + MV_i * m_i + d \quad [\text{‰}]$$

Die Ergebnisse der Regression werden in den Dateien „regout.txt“ und „iso_res.txt“ ausgespielt. Erstere enthält die Anzahl der in die Regression einbezogenen Stationen, die Koeffizienten der Regression a, b, c, m₁, etc. und den RMSE. Zweitere enthält die Residuen der Regression, wobei nicht verwendete Stationen mit dem Fehlwert „999.99“ aufgefüllt werden.

Zudem werden die Absolutbeträge der Residuen des Modelllaufs in Tabellen gespeichert ("res_abs_tab.txt" und "res_tab.txt"). Dieser Prozess wird in Form eines separaten Scripts „Residuenanalyse_monatlich.R“ angestoßen.

Im nächsten Schritt werden die Matrizen der „grid_list“ mit den Koeffizienten der Regression multipliziert, um eine Regressionsoberfläche zu erstellen. Falls vorhanden, wird die „grid_list“ davor mit den Matrizen der meteorologischen Daten („list.dataras“) erweitert.

Die Residuen werden per Ordinary Kriging interpoliert. Bei der Kriging-Interpolation wird davon ausgegangen, dass die Entfernung zwischen Referenzpunkten eine räumliche Korrelation widerspiegelt, mit deren Hilfe Variationen auf der Oberfläche erklärt werden können. Je näher Messpunkte zueinander liegen, desto geringer ist die Semivarianz. An die Semivarianzen der Punkte innerhalb eines angegebenen Radius, wird eine mathematische Funktion, das Variogramm, angepasst und anhand dessen der Ausgabewert für jede Position im Raster bestimmt.

Für das Variogramm wurde eine Exponentialfunktion verwendet. Sie kann mittels drei Parametern angepasst werden: der „Range“, die Distanz, ab welcher die Varianz nicht mehr zunimmt, das „Nugget“, die Semivarianz von Messpunkten mit sehr geringer Distanz zueinander (die Varianz entstammt hierbei hauptsächlich Messfehlern) und der „Sill“, die Semivarianz, die bei der Distanz vom „Range“ vorliegt. Im Script ist eine automatische Anpassung des Variogramms vorgesehen. Vorgegeben wird dabei der Typ des Semivariogramm-Modells (hier gewählt: exponentiell) und der Range. Der „Range“ wurde nicht aus der Anpassung bestimmt, sondern als fixer Wert für alle Zeitschritte mit 50 km gewählt, d.h. der Einflussbereich einer Station wurde als konstant angenommen. Eine Einbeziehung des „Range“ in die Anpassung wurde in Testrechnungen untersucht, lieferte aber teilweise nicht zufriedenstellende Ergebnisse. In manchen speziellen Fällen ist aus den vorliegenden Semivarianzen die Anpassung einer Exponentialfunktion mathematisch nicht möglich. In diesem Fall wird das Nugget mit 0.1 vorgegeben und der „Sill“ aus den Daten (=Semivarianz beim „Range“) gewählt. Zusätzlich wurden in das Script noch Bedingungen eingefügt, die unplausible Parameterkombinationen (z.B. Nugget größer als „Sill“) verhindern. Die Berechnung, Darstellung und

Speicherung des Variogramms im *.bmp-Format werden innerhalb des Scripts in einem Schritt durchgeführt.

Auf Basis des Variogramms werden an jedem Rasterpixel die Residuenwerte aus der Mehrfachregression interpoliert. Die Residuen-Raster können als Karten im *.bmp-Format ausgegeben werden. Die Regressionsoberfläche und der interpolierte Residuen-Raster werden addiert, die Isotopenwerte an ausgewählten Koordinaten (z.B. die Stationen) extrahiert und ausgespielt („iso_results.txt“). Es wird zudem eine graphische Darstellung der Isotopenwerte im *.bmp-Format gespeichert.

Es ist nun möglich das berechnete Isotopenraster nach importierten Polygonen (*.shp-Format), beispielsweise Einzugsgebieten, statistisch auszuwerten (bspw. Mittelwert) und die Ergebnisse sowohl im *.txt- als auch im *.bmp-Format als Karte auszuspielen.

Zur Validierung auf Basis einer Kreuzvalidierung wurde ein separates R-Script erstellt. Es unterscheidet sich dadurch, dass der Messwert eines bestimmten Rasterpunktes (Station) bei der Berechnung des Isotopenwertes an diesem Rasterpunkt **nicht** miteinfließt. Da nur Ergebnisse einzelner Rasterpunkte benötigt werden, wird die Regressionsoberfläche, per obenstehender Formel und unter Einbezug der Werte aus „regr.data“, nur an diesem Rasterpunkt berechnet. Der interpolierte Residuenwert wird aus dem Raster an dieser Stelle extrahiert und beide addiert. Das Ergebnis wird in eine Matrix geschrieben, die gleich aufgebaut ist wie die Matrizen der Stationsdaten. Sie wird als „crossval_*.txt“ gespeichert.

Abweichungen der Endergebnisse im Tausendstel- bis Hundertstelbereich ergeben sich durch die Berechnung des „Regressionsrasters“ mit konkreten Stationskoordinaten bei der Kreuzvalidierung, während bei der Berechnung für das gesamte Raster LON und LAT Matrizen mit Maschenweite 500 m herangezogen werden. Dies kann zu Abweichungen von einigen hundert Metern im Vergleich zu Stationskoordinaten führen.

Die berechneten Isotopenwerte aus der Kreuzvalidierung werden mit den Messdaten des BAFU verglichen und der Fehler mittels der statistischen Größen „errmean“ (mittlerer Fehler), „errabsmean“ (mittlere Absolutwerte der Fehler) und „rmse“ (mittlere Abweichungsquadrate) dargestellt.

3.2 Verwendete Regressionsvarianten („Methoden“)

Verschiedene geographische und meteorologische Variablen haben unterschiedlichen Einfluss auf die Qualität der Ergebnisse. Daher wurden acht Regressionsvarianten („Methoden“) anhand einer Kreuzvalidierung innerhalb der Zeiträume 2007-2013 und 2014-2020 verglichen. Die Methode mit den geringsten Fehlern - unter Einbeziehung von Plausibilitätsüberlegungen - wurde für die finale Berechnung ausgewählt. Außerdem wurde eine Analyse der Residuen aus der Regressionsberechnung mit allen verfügbaren Stationen durchgeführt, auch um räumliche Diskrepanzen sichtbar zu machen.

Folgende Abbildung 5 zeigt die Stärke der geographischen Einflussgrößen auf die ^{18}O -Werte aus einer linearen Regression mit der jeweiligen Variable, gemittelt über alle Stationen und auf Monatsbasis dargestellt. Der starke Einfluss (negativer Effekt) der Seehöhe zeigt sich über das gesamte Jahr; er ist im Sommer etwas geringer. Die Isotopendaten sind mit der geographischen Breite positiv korreliert, was zunächst ein Widerspruch zu sein scheint, da generell die Isotopenwerte in kühleren Regionen, also in höherer geographischer Breite, abnehmen. Dies lässt sich dadurch erklären, dass sich im Norden des Untersuchungsgebiets eher die tieferliegenden Stationen befinden, die eine etwas höhere geografische Breite aufweisen. Die höher gelegenen, südlichen Stationen weisen trotz niedrigerer geografischer Breite isotopisch stärker angereicherte Werte auf. Hier ist Einfluss der Seehöhe dominant. Mit der geographischen Länge sind die Isotopendaten leicht negativ korreliert. Das heißt, von West nach Ost nehmen die Werte ab, was mit dem Kontinentaleffekt zusammenhängt.

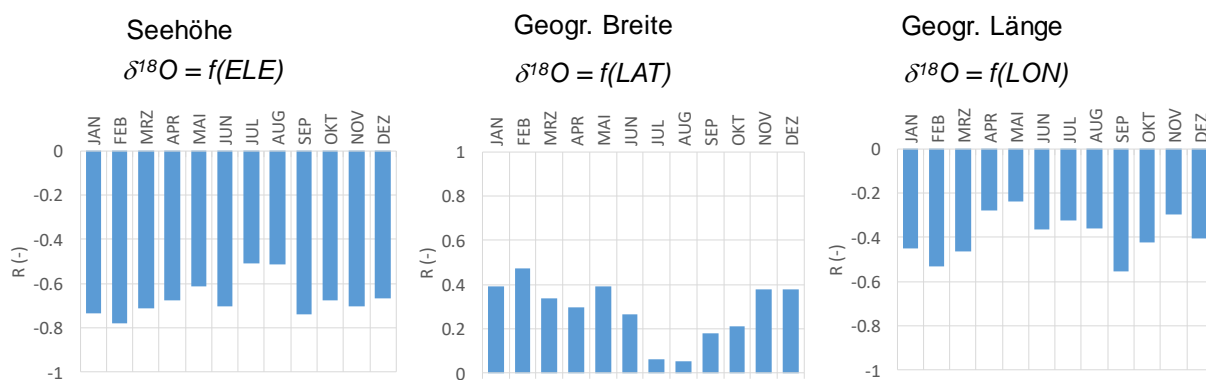


Abbildung 5: Mittlere Korrelationskoeffizienten bei einer Regression nur mit einer geographischen Variable unter Verwendung der verfügbaren Stationen im Zeitraum 2007-2013.

Neben den drei geographisch-topographischen Variablen wurden in der Mehrfachregression schrittweise weitere klimatische Variablen einbezogen. Es konnten aber nur solche Parameter berücksichtigt werden, bei denen flächenhafte monatliche Werte für die Schweiz verfügbar sind. Dies ist beispielsweise für den Niederschlag und die Lufttemperatur der Fall. Wie die Literatur zeigt, sind außerdem Variablen wie Dampfdruck, relative Luftfeuchte oder Schnee wichtige Prädiktoren für die Isotopengehalte im Niederschlag. Von diesen Variablen sind aktuell aber keine flächenhaften Daten in der gewünschten Auflösung für die Schweiz vorhanden. Wie Nelson et al. (2020) zeigt, existieren zwar europaweite Daten von verschiedenen klimatischen Größen, deren räumliche Auflösung ist aber zu gering für die Anforderungen im vorliegenden Projekt.

In Tabelle 2 sind die für die Testung verwendeten Methoden aufgelistet. Die Einbeziehung der Variablen erfolgt schrittweise. Begonnen wird mit den topographischen Variablen, wobei auch jede einzeln getestet wird. Mit „GEO“ ist die Mehrfachregression mit allen drei topographischen Variablen

abgekürzt. Bei „GEO+N“ kommt der Niederschlag hinzu; des Weiteren werden bei „GEO+N+Tmit“ noch die mittlere Monatstemperatur bzw. bei „GEO+N+Tmin“ das monatliche Mittel des täglichen Temperaturminimums oder bei „GEO+N+Tmit+Tmin“ beide Temperaturvariablen hinzugenommen. Letztere Variable ist ein indirekter Indikator für die Schneeverhältnisse im Winter.

Die Zeitreihen der Isotopengehalte wurden in die genannten zwei Zeiträume aufgeteilt. Da zu Beginn des Projektes flächendeckend Daten für 2007-2013 verfügbar waren, wurde mit der Entwicklung des Modells anhand Daten in diesem Zeitraum begonnen. Später wurde das Modell für den Zeitraum 2014-2020 noch einmal validiert.

Tabelle 2: Beschreibung der getesteten Methoden (Regressionsvarianten).

Methodenkürzel	Beschreibung
ELE	Lineare Regression mit der Seehöhe
LAT	Lineare Regression mit der geographischen Breite
LON	Lineare Regression mit der geographischen Länge
GEO (=ELE+LAT+LON)	Mehrfachregression mit allen topographischen Variablen
GEO+N	Mehrfachregression GEO mit der monatlichen Niederschlagssumme
GEO+N+Tmit	Mehrfachregression GEO mit der monatlichen Niederschlagssumme und dem monatlichen Temperaturmittel
GEO+N+Tmin	Mehrfachregression GEO mit der monatlichen Niederschlagssumme und dem monatlichen Mittel des täglichen Temperaturminimums
GEO+N+Tmit+Tmin	Mehrfachregression GEO mit der monatlichen Niederschlagssumme, dem Temperaturmittel und dem monatlichen Mittel des täglichen Temperaturminimums

4 Ergebnisse

4.1 Plausibilitätsprüfung

Im Ergebnis der Plausibilitätsprüfung der Daten wurden fachlich unplausible Werte aus der Berechnung ausgeschlossen. Dies erfolgte für den gesamten Entwicklungszeitraum (2007-2013 und 2014-2020). In der Tabelle 3 wurden die verfügbaren Isotopenwerte für die Jahre 2013 und 2020 jeweils mit einem X markiert. Eingeklammert sind jene Werte, die aufgrund des d-Exzess-Kriteriums ausgeschlossen wurden. Das Kriterium sagt aus, dass nur Werte im Bereich von $0 < d_E < 25 \text{ ‰}$ für die Berechnung herangezogen werden. In den beiden Berechnungsjahren wurde kein Wert aufgrund einer zu geringen Niederschlagsmenge ($N < 0.5\text{mm}$) ausgeschlossen.

Aufgeführt werden hier nur die Schweizer Stationen. Die Informationen aller verwendeter Stationen können der mitgelieferten Datei („ISO-Verfügbarkeit.xlsx“) entnommen werden.

Tabelle 3: Verfügbarkeit der Isotopen-Messwerte an Schweizer Stationen für die Jahre 2013 und 2020

	NYO	LAB	SIO	BER	BEL	BAS	GSN	BUS	MEI	GUT	GRI	LOC	STG	SEV	VAD	PO2	PO1
15.01.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.02.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.03.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.04.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.05.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.06.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.07.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.08.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.09.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.10.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.11.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X		X	X			X
15.12.2013	X	X	X		X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.01.2020	X	X			X		X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.02.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.03.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.04.2020	X	X			X	(X)	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.05.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X			X
15.06.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X		X	X			X
15.07.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X		X	X			
15.08.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X		X	X		X	
15.09.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X	
15.10.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X	
15.11.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X	(X)	X	X			
15.12.2020	X	X			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X		X	

4.2 Analyse der Residuen aus den Mehrfachregressionen

Zunächst wurden die Residuen aus den Mehrfachregressions-Varianten analysiert. Beispielhaft zeigt Abbildung 6 die mittleren Absolutbeträge der Residuen von Sauerstoff-18, über alle verwendeten Stationen gemittelt, für die Ausgabe-Jahre 2013 (links) und 2020 (rechts). Die höchsten Residuen wurden in den beiden Jahren im Dezember 2013 mit Werten um 2 ‰ ermittelt. In diesem Monat war die Streuung der Werte sehr hoch (vgl. auch Abbildung 4). In den übrigen Monaten bewegen sich die mittleren Absolutbeträge der Residuen meist im Bereich zwischen 0.8 und 1.2 ‰. In einigen Ausnahmefällen treten sehr geringe Residuen (z.B. September 2013) und etwas höhere Residuen (z.B. August und November 2020) auf. Diese Analyse gibt schon vorab des Tests der Methoden mittels Kreuzvalidierung einen Eindruck über die räumlichen Zusammenhänge in den einzelnen Monaten der Ausgabe-Jahre 2013 und 2020. In Monaten mit hohen Residuen, d.h. einer hohen räumlichen Variabilität der Isotopenwerte, ist mit einer schlechteren Qualität der Interpolation zu rechnen.

Generell nehmen die Residuen durch Hinzunahme von weiteren meteorologischen Variablen ab. Das heißt, die Vorhersagbarkeit wird besser. Die Reduktion der Residuen ist beispielsweise beim Vergleich der Methode „GEO“ (=ELE+LAT+LON) mit der Methode „GEO+N“, bei der zusätzlich der Niederschlag berücksichtigt wird, recht deutlich sichtbar. Durch die Hinzunahme der Temperatur als weitere Variable, ist die Verringerung der mittleren Residuen aber nur noch relativ gering.

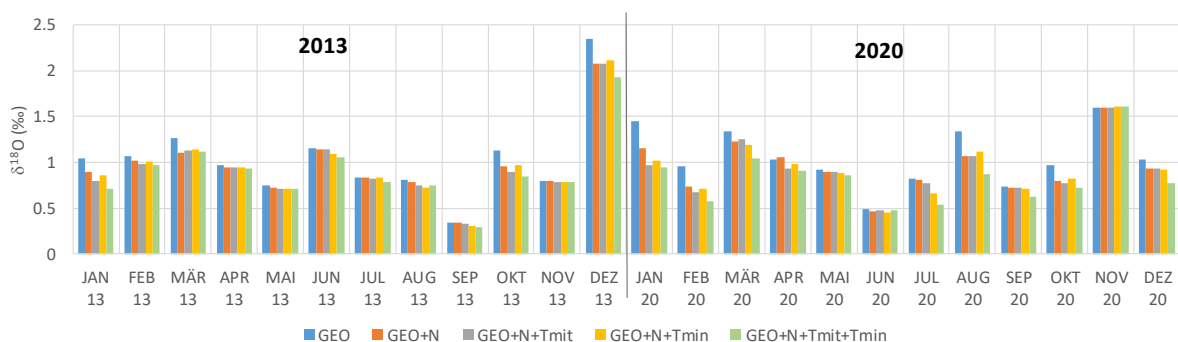


Abbildung 6: Mittlere Absolutbeträge der Residuen aus den Mehrfachregressions-Varianten, über alle verwendeten Stationen gemittelt, für die Ausgabe-Jahre 2013 (links) und 2020 (rechts).

4.3 Ergebnisse der Kreuzvalidierung – Auswahl der „besten“ Methode

Für jede in Tabelle 2 angeführte Methode wurde eine Kreuzvalidierung durchgeführt. Dabei wird immer der Wert einer bestimmten Station bei der Interpolation weggelassen und der interpolierte Wert mit dem tatsächlichen Messwert an der Station für jeden Monat verglichen. Es wurden für jede Station die mittleren absoluten Fehler (MAE) sowie die Wurzel der mittleren Fehlerquadratsummen (RMSE) gebildet. Diese Maßzahlen wurden dann über die Stationen aber auch über bestimmte Monate gemittelt. Die Kreuzvalidierung dient als Basis für die Auswahl der besten Methode, da sie im Besonderen die Güte der Interpolation **zwischen** den Stationen beschreibt. Durch die Residuen alleine, wie im Kapitel zuvor dargestellt, ist diese Einschätzung nicht möglich. Herangezogen für den Test wurden ^{18}O -Werte. Durch den linearen Zusammenhang zwischen ^{18}O und ^2H ist davon auszugehen, dass sich bei der Modellgüte bei beiden Parametern ein sehr ähnliches Bild ergibt.

Die Darstellung der Ergebnisse ist folgendermaßen gegliedert: Zunächst werden die Ergebnisse der Langzeitberechnung der Zeiträume 2007-2013 und 2014-2020 mit und ohne Residueninterpolation gegenübergestellt (Kap. 4.3.1). Danach werden die Ergebnisse beider Zeiträume in Bezug auf die

Stationen (Kap. 4.3.2) sowie die nach Monaten gemittelten Resultate (Kap. 4.3.3) analysiert. Im Kapitel 4.3.3 ebenfalls enthalten ist eine nähere Betrachtung der beiden Ausgabe-Jahre 2013 und 2020. Die Erkenntnisse der genannten Analysen werden in Kapitel 4.3.4 zusammengefasst und eine finale Methodenauswahl getroffen. Zuletzt wird die statistische Prognosegüte der gewählten Methode tabellarisch dargestellt (Kap. 4.4).

4.3.1 Auswirkung der Residueninterpolation

Die nachstehenden Graphiken vergleichen die mittleren absoluten Fehler (MAE) sowie die mittleren Abweichungsquadrate (RMSE) der Kreuzvalidierung mit und ohne Residueninterpolation für alle getesteten Methoden. Die Fehlermaße wurden für alle Stationen im Untersuchungsgebiet (UG) bzw. nur für die Schweizer Stationen (CH) und für die Zeiträume 2007-2013 (Abbildung 7) und 2014-2020 (Abbildung 8) ausgegeben. Es soll den Nutzen der nachgeschalteten Residueninterpolation darstellen.

In beiden Zeiträumen werden die MAE und RMSE durch die Interpolation der Residuen verringert. Die stärksten Verbesserungen beider statistischer Größen treten bei der Regression mit den Lage-Koordinaten auf: geographische Länge: der MAE verbessert sich um 0.32 ‰ im ersten bzw. um 0.25 ‰ im zweiten Zeitraum; der RMSE um 0.35 ‰ bzw. 0.25 ‰; geographische Breite: der MAE verbessert sich um 0.48 ‰ bzw. 0.43 ‰; der RMSE um 0.51 ‰ bzw. 0.44 ‰. Darin zeigt sich, dass eine Regression nur mit diesen Variablen nicht ausreichend ist. Auch das Ergebnis der Berechnung mittels der Höhe verbessert sich, wenngleich etwas weniger stark: der MAE und der RMSE verbessern sich um 0.13 bzw. 0.19 ‰.

Im ersten Zeitraum weisen die Methoden „GEO“ und „GEO+N“ nach der Interpolation die geringsten Fehler auf (MAE = 1.23 ‰ und 1.22 ‰), im zweiten Zeitraum liegen die Methoden „ELE“, „GEO“ und „GEO+N“ in einem ähnlichen Gütebereich (MAE = 1.24 ‰, 1.24 ‰ und 1.25 ‰). Die statistischen Größen unterscheiden sich aber oft nur im Hundertstelbereich. Die Seehöhe hat in beiden Zeiträumen starken Einfluss auf die Verteilung der Isotopenwerte (hohe Werte des Koeffizienten c in der Regressionsgleichung).

Die Schweizer Stationen separat betrachtet, zeigt sich dieselbe Verbesserung durch die Interpolation der Residuen. Im ersten Zeitraum werden mit der Regression mit den Methoden „ELE“, „GEO“ und „GEO+N“ und der Residueninterpolation die geringsten Fehler erreicht (MAE = 1.37 ‰, 1.32 ‰ und 1.31 ‰). Im zweiten Zeitraum sind „ELE“, „GEO“ und „GEO+N“ ebenfalls die besten Methoden (MAE = 1.34 ‰, 1.35 ‰ und 1.27 ‰).

Bei allen Methoden ergeben sich für die Schweiz allein etwas höhere Abweichungen als im gesamten Untersuchungsgebiet. Die Gründe dafür werden im folgenden Kapitel 4.3.2 unter Betrachtung der einzelnen Stationen besprochen.

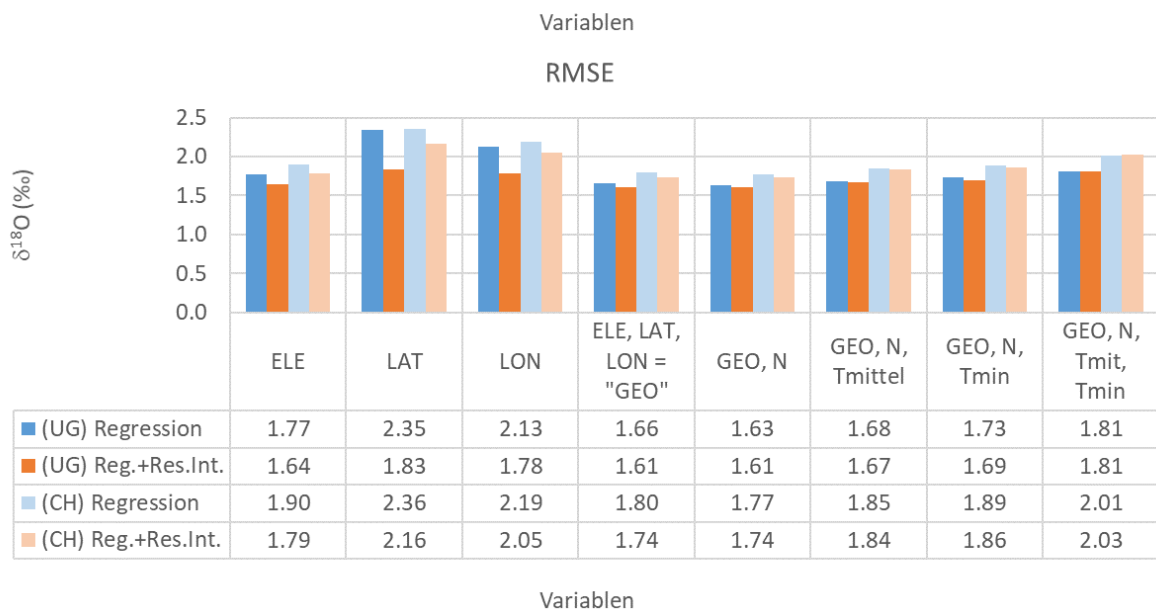
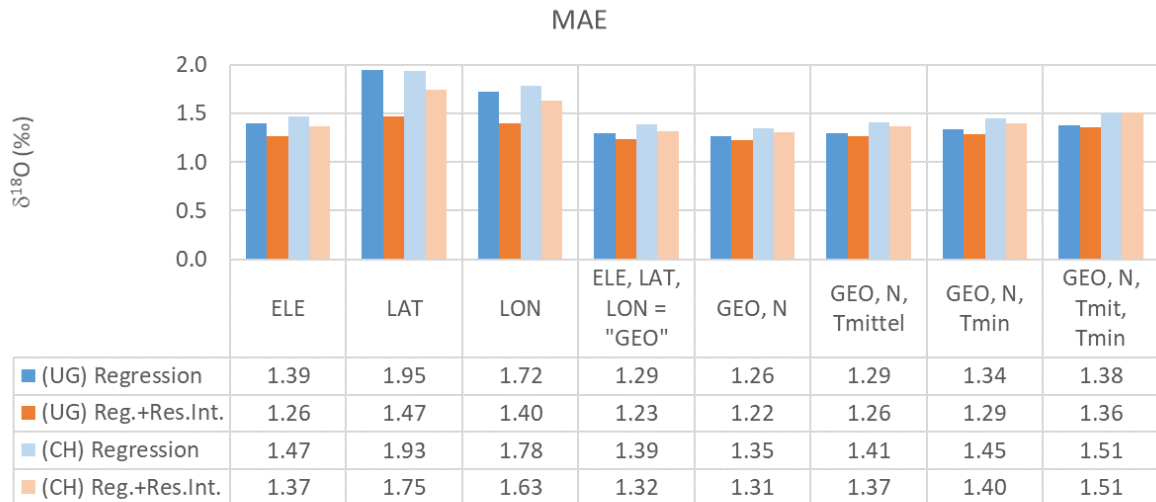


Abbildung 7: Statistische Größen der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).

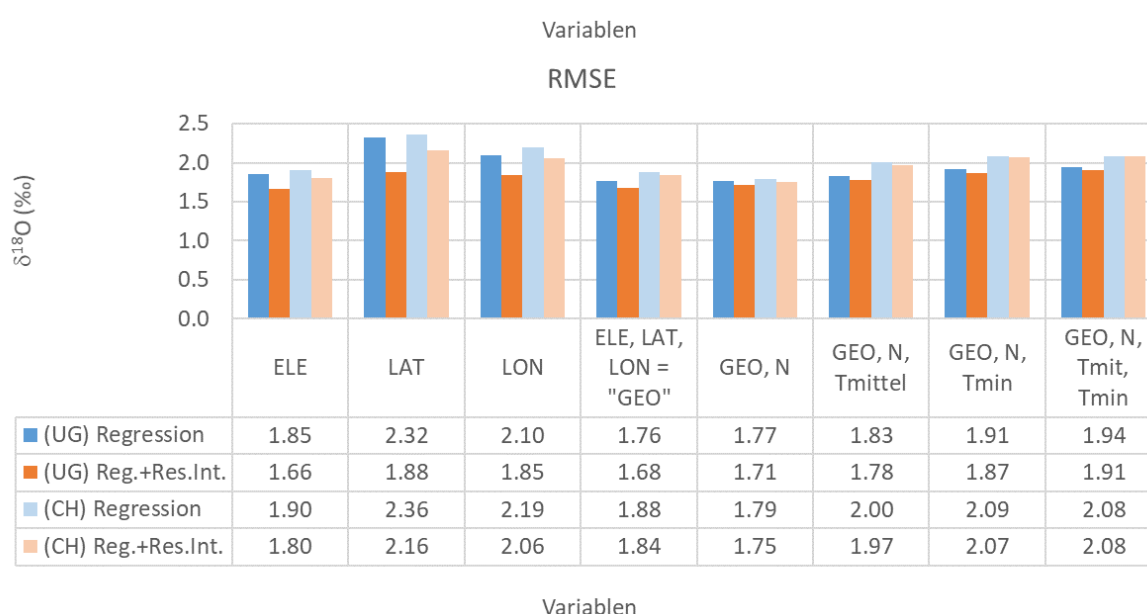
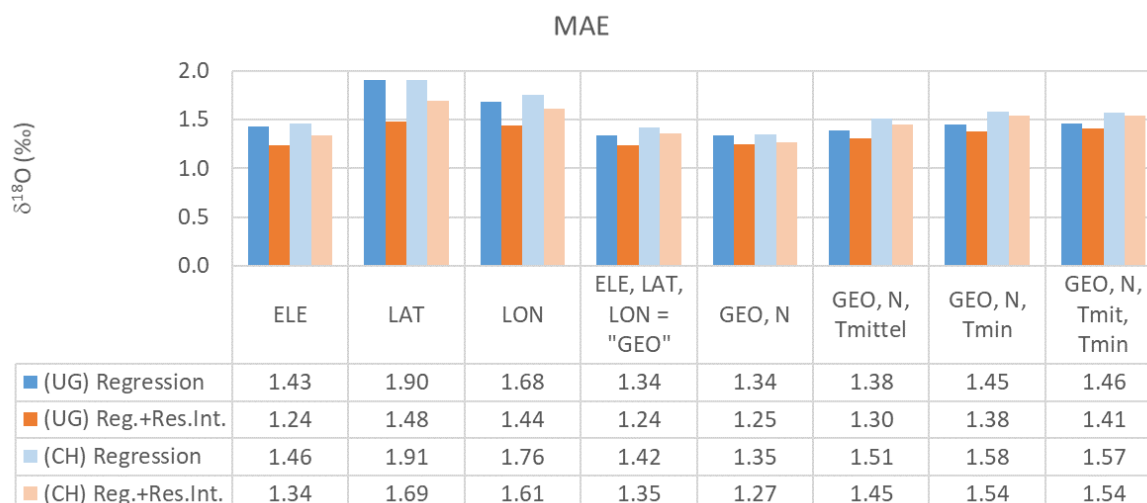


Abbildung 8: Statistische Größen der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).

4.3.2 Auswertung nach Stationen

Die mittleren absoluten Fehler (MAE) wurden im Folgenden in Bezug auf die einzelnen Stationen, wieder separiert nach den beiden Zeiträumen 2007-2013 und 2014-2020, analysiert. Da die Tendenz bei Betrachtung des RMSE ähnlich ausfällt, wurde auf eine weitere Darstellung verzichtet.

Die Station Bern (BER) wird 2012 von der Station Belp (BEL) abgelöst. Im Jahr 2012 liegen an beiden Stationen Daten vor. Die Daten von Belp im Jahr 2012 wurden für die Kreuzvalidierung für Bern nicht verwendet, da ansonsten keine aussagekräftige Fehlermaße für die Stationen ermittelt werden können (MAE ist zu klein, d.h. Interpolation perfekt).

Für die Schweizer Stationen Bern (BER), Belp (BEL), Basel-Binningen (BAS), Buchs-Suhr (BUS), Guttannen (GUT), St. Gallen (STG) und Sevelen (SEV) werden in beiden Zeiträumen, unter der Verwendung aller Methoden, mittlere absolute Fehler (MAE) von maximal rund 1.0 ‰ erreicht (Abbildung 9; Abbildung 11). Im Zeitraum 2014-2020 gilt dies auch für Meiringen (MEI).

Diese Stationen korrelieren räumlich gut mit anderen Stationen in ihrer Nähe (die Abstände betragen weniger als 50 km Luftlinie), weshalb ein Wegfallen der Station durch die Nachbarstationen kompensiert werden kann. Die höchsten MAE ergeben sich für weiter auseinanderliegende Stationen, besonders im Süden. Hier tritt darüber hinaus noch eine höhere räumliche Variabilität der klimatischen Bedingungen (z.B. Abschattungseffekte bei Südanströmung) auf, weshalb hier die Fehler generell größer sind. Davon betroffen sind Sion (SIO), Graechen – St. Niklaus (GSN), Locarno (LOC) und Pontresina_alt (PO1). Die durchschnittlichen MAE liegen im Bereich von 2 ‰ in beiden Zeiträumen unter der Verwendung der Methode „GEO+N“.

Die MAE für die Stationen Nyon (NYO) und La Brévine (LAB) sind bereits deutlich geringer und liegen im Bereich von 1 ‰ („GEO+N“). An den Stationen Nyon und Thonon-Les-Bains (TLB) könnte auch ein spezielles Mikroklima am Genfer See dazu beitragen, dass die Temperaturen nicht mit jenen der umliegenden Stationen korrelieren. Die Temperaturen in La Brévine fallen dauerhaft geringer aus.

Die höchsten MAE wurden an der Station Locarno (LOC) errechnet. Die Kreuzvalidierung ergab für den Standort der Station Locarno z.B. bei der Methode „GEO+N“ für ¹⁸O über den Zeitraum 2014-2020 einen mittleren absoluten Fehler von über 3 ‰.

Bezüglich der beiden Stationen in Pontresina ab Mitte 2020 wurden die mittleren Fehler der neuen Station (PO2) zwar in Abbildung 11 dargestellt; es sind aber nur von vier Monaten im Jahr 2020 Daten vorhanden, und die Mittelwerte besitzen daher keine Aussagekraft. In die Gesamtauswertung (Mittelbildung, bspw. Abbildung 7) fließen diese nicht ein. Dasselbe gilt für Haiming (HAI) im Zeitraum 2007-2013 mit zwei Zeitschritten. Die deutsche Station Hohenpeissenberg (HOH) wurde nur im Zeitraum 2007-2013 verwendet, da sich deren Einfluss als sehr gering herausstellte.

Während der MAE der Methode „GEO+N“ der Schweizer Stationen im Mittel bei 1.31 ‰ bzw. 1.27 ‰ (ohne PO2) bzgl. der beiden Zeiträume liegt, erreichen die Stationen außerhalb der Schweiz in beiden Zeiträumen eine etwas geringere MAE von 1.11‰ (ohne HAI) (Abbildung 10; Abbildung 12). Dieser Unterschied hängt mit der Stationsdichte zusammen.

Allgemein sind die Fehler der Methoden für die jeweiligen Stationen in beiden Zeiträumen aber relativ ähnlich. Meist tritt eine deutliche Verbesserung unter der Verwendung aller topographischen Variablen („GEO“) auf. Jedoch wird auch „ELE“ häufig als beste Methode klassiert. Eine Berechnung von „ELE+N“ im Vergleich zu „GEO+N“ weist in Bezug auf das gesamte Untersuchungsgebiet eine geringe durchschnittliche Verbesserung von 0.02‰ auf. Diese entfällt besonders auf Stationen im Süden der Schweiz, wo mikroklimatische Effekte dazu führen, dass die Isotopen-Messwerte schlechter durch die geographischen Längen- und Breitengrade erklärbar sind. Das zeigt sich auch an den höheren Berechnungsfehlern mit den Methoden „LON“ und „LAT“ an den südlichen Stationen.

Die Verbesserungen oder Verschlechterungen durch Hinzunahme der meteorologischen Variablen sind meist gering. Mikroklimatische Situationen führen dazu, dass sich die Ergebnisse unter Einbezug der Temperaturen meist verschlechtern. An keiner der untersuchten Stationen kann durch den Einfluss der Temperaturen eine Verbesserung von mehr als (0.07‰) im Vergleich zu „GEO+N“ erreicht werden.

Zur Übersicht sind in Tabelle 4 die mittleren Absolutbeträge des Fehlers der Kreuzvalidierung (MAE) für die Schweizer Stationen für die Vergleichszeiträume 2007 – 2013 und 2014 – 2020 zusammengefasst.

Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers 2007-2013 (CH)

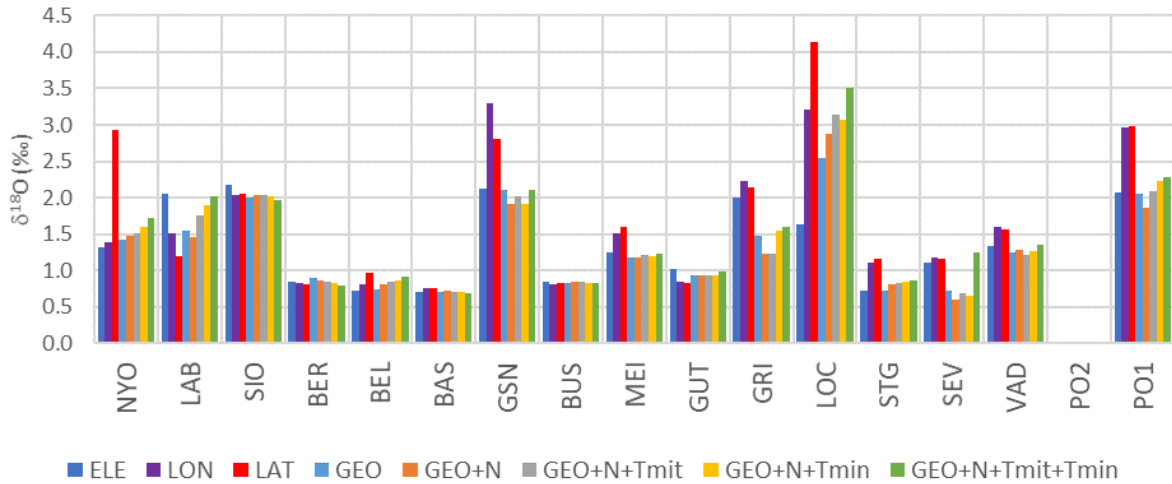


Abbildung 9: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 aller Schweizer Stationen.

Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers 2007-2013 (FR, DE, AT)

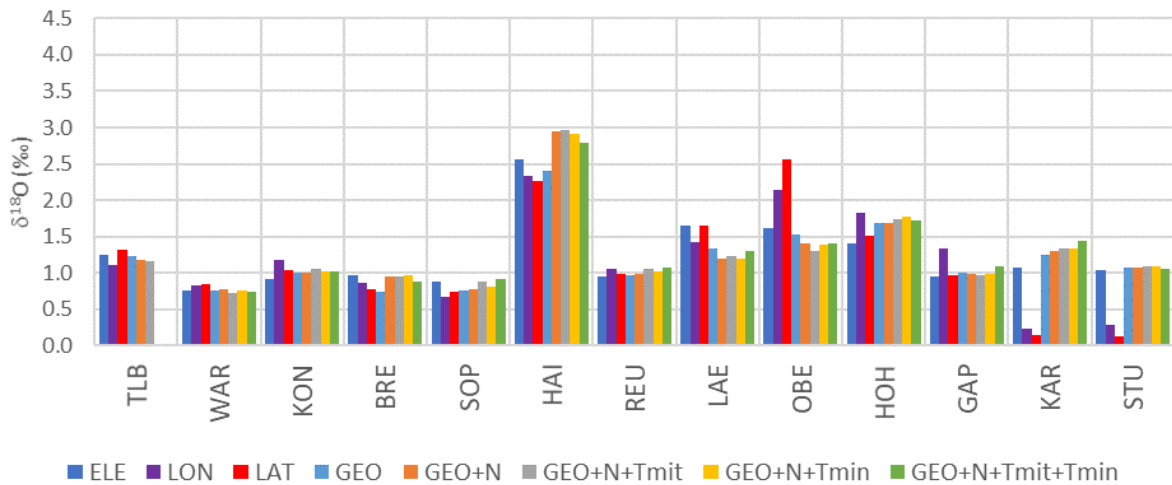


Abbildung 10: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 der Stationen in Frankreich, Deutschland und Österreich. Die Ergebnisse von Haiming (HAI) sind aufgrund geringer Datenverfügbarkeit nicht aussagekräftig.

Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers 2014-2020 (CH)

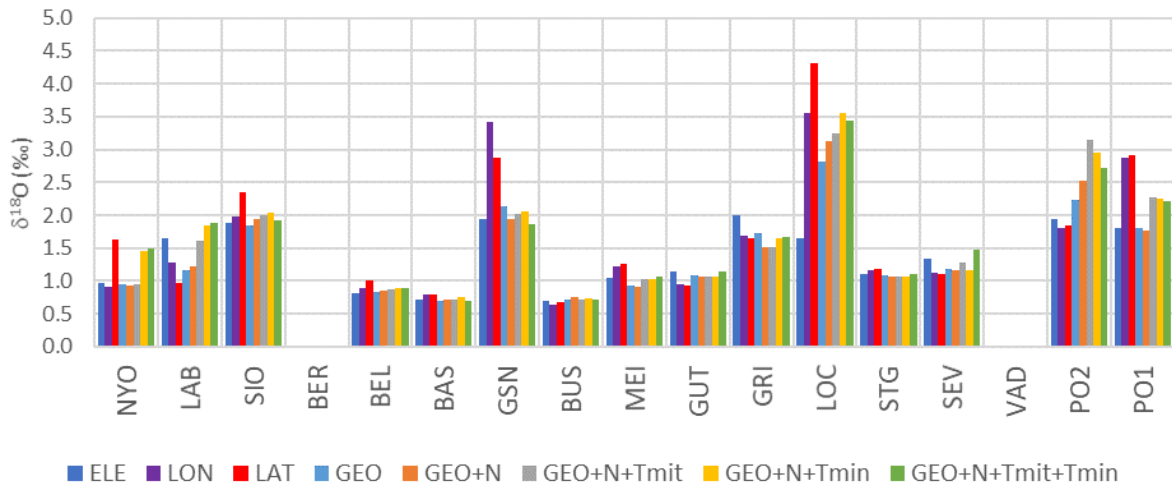


Abbildung 11: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 aller Schweizer Stationen. Die Ergebnisse von Pontresina_neu (PO2) sind aufgrund geringer Datenverfügbarkeit nicht aussagekräftig.

Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers 2014-2020 (FR, DE, AT)

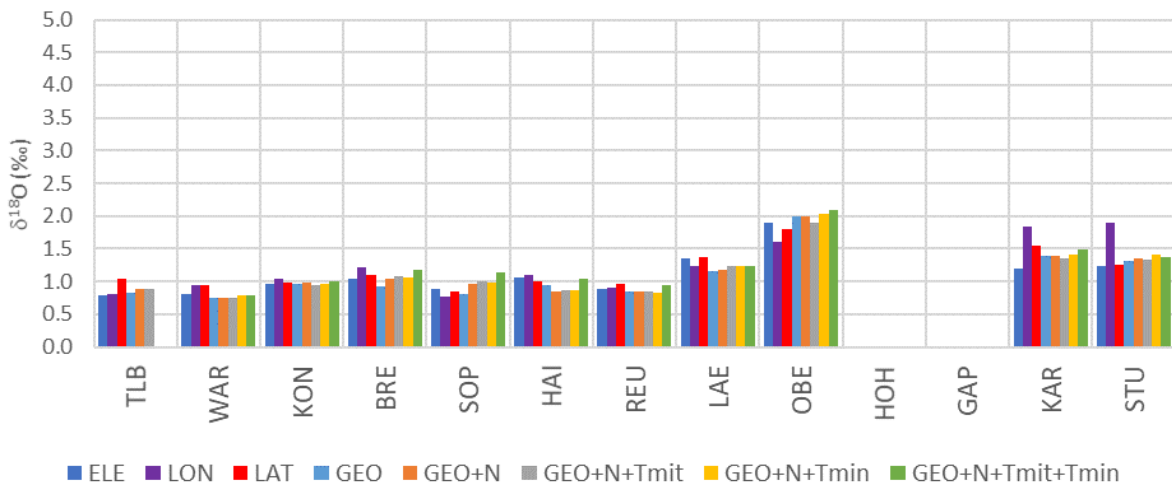


Abbildung 12: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 der Stationen in Frankreich, Deutschland und Österreich.

Tabelle 4: Mittleren Absolutwerte der Abweichungen (MAE) für die Schweizer Stationen für die Vergleichszeiträume 2007–2013 und 2014–2020.

Station	Variante															
	ELE		LAT		LON		GEO (=ELE+LAT+LON)		GEO+ N		GEO+N+Tmit		GEO+N+Tmin		GEO+N+Tmit+Tmin	
Code	07-13	14-20	07-13	14-20	07-13	14-20	07-13	14-20	07-13	14-20	07-13	14-20	07-13	14-20	07-13	14-20
NYO	1.32	0.96	2.93	1.63	1.38	0.91	1.42	0.95	1.47	0.94	1.51	0.95	1.59	1.46	1.72	1.49
LAB	2.06	1.65	1.19	0.97	1.52	1.27	1.54	1.16	1.47	1.21	1.76	1.61	1.89	1.84	2.01	1.88
SIO	2.19	1.88	2.05	2.34	2.04	1.97	2.01	1.85	2.04	1.94	2.04	2.00	2.03	2.03	1.97	1.93
BER	0.85	---	0.81	---	0.82	---	0.89	---	0.86	---	0.85	---	0.82	---	0.79	---
BEL	0.72	0.81	0.97	1.01	0.81	0.90	0.74	0.83	0.81	0.85	0.84	0.88	0.86	0.88	0.91	0.90
BAS	0.70	0.72	0.76	0.80	0.76	0.80	0.70	0.70	0.72	0.72	0.70	0.72	0.71	0.76	0.69	0.70
GSN	2.12	1.94	2.81	2.87	3.29	3.42	2.10	2.13	1.91	1.94	2.01	2.01	1.92	2.05	2.10	1.87
BUS	0.85	0.69	0.84	0.67	0.81	0.64	0.84	0.71	0.85	0.75	0.84	0.72	0.83	0.74	0.84	0.72
MEI	1.25	1.04	1.60	1.26	1.52	1.23	1.19	0.93	1.18	0.91	1.22	1.03	1.20	1.02	1.23	1.07
GUT	1.02	1.15	0.83	0.94	0.85	0.95	0.94	1.08	0.94	1.06	0.93	1.06	0.94	1.07	0.99	1.14
GRI	2.00	2.00	2.14	1.65	2.23	1.68	1.47	1.72	1.22	1.51	1.23	1.52	1.54	1.66	1.60	1.67
LOC	1.63	1.65	4.14	4.31	3.21	3.56	2.54	2.82	2.88	3.13	3.14	3.25	3.06	3.56	3.51	3.43
STG	0.71	1.10	1.16	1.19	1.11	1.17	0.73	1.08	0.81	1.07	0.83	1.07	0.85	1.07	0.86	1.11
SEV	1.11	1.35	1.17	1.11	1.18	1.13	0.73	1.18	0.61	1.16	0.68	1.28	0.65	1.17	1.25	1.47
VAD	1.33	---	1.56	---	1.60	---	1.26	---	1.28	---	1.21	---	1.26	---	1.35	---
PO2	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
PO1	2.06	1.80	2.97	2.92	2.96	2.88	2.05	1.80	1.86	1.77	2.09	2.27	2.23	2.24	2.27	2.22
Mittel	1.37	1.34	1.75	1.69	1.63	1.61	1.32	1.35	1.31	1.35	1.37	1.46	1.40	1.54	1.51	1.54

Für die Stationen Basel (BAS), Grimsel (GRI), Pontresina_alt (PON1) und Locarno (LOC) wurden die ¹⁸O-Isotopenwerte in Abbildung 13 als Ganglinien über den Zeitraum 2012-2020 dargestellt. Die Abbildung enthält zusätzlich die Ganglinie des d-Exzess der gemessenen Isotopenwerte. Wie erwähnt, wurden nur Stationswerte mit einem d-Exzess zwischen 0 und 25 zur Berechnung herangezogen. Im Zeitraum 2007 bis 2020 wurden an allen zur Berechnung herangezogenen Stationen in Summe 68 Werte ausgeschlossen. Dies betrifft beispielsweise die Werte an der Station Pontresina_alt (PO1) im November und Dezember 2015.

Die berechneten Werte an den Stationen Basel und Grimsel nähern sich den gemessenen sehr gut an. Lediglich in den Wintermonaten werden die Werte an der Station Grimsel unterschätzt. Dies ist vermutlich darin begründet, dass der Einfluss von Schneefall im Modell überschätzt wird. Bei Schneefall ist davon auszugehen, dass die Isotopenwerte im Niederschlag deutlich geringer sind als bei Regen. Ein ähnliches Bild zeigt sich an der hoch gelegenen Station Obergurgl (Kap. 4.3.3). Die Station liegt in Österreich und liefert wertvolle Hinweise über die Isotopenverhältnisse im hochalpinen, östlichen Bereich des Untersuchungsgebietes.

Durch kleinklimatische Verhältnisse an den Stationen Pontresina_alt und Locarno weichen die berechneten Werte stärker von den gemessenen Werten ab. Höhere Fehler treten an der Station Locarno auf (siehe Abbildung 9 und Abbildung 11). Die Niederschlagsverhältnisse unterscheiden sich im Tessin deutlich von jenen in den übrigen Schweiz. Häufigen Südwestlagen bzw. Mittelmeertiefs bringen starke Regenfälle bei relativ hohen Temperaturen. Im Tessin ist mit Locarno nur eine Station verfügbar; wird diese wie bei der Kreuzvalidierung weggelassen, entstehen in diesem Bereich sehr hohe Unsicherheiten in den Isoscapes.

Generell wird noch angemerkt, dass das räumliche Bild der Interpolationsfehler mit den in der Schweiz definierten Klimazonen teilweise erklärt werden kann (z.B. nach Schüepp und Gensler, 1980). Vor

allem bei den Übergängen zwischen zwei Klimazonen, die teilweise auch recht kleinräumig sein können, treten die größten Unsicherheiten auf.

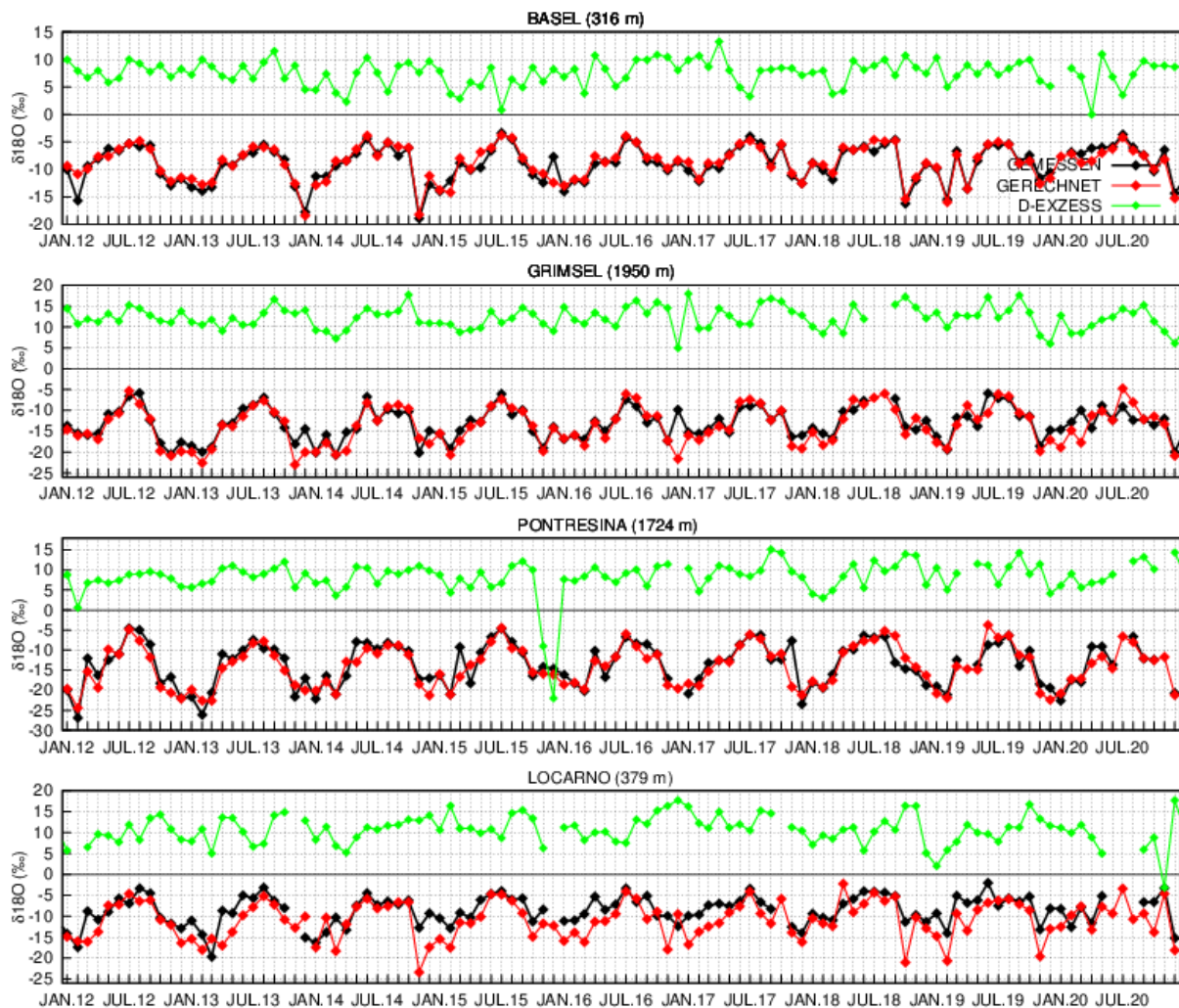


Abbildung 13: Ganglinie der gemessenen und durch Kreuzvalidierung gerechneten 18O-Werte und des d-Exzesses der gemessenen Werte an vier beispielhaft ausgewählten Stationen der Schweiz im Zeitraum 2012-2020.

4.3.3 Auswertung nach Monaten

Die Varianten der Variablenkombinationen (Methoden) wurden in der folgenden Analyse nach Monaten nur anhand der MAE verglichen, da die Aussagen der RMSE ähnlich ausfallen. Zur Übersicht wurde auf eine Darstellung des „Rankings“ zurückgegriffen. Bei der Interpretation der „Rankings“ (bspw. Abbildung 16) ist anzumerken, dass sich die Methoden teilweise nur um wenige Hundertstel unterscheiden, was streng gesehen dieselbe Platzierung ergeben würde. Die Rankings wurden für die Entwicklungszeiträume (2007-2013 und 2014-2020) und die Ausgabe-Jahre 2013 und 2020 getrennt ausgewertet.

Auswertung in den Entwicklungszeiträumen:

In beiden Zeiträumen ist ein deutlicher Jahresgang des Fehlers, mit Maximum im Winter und Minimum im Sommer, erkennbar (Abbildung 14 und Abbildung 15).

Gemittelt über beide Zeiträume erreichen die Methoden „GEO“ und „GEO+N“ die geringsten Fehler (1.23 ‰ bzw. 1.24 ‰). Höhere Fehler ergeben sich aus den Berechnungsmethoden mit den Temperaturen: „GEO+Tmit“: MAE = 1.29 ‰, „GEO+Tmin“: MAE = 1.34 ‰ und „GEO+Tmit+Tmin“: MAE = 1.39 ‰. Beide Zeiträume zeigen ein ähnliches Bild.

Die Definition der besten Methode variiert zwischen den Monaten. Während generell „GEO“ am häufigsten und „GEO+N“ am zweithäufigsten als beste Methode eingestuft werden, wird im Zeitraum 2007-2013 die Methode „GEO+N+Tmit“ im Februar an erster Stelle des Rankings platziert (Abbildung 16). Der Fehler beträgt 1.55 ‰. Im April ist diese Methode um 0.08 ‰ besser als „GEO+N“. Im Zeitraum 2014-2020 erreicht „GEO+N+Tmit“ im Dezember die beste Platzierung (1.48 ‰). Die Methoden, die die mittlere Minimumtemperatur („Tmin“) inkludieren, führen zu höheren Fehlern, da dieser Variable anscheinend höhere Variabilität aufweist als die Werte der mittleren Temperatur.

Bei einzelnen Stationen, wie bspw. Obergurgl, im Zeitraum 2014-2020 betrachtet (Abbildung 12), können die Fehler durch Hinzunahme der mittleren Temperatur („Tmit“) um 0.76 ‰ im Dezember und um 0.47 ‰ im Februar verringert werden. Die mittlere Temperatur trägt dazu bei, den Niederschlag in fest und flüssig zu differenzieren. Dadurch können geringere Isotopenwerte durch Schneefall bzw. höhere Konzentrationen bei derselben Niederschlagsmenge in flüssiger Form besser abgebildet werden. Bezogen auf die Schweizer Stationen allein sind die im Zeitraum 2014-2020 erreichten Verbesserungen jedoch gering (max. ≈ 0.20 ‰). Nur im Dezember verbessern sich einige Stationen in höherem Maße. Im Winter und Frühjahr verschlechtern sich die Ergebnisse für La Brévine (LAB) und Pontresina_alt (PO1) besonders stark, während sich erwartungsgemäß inneralpine Stationen besser abbilden lassen. Im monatlichen Mittel über alle Schweizer Stationen werden die Fehler durch Hinzunahme der mittleren Temperaturen jedoch in jedem Monat erhöht.

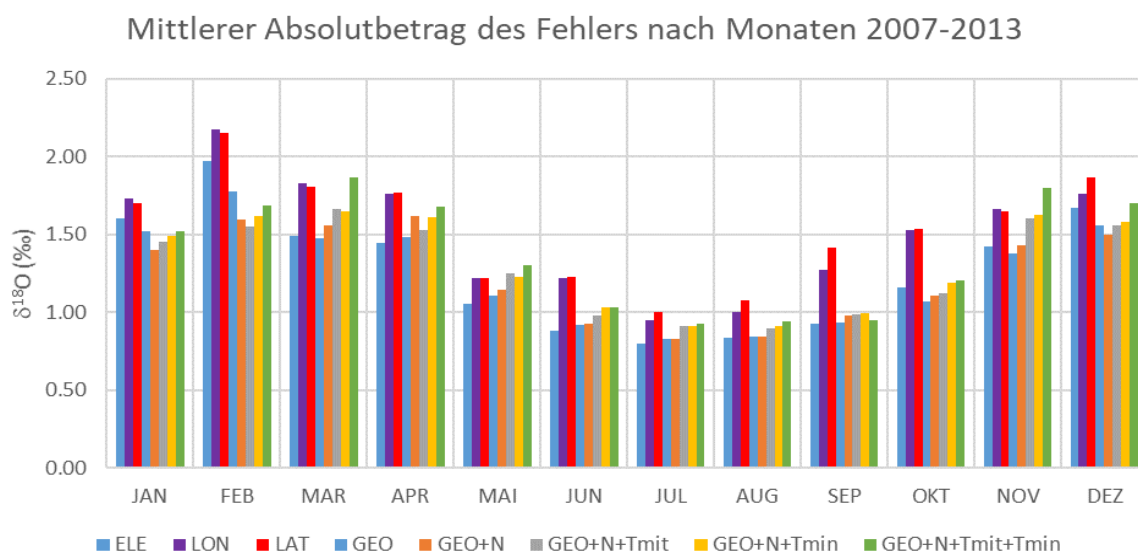


Abbildung 14: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2007-2013 aller Stationen nach Monaten.

Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers nach Monaten 2014 -2020

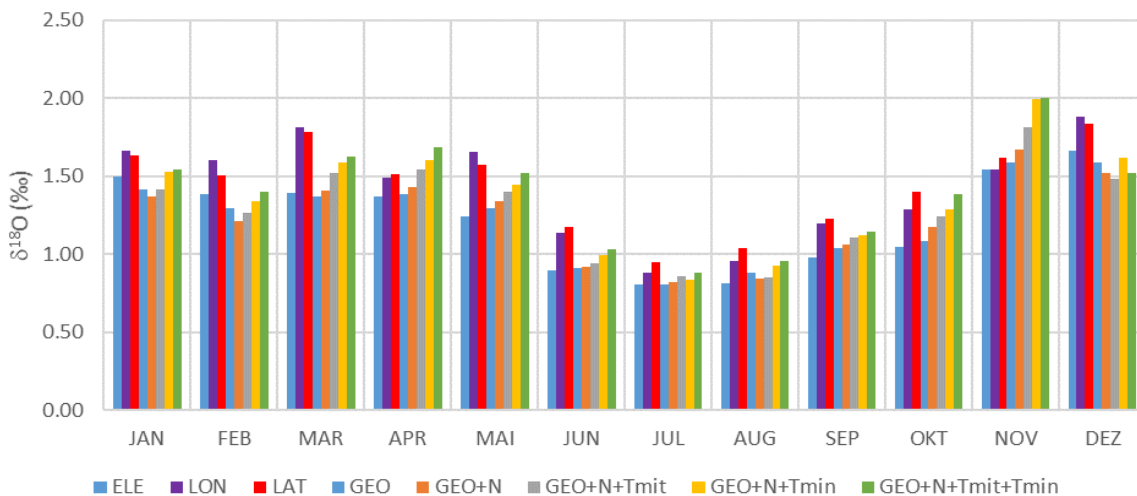


Abbildung 15: Mittlerer Absolutbetrag des Fehlers der Kreuzvalidierung im Zeitraum 2014-2020 aller Stationen nach Monaten.

Ranking der Varianten der Kreuzvalidierung nach Monaten 2007-2013 und 2014-2020

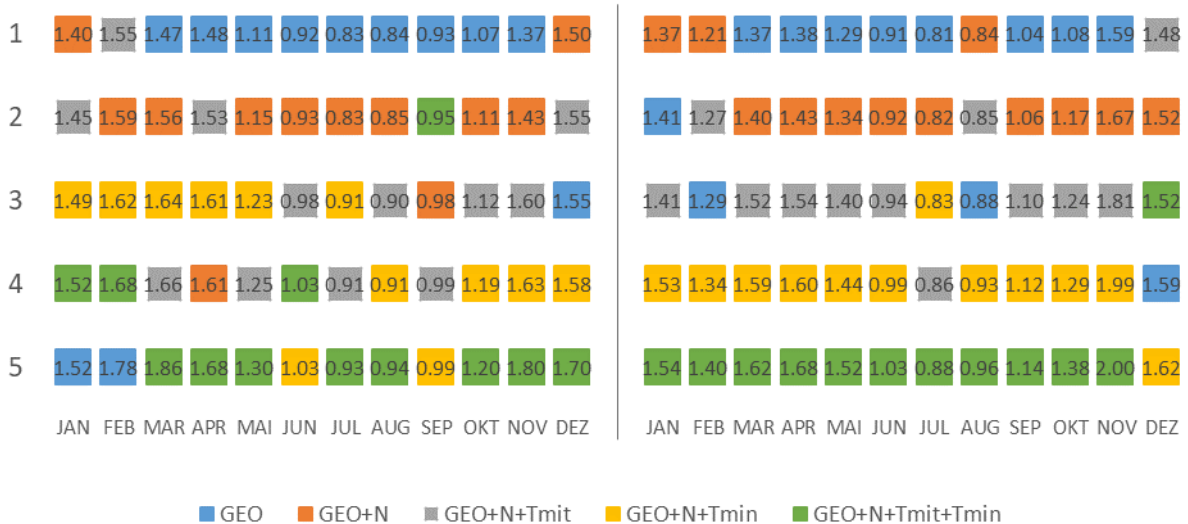


Abbildung 16: Ranking der Varianten der Variablenkombinationen unter der Verwendung der Kreuzvalidierung anhand der MAE in ‰ für die Zeiträume 2007-2013 und 2014-2020.

Auswertung der Ausgabe-Jahre 2013 und 2020:

Ebenso bei Betrachtung der Ausgabe-Jahre 2013 und 2020 ist eine Verbesserung der Ergebnisse durch Hinzunahme verschiedener Temperaturkombinationen in den Monaten Dezember, Januar und Februar zu beobachten (Abbildung 17). Diese beträgt bis zu zwei Zehnteln im Vergleich zu „GEO+N“, wobei sich die Ergebnisse im Großteil des restlichen Jahres in ähnlichem Maße verschlechtern.

Die Verringerung der Residuen zeigt, dass sich die Messwerte durch die Regression ganzjährig besser erklären lassen, wenn Temperaturen (v.a. „Tmit“) miteinbezogen werden (vgl. Abbildung 6). Bei der Kreuzvalidierung hingegen ergaben sich bei den Varianten, die die Temperaturen einbeziehen (grau,

gelb und grün im Ranking in Abbildung 17), z.B. über das Jahr 2013, höhere Fehler. Ein Weglassen der Station wirkt sich also bei den Methoden mit der Temperatur stark aus.

Die Methode „GEO“ liefert in den Ausgabe-Jahren die geringsten Fehler und wird am häufigsten als beste Methode klassiert, gefolgt von „GEO+N“. Im Jahr 2013 ergibt sich für „GEO“ MAE = 1.26 ‰ und für „GEO+N“ MAE = 1.33 ‰; im Jahr 2020 ergibt sich für „GEO+N“ MAE = 1.33 ‰ und für „GEO“ MAE = 1.38 ‰.

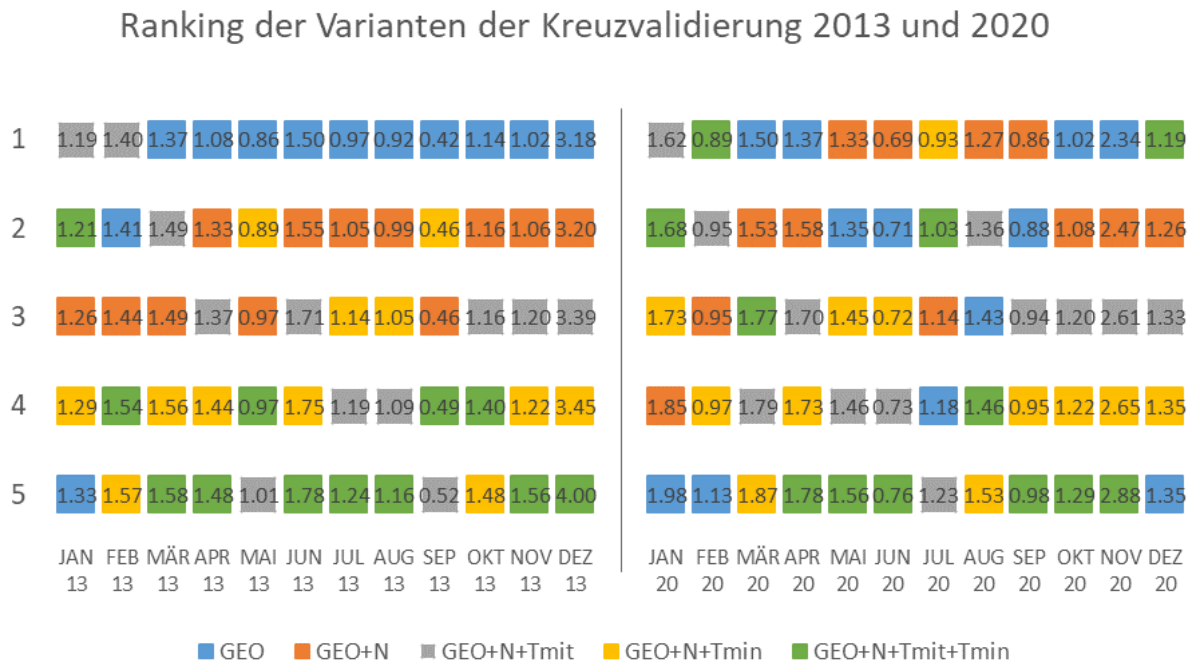


Abbildung 17: Ranking der Varianten der Variablenkombinationen unter der Verwendung der Kreuzvalidierung anhand der MAE in ‰ für die Jahre 2013 und 2020.

4.3.4 Schlussfolgerungen aus den Auswertungen für die Auswahl der „besten“ Methode

Die Auswahl der „besten“ Methode erfolgte anhand der Ergebnisse der Kreuzvalidierung im gesamten Datenzeitraum 2007-2020, da diese durch die langjährigen Mittelwerte robuster ist bezüglich einer Anwendung auf Zeiträume, die nicht durch den Test der Methoden abgedeckt wurden. Das Kriterium der Kreuzvalidierung, im Mittel über alle Stationen und Monate, wird als maßgebend betrachtet, da im vorliegenden Interpolationsmodell die Güte zwischen den Stationen über die gesamten Datenzeitraum entscheidend ist.

Es wird die Methode der Mehrfachregression „GEO+N“ und nachgeschalteter Residueninterpolation mit Ordinary Kriging als geeignetste Methode angesehen. Die Auswahl wird folgendermaßen argumentiert:

- Obwohl in manchen Monaten die Methode „GEO“, d.h. eine Mehrfachregression nur mit den topographischen Variablen, als beste Methode hervorgeht, ist die Einbeziehung der monatlichen Niederschlagssumme notwendig, um lokale Extremereignisse aber auch mögliche Trends durch den Klimawandel abzubilden. Die Variabilität in einzelnen Monaten kann durch den Niederschlag besser erklärt werden. Abbildung 18 zeigt diesen Einfluss am Beispiel des Dezember 2013, in welchem die Isotopengehalte eine hohe kleinräumige Streuung aufwiesen

(siehe Abbildung 4 rechts). Vor allem zwischen den recht nahe aneinander liegenden Stationen Meiringen (MEI) und Grimsel (GRI) traten hohe Unterschiede auf (siehe Abbildung 18 links), welche durch die topographischen Variablen allein nicht hinreichend erklärt werden können. Erst durch die Hinzunahme des Niederschlages (Abbildung 18 rechts) wird ersichtlich, dass in diesem Monat die Niederschläge im Süden (Tessin) deutlich höher waren als in der restlichen Schweiz. Die genannten Stationen liegen im Übergangsbereich von hohen zu niedrigen Niederschlägen.

- Auch rein technisch ist die Niederschlagsinformation notwendig, um das Ausschlusskriterium bei geringen Niederschlagsmengen automatisiert anwenden zu können.
- In einzelnen Jahren wurde vor allem in den Wintermonaten Dezember, Januar und Februar eine Verbesserung durch Hinzunahme der Temperatur ersichtlich. Dies führte zur Überlegung, für die Wintermonate eine andere Variablenkombination als für den Rest des Jahres zu wählen, wie z.B. eine Hinzunahme der Lufttemperatur. Über den gesamten Berechnungszeitraum lässt sich bei einer solchen Vorgehensweise jedoch keine generelle systematische Verbesserung erkennen (Abbildung 14, Abbildung 15, Abbildung 16). Es wurde daher bei der Methode über das gesamte Jahr mit einer einheitlichen Variablenkombination gearbeitet. Eine einheitliche Wahl hat zusätzlich den Vorteil, dass sich die Robustheit des Modells erhöht und eine verbesserte Übertragbarkeit auf andere Zeiträume und Regionen gegeben ist. Außerdem wird die Modellstruktur einfacher, und weniger Zusatzdaten sind erforderlich.

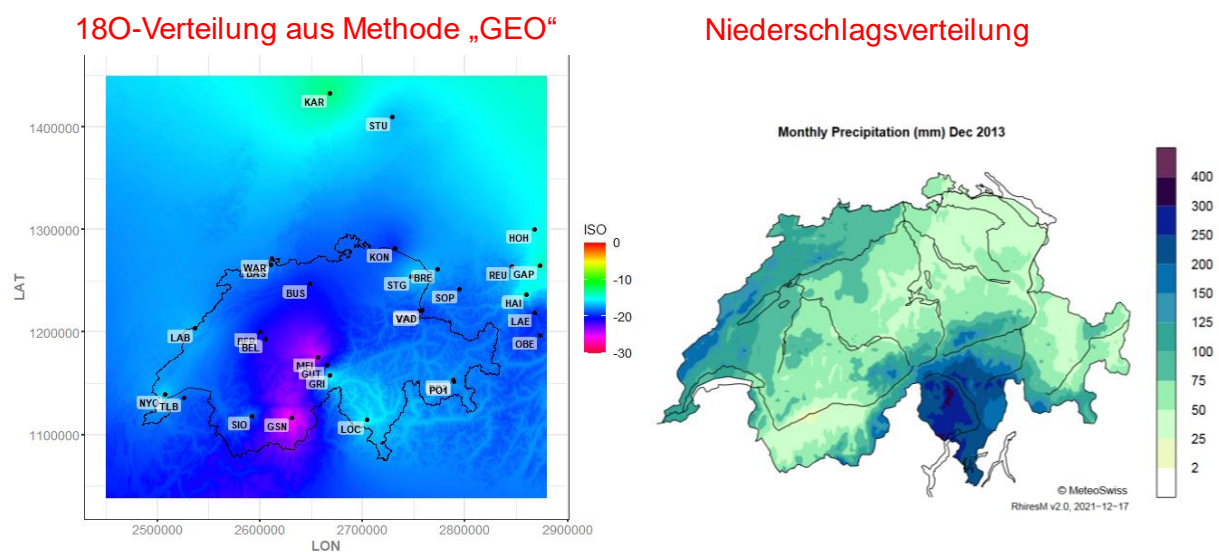


Abbildung 18: Einfluss des Niederschlages auf die ^{18}O -Muster am Beispiel Dezember 2013: ^{18}O -Verteilung aus der Methode „GEO“ (links) und Verteilung der Monatssumme des Niederschlages (rechts).

4.4 Detailanalyse der Ergebnisse der gewählten Methode

4.4.1 Darstellung und Analyse der statistischen Fehlermaße

In der nachstehenden Tabelle 5 werden die statistischen Fehlermaße MAE und RMSE der gewählten Methode „GEO+N“ der beiden Ausgabe-Jahre angegeben. Wie bereits angesprochen fallen diese im Sommer bis Herbst geringer aus als im Winter und Frühling. Auf diesen Zusammenhang wird in der nachstehenden Analyse näher eingegangen.

Zudem werden die Nugget-Werte der Variogramme der Residueninterpolation angeführt. Ein geringer Nugget-Wert spricht für eine geringe Semivarianz nahe beieinanderliegender Stationen. Durch hohe Nugget-Werte werden vor allem Messfehler abgebildet. Teilweise können erhöhte Nugget-Werte aber auch Hinweise auf kleinräumige Variationen, beispielsweise mikroklimatische Variabilitäten sein, die sich stark auf die Isotopen-Messwerte auswirken.

Wenn kein Variogramm angepasst werden kann, wird – wie zuvor erwähnt (siehe Kap. 3.1.3) - ein Nugget von 0.1 festgelegt und von ihm ausgehend ein „fixed“ Variogramm gebildet. Daher können Ergebnisse mit Nugget-Werten, die mit „fixed“ gekennzeichnet sind, schwieriger für die räumliche Interpretation der Messfehler oder Mikroklimata herangezogen werden. Häufig, jedoch nicht in jedem Fall, trägt ein einziger hoher Semivarianzwert einer Wertegruppe von geringer Distanz dazu bei, dass kein Variogramm angepasst werden kann. Die genaue Wertelage im jeweiligen Monat kann den Variogrammen entnommen werden. Zudem zeichnen sich stark voneinander abweichende Isotopen-Messwerte in den Residuen-Karten ab. Im Anhang sind die Ergebnisse für die Jahre 2013 und 2020 im Detail dargestellt.

Wie zu erwarten korreliert der Nugget-Wert mit dem MAE der Kreuzvalidierung positiv mit einem geringen Bestimmtheitsmaß von $R^2=0.28$. Im Spätsommer und Herbst treten meist geringe Nugget-Werte auf, was auf geringere mikroklimatische Differenzen hinweist.

Die verbleibende Differenz oder Restfehler bezeichnet den MAE, der bei der Berechnung der Isotopen-Werte ohne Weglassen einer Station entsteht. Die Ausgabe dieses Wertes soll dazu beitragen, Unterschiede von aus den Isoscapes herausgelesenen Werten an einer Station mit dem jeweiligen Stationsmesswert für bestimmte Monate besser einordnen zu können. Diese Differenz liegt meist in der Höhe des Nugget-Wertes oder, durch die Glättung bei der Interpolation, darunter. Über beide Ausgabe-Jahre beträgt sie für die ^{18}O -Werte durchschnittlich 0.23 ‰. Mit der Methode „GEO+N“ ist die verbleibende Differenz meist am niedrigsten. Die durchschnittlich geringsten Werte finden sich bei Methoden mit Einbeziehung der Temperatur. Mittlere Nugget-Werte der Residueninterpolation und verbleibende Differenzen sind ebenfalls in den Detailergebnissen im Anhang angeführt.

Tabelle 5: Gegenüberstellung der statistischen Fehlermaße der Kreuzvalidierung der gewählten Methode in den beiden Ausgabenjahren nach Monaten. Zusätzlich ist der Nugget-Wert der Residueninterpolation und die

verbleibende Differenz zu den Messwerten an den Stationen (kein Weglassen einer Station) als Mittel der Absolutbeträge über alle Stationen eingetragen.

2013						2020					
	MAE Kreuz-Val.	RMSE Kreuz-Val.	Nugget		Verbleibende Differenz		MAE Kreuz-Val.	RMSE Kreuz-Val.	Nugget		Verbleibende Differenz
Jan.13	1.26	1.54	0.73		0.55	Jan.20	1.85	2.25	0.10	fixed	0.09
Feb.13	1.44	1.75	0.10	fixed	0.10	Feb.20	0.95	1.23	0.10	fixed	0.14
Mär.13	1.49	1.88	0.06		0.07	Mär.20	1.53	2.41	0.10	fixed	0.08
Apr.13	1.33	2.16	0.37		0.22	Apr.20	1.58	1.94	0.34		0.70
Mai.13	0.97	1.36	0.34		0.28	Mai.20	1.33	1.60	0.10	fixed	0.13
Jun.13	1.55	2.19	1.32		0.74	Jun.20	0.69	0.98	0.10	fixed	0.18
Jul.13	1.05	1.29	0.43		0.33	Jul.20	1.14	1.59	0.10	fixed	0.13
Aug.13	0.99	1.13	0.00		0.01	Aug.20	1.27	1.76	1.29		0.66
Sep.13	0.46	0.57	0.00		0.00	Sep.20	0.86	1.21	0.00		0.01
Okt.13	1.16	1.41	0.00		0.05	Okt.20	1.08	1.91	0.00		0.01
Nov.13	1.06	1.61	0.10	fixed	0.09	Nov.20	2.47	3.38	0.91		0.46
Dez.13	3.20	3.94	0.10	fixed	0.17	Dez.20	1.26	1.60	0.73		0.39

Mit der Methode „GEO+N“ wurden im Mittel relativ niedrige Fehler erzielt. Die Qualität schwankt aber monatlich. Zu einer Analyse wurde der MAE der „GEO+N“-Langzeit-Kreuzvalidierung mit dem monatlichen Niederschlagsmittel über alle Stationen im Untersuchungsgebiet verglichen (Abbildung 19). In beiden Zeiträumen ist ein Zusammenhang, wenngleich mit geringer Stärke (2007-2013: $R^2=0.30$; 2004-2020: $R^2=0.23$) erkennbar. Bei geringeren Niederschlägen nehmen die Fehler zu. Das Jahr 2020 allein betrachtet ist er deutlich stärker ($R^2=0.55$).

Dies kann folgendermaßen interpretiert werden: Bei geringeren Niederschlagsmengen ist die Wahrscheinlichkeit höher, dass die Niederschläge bei den Stationen zu verschiedenen Zeitpunkten z.B. infolge räumlich und zeitlich hochvariabler Niederschlagsereignisse wie beispielsweise Gewittern auftreten. Bei höheren Monatssummen der Niederschläge ist hingegen die Wahrscheinlichkeit höher, dass diese durch großräumige, frontale Niederschläge erzeugt werden. Dadurch treten bei mehreren Stationen ähnliche Anströmbedingungen auf. Darüber hinaus ist es auch möglich, dass sich bei sehr geringen Niederschlägen - vor allem in den Sommermonaten – Verdunstungseffekte auf die Isotopen-Messwerte relativ gesehen stärker auswirken. Im vorliegenden Modell wurde mit einer kritischen Monatsmenge von ≥ 0.5 mm gearbeitet (siehe Kap. 3.1.2). Diese Grenze kann natürlich höher angenommen werden, z.B. auf 1 bis 3 mm/Monat; generell kommen Monate mit derartig geringen Niederschlagsmengen selten vor.

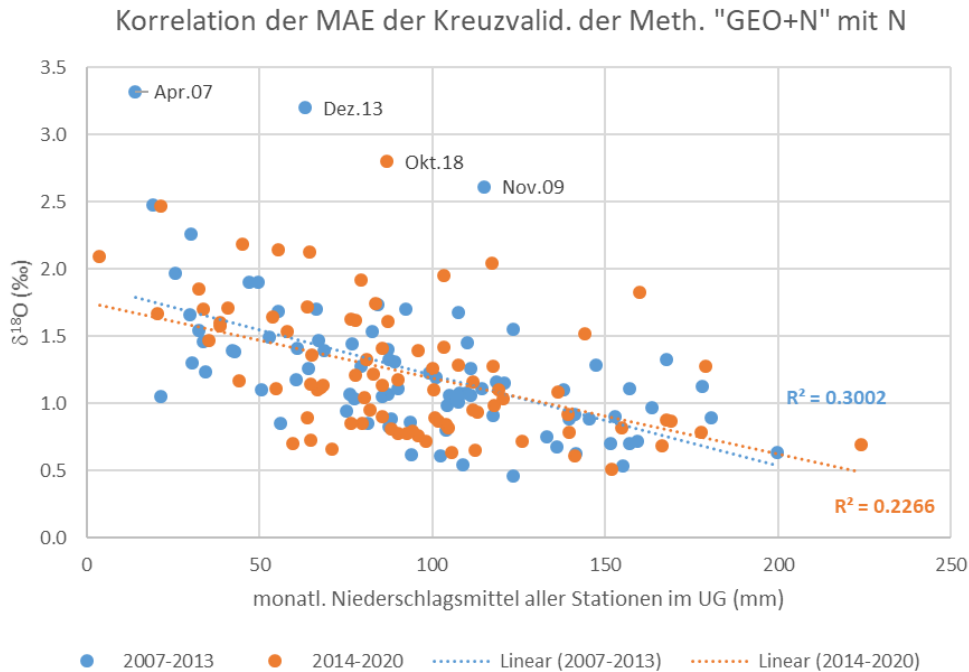


Abbildung 19: Korrelation der MAE der Kreuzvalidierung der Methode „GEO+N“ mit dem Monatsniederschlag als Mittel über alle Stationen.

4.4.2 Vergleich mit Ergebnissen aus der Literatur

Schließlich wurden die vorliegenden Ergebnisse exemplarisch mit einigen Ergebnissen aus der Literatur verglichen. Es wurde ein Vergleich der Fehlermaße (MAE) für Sauerstoff-18 zwischen dem im vorliegenden Projekt gewählten Modell („GEO+N“) und den Ergebnissen aus PISO.AI (Nelson et al., 2020) vorgenommen. Von der Website PISO.AI können für einen Punkt die Interpolationsergebnisse extrahiert werden. Nelson et al. (2020) führten keine Kreuzvalidierung durch. Um sie mit den vorliegenden Ergebnissen vergleichen zu können, wurden daher jene Stationen herangezogen, die für die Entwicklung von PISO.AI nicht verwendet wurden (z.B. Stationen außerhalb von GNIP). Abbildung 20 zeigt einen Vergleich für diese Stationen anhand Daten aus dem Zeitraum 2007 bis 2019. Die Ergebnisse aus dem vorliegenden Projekt sind deutlich besser als jene aus dem Modell PISO.AI. PISO.AI arbeitet auf einem deutlich größeren räumlichen Maßstab (Rastergröße 0.5°) und bezieht nur die zum Zeitpunkt der Entwicklung verfügbaren GNIP-Daten ein. Zu diesem Zeitpunkt waren auch von der Schweizer Station Graechen-St. Niklaus noch keine Daten verfügbar. Ebenfalls waren von der Liechtensteiner Station Vaduz ab 2012 keine Daten mehr verfügbar. Die restlichen Schweizer Stationen wurden alle verwendet. Für die Station Basel (BAS) wurde beispielweise von Nelson et al. (2020) über einen Split-Sample-Test von 2004 bis 2017 ein RMSE = 1.28 ‰ ausgewiesen, während die Kreuzvalidierung bei der ausgewählten Methode hier ein RMSE = 1.01 ‰ ergab.

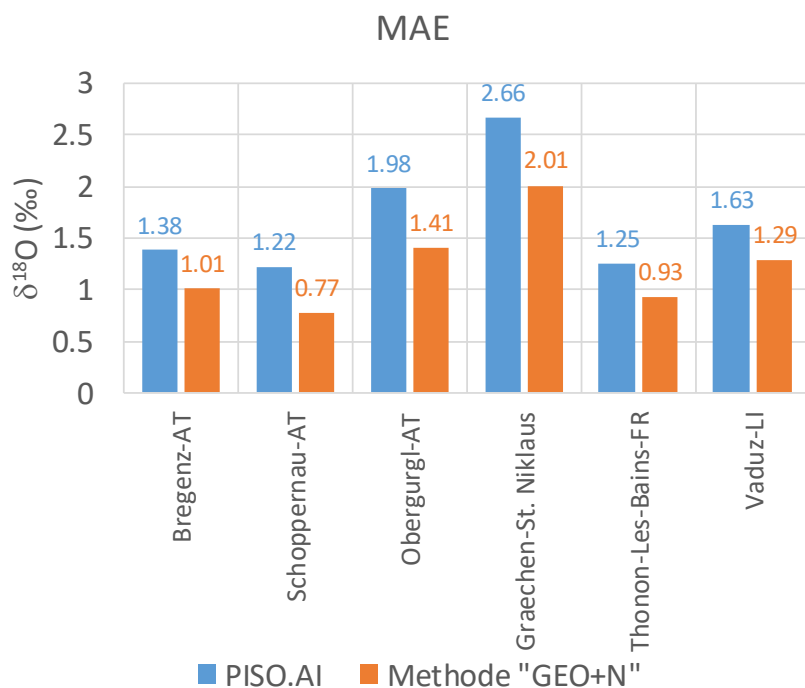


Abbildung 20: Vergleich der Fehlermaße (MAE) für Sauerstoff-18 zwischen dem im vorliegenden Projekt gewählten Modell („GEO+N“) und aus dem globalen Modell PISO.AI von Nelson et al. (2020). Es wurden Stationen herangezogen, die für die Entwicklung von PISO.AI nicht verwendet wurden.

Von Giustini et al. (2016) liegt für das gesamte Gebiet von Italien ein Muster von mittleren Sauerstoff-18 Gehalten vor. Aus dem Modell von Bowen und Wilkinson (2002) wurde der Ansatz mit der Seehöhe und der geographischen Breite verwendet. Die Karte basiert auf Daten unterschiedlicher Datenquellen und aus unterschiedlichen Messzeiträumen (Daten bis 2012); bei den meisten Werten handelt es sich um niederschlagsgewichtete Mittelwerte. Daten aus den Nachbarländern Frankreich, Schweiz, Österreich, Slowenien und Kroatien wurden ebenfalls einbezogen. Die Karte wurde umprojiziert und gemeinsam mit den Ergebnissen der $\delta^{18}\text{O}$ Interpolation der Schweiz („GEO+N“, als niederschlagsgewichtetes Mittel im Zeitraum 01/2007 bis 12/2012) in Abbildung 21 dargestellt. Das italienische Raster ist mit 1 km etwas gröber aufgelöst, weshalb vor allem die steile Topographie geglättet wird. Trotz der teilweise sehr unterschiedlichen Datenzeiträume in Italien – es wurden auch viele Daten aus den 1990er Jahren verwendet – stimmen die Muster im Übergangsbereich an den Landesgrenzen recht gut überein, vor allem im Bereich des Tessin. In den hochalpinen Bereichen im Südwesten und Südosten der Schweiz sind die Isoscapes aus dem vorliegenden Projekt etwas niedriger (Abweichungen bis maximal -4 ‰). Neben den Diskrepanzen bei den Datenzeiträumen ist dies auch durch die geglättete Topographie im italienischen Raster erklärbar.

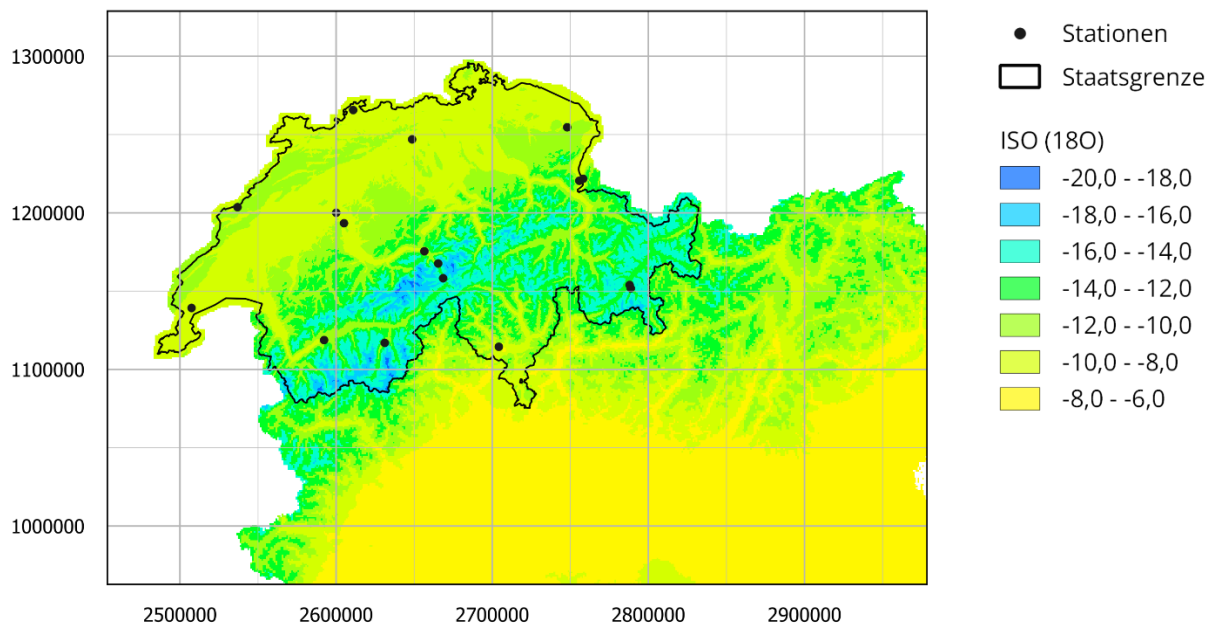


Abbildung 21: Gemeinsame Darstellung der Muster von Giustini et al. (2016) für Italien und der, mit der Methode „GEO+N“, berechneten, niederschlagsgewichteten Isoscapes für die Schweiz im Zeitraum 01/2007 bis 12/2012. Beides für Sauerstoff-18.

4.5 Ergebnisse der Deuterium - Berechnung

Aus der Berechnung der ^2H -Isotopenwerte mithilfe der Kreuzvalidierung geht die Methode „GEO+N“ ebenso in beiden Zeiträumen als beste Methode hervor (MAE 2007-2013 = 6.69 ‰ für das UG und 10.53 ‰ für die Schweiz; MAE 2014-2020 = 10.02 ‰ für das gesamte UG und 10.34 ‰ für die Schweiz) (Abbildung 22 und Abbildung 23). Die Methoden „GEO“ und „ELE“ ergeben wiederum die zweit- und drittbesten Fehler. Auf die Darstellung der Unterschiede mit und ohne Residueninterpolation wird hier verzichtet.

Wie bereits in Kapitel 4.3.2 für ^{18}O dargestellt, ist auch bei ^2H der mittlere absolute Fehler für die Schweiz etwas höher als für das gesamte UG. Der geringste Unterschied wird bei der Methode „GEO+N“ erreicht.

Die höchsten MAE der Methode „GEO+N“ (Werte für 2007-2013) treten, ebenso wie bei der ^{18}O -Kreuzvalidierung, in Sion (MAE = 16.20 ‰), Graechen-St.Niklaus (MA = 14.32 ‰), Locarno (MAE = 24.28 ‰) und Pontresina_alt (MAE = 15.55 ‰) auf. Im restlichen UG ergibt sich durchschnittlich ein MAE von 8.37 ‰. Prozentuell gesehen sind die Abweichungen im Mittel über das gesamte UG bei ^2H und ^{18}O sehr ähnlich (12 % bzw. 11 %).

Die Ergebnisse zeigen, dass die ausgewählte Methode sowohl für die Sauerstoff-18 auch für die Deuterium-Isotopenrasterberechnung verwendet werden kann.

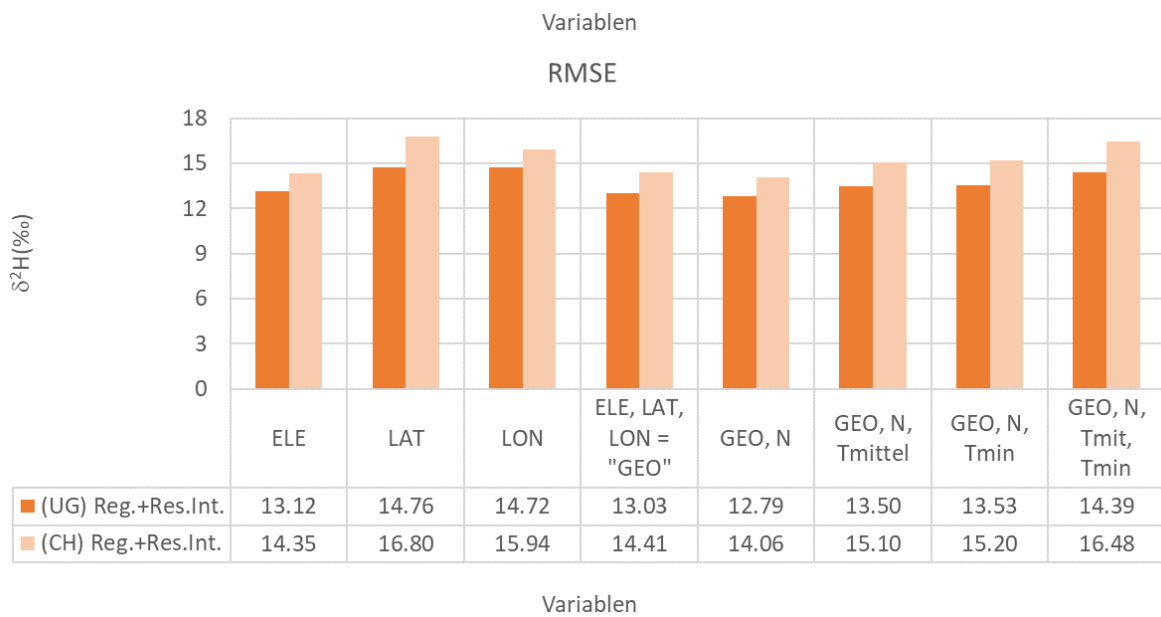
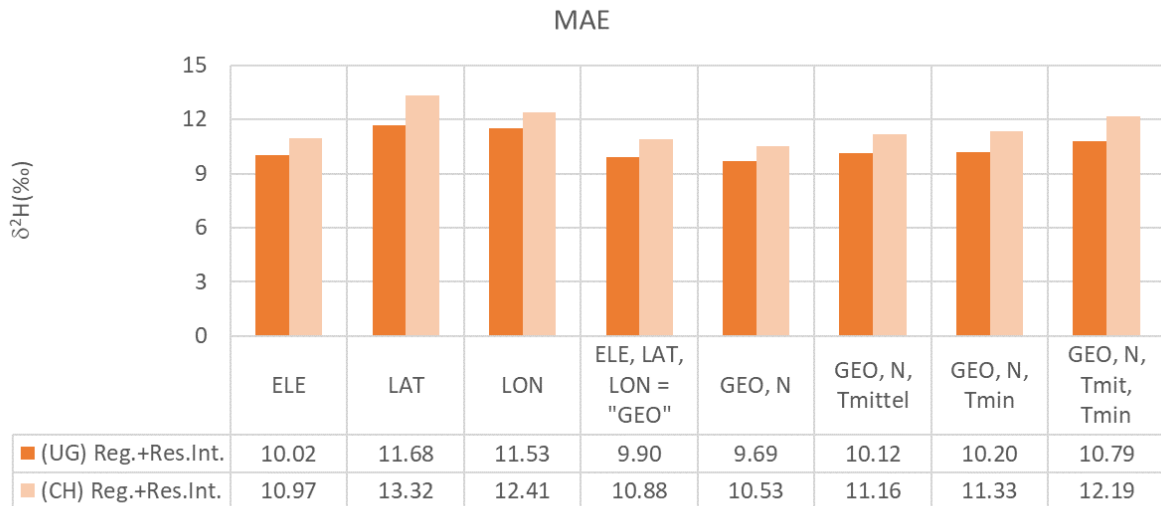
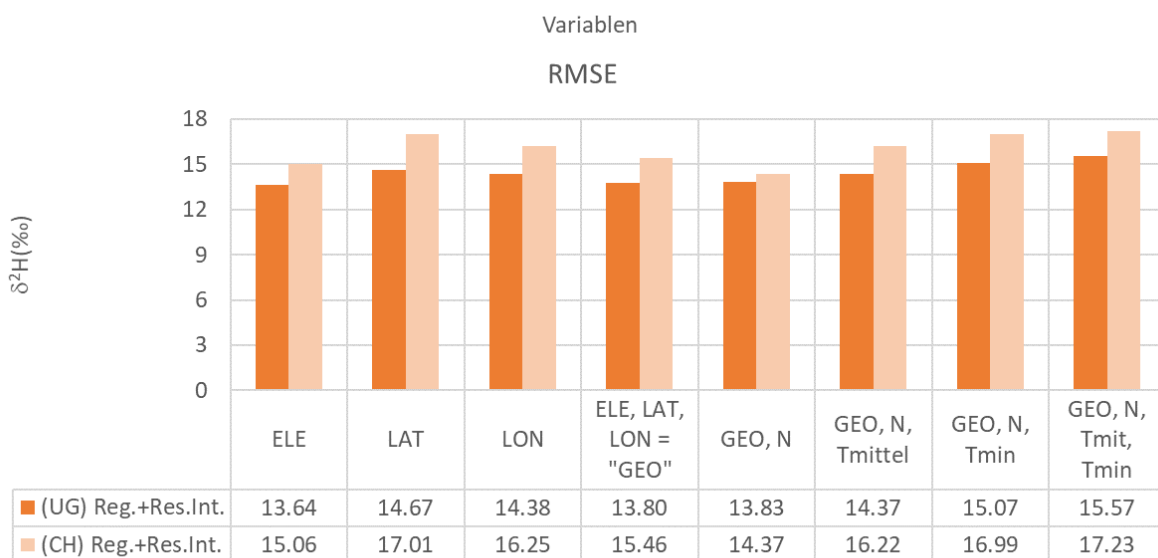
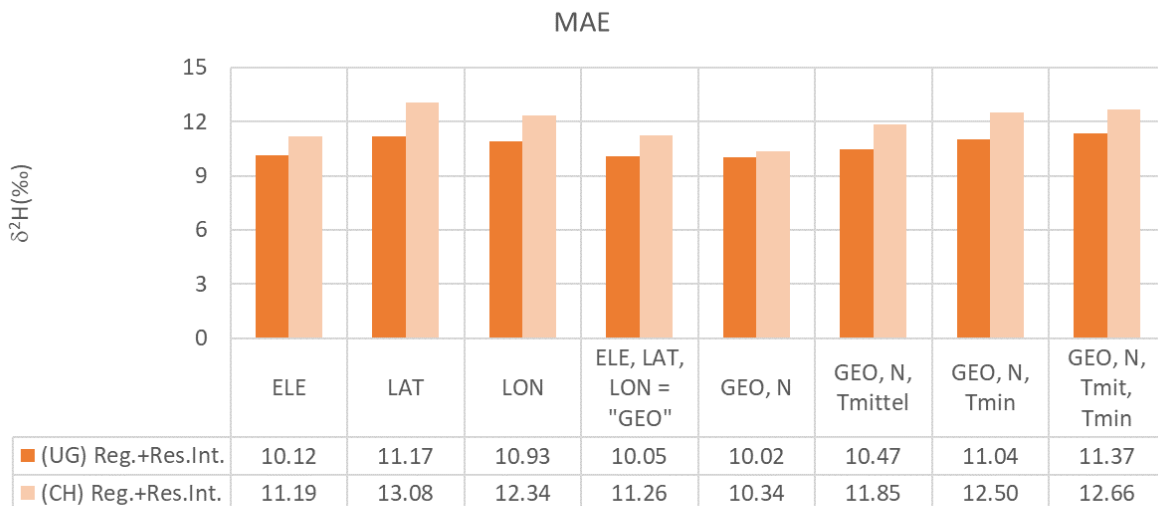


Abbildung 22: Statistische Größen der Kreuzvalidierung der ²H-Isotopenwerte mit Residueninterpolation im Zeitraum 2007-2013 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).



Variablen

Abbildung 23: Statistische Größen der Kreuzvalidierung der ²H-Isotopenwerte mit Residueninterpolation im Zeitraum 2014-2020 für das gesamte Untersuchungsgebiet (UG) im Vergleich zu den Schweizer Stationen (CH).

Wie für Sauerstoff-18 wurden auch für Deuterium die Ergebnisse an den ausgewählten Stationen Basel (BAS), Grimsel (GRI), Pontresina_alt (PON1) und Locarno (LOC) in Abbildung 24 als Ganglinien über den Zeitraum 2012-2020 dargestellt. Im Grunde sind die Ergebnisse äquivalent zu jenen von Sauerstoff-18 (vgl. Abbildung 13). Die Ergebnisse für Basel sind ausgezeichnet. Ebenso sind die Ergebnisse für Grimsel und Pontresina_alt als sehr gut anzusehen. Wie bei ¹⁸O zeigen sich bei ²H höhere Abweichungen in Locarno.

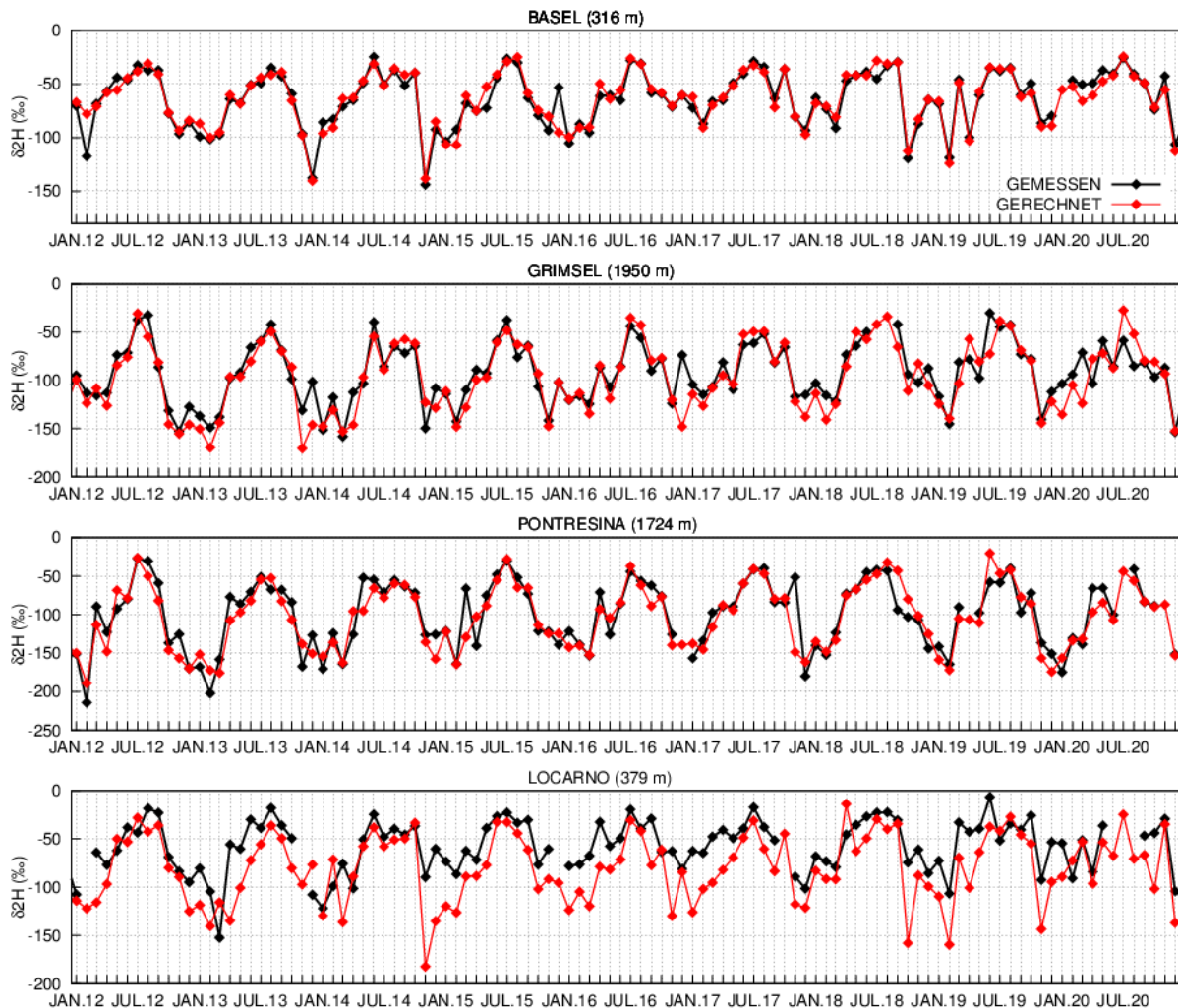


Abbildung 24: Ganglinie der gemessenen und durch Kreuzvalidierung gerechneten 2H-Werte vier beispielhaft ausgewählten Stationen der Schweiz im Zeitraum 2012-2020.

4.6 Validierung der Isoscapes an Quellen- und Brunnenmessungen

Zur zusätzlichen Validierung der berechneten Isoscapes wurden Einzugsgebietsgrenzen von 50 Quellen- und Brunneneinzugsgebieten mit Aktualitätsstand 2022 herangezogen. Diese entstammen dem Nationalen Grundwasser-Monitoring (NAQUA) und wurden vom BAFU zur Verfügung gestellt. Bei zwei Einzugsgebieten (EZGs), NTG47 und NTG50 wurde das 2012 kartierte EZG für das Jahr 2022 in zwei Polygone aufgeteilt. Zur Analyse wird jeweils jenes herangezogen das sich besser mit den Grenzen von 2012 deckt. Somit entfallen die EZG-Polygone NTG47A und NTG50A aus der Analyse.

Im ersten Schritt wurden niederschlagsgewichtete Mittel der Isoscapes-Ergebnisraster über ein Jahr (im Zeitraum 08/12 bis 08/13) gebildet. Die Pixelwerte innerhalb der Polygongrenzen wurden gemittelt, wobei bei durch eine Grenze durchschnittenen Pixeln eine zusätzliche Gewichtung nach Anteil der Pixelfläche am Polygon berücksichtigt wird. Die extrahierten Sauerstoff-18-Isotopenwerte pro EZG wurden in Abbildung 25 mit den über 2013 gemittelten Sauerstoff-18-Messungen an den zur Verfügung stehenden 50 Quellen und Brunnen verglichen (Abbildung 25 links).

Im Mittel werden absolute Abweichungen von 0.91 ‰ erreicht. Viele der gemittelten ¹⁸O-Isotopenwerte aus den Isoscapes deuten auf isotopisch angereicherte Wässer (höhere

Isotopenkonzentration) hin als die Messungen. Dies ist darin begründet, dass die Jahresmitteltemperatur 2013 fast um ein Grad geringer und die Niederschlagsmengen höher waren als im langjährigen Mittel von 2007-2012. Schneereiche Jahre wirken sich in Form von geringeren Isotopenkonzentrationen aus.

Aufgrund dieser Diskrepanzen wurden die niederschlagsgewichteten Isotopenwerte aus den Isoscapes auch für einen Berechnungszeitraum von sieben Jahren (2007-2013) ermittelt und mit den Messdaten, gemittelt im Jahr 2013, verglichen (Abbildung 25 rechts). In dem langen Vergleichszeitraum werden jährliche, meteorologische Schwankungen in den Niederschlägen herausgemittelt. Die Werte sind nun besser um die 1:1 Linie zentriert. Die mittlere absolute Abweichung von den Messwerten verringert sich dabei auf 0.72 ‰. Anzumerken ist hier, dass diese Abweichung deutlich geringer ist als die mittleren Fehler aus der Kreuzvalidierung.

Nur vereinzelte EZGs können durch die Isoscapes nicht entsprechend abgebildet werden (Abbildung 25). Beispiele hierfür sind die EZGs NTG20, NTG19 und NTG50, deren Isotopenkonzentrationen zu hoch eingeschätzt werden (Werte deutlich über der 1:1 Linie). Räumlich dargestellt und rot gefärbt sind diese in Abbildung 26. Bei diesen Messstellen ist – auch teilweise festgehalten in der mitgelieferten Meta-Information – der Einfluss von Flusswasser signifikant. Für die Extrahierung von Werten aus den Isoscapes müsste daher das gesamte Einzugsgebiet des Flusses verwendet werden. Die Einzugsgebiete der betreffenden Flüsse (z.B. der Messstelle NTG20 im Rhonetal und NTG19 und NTG50 im Rheintal) reichen mitunter bis in hochalpine Bereiche. Aus den Isoscapes würden sich daher deutlich niedrigere, d.h. abgereicherte, Werte ergeben, welche besser zu den sehr niedrigen Messwerten passen.

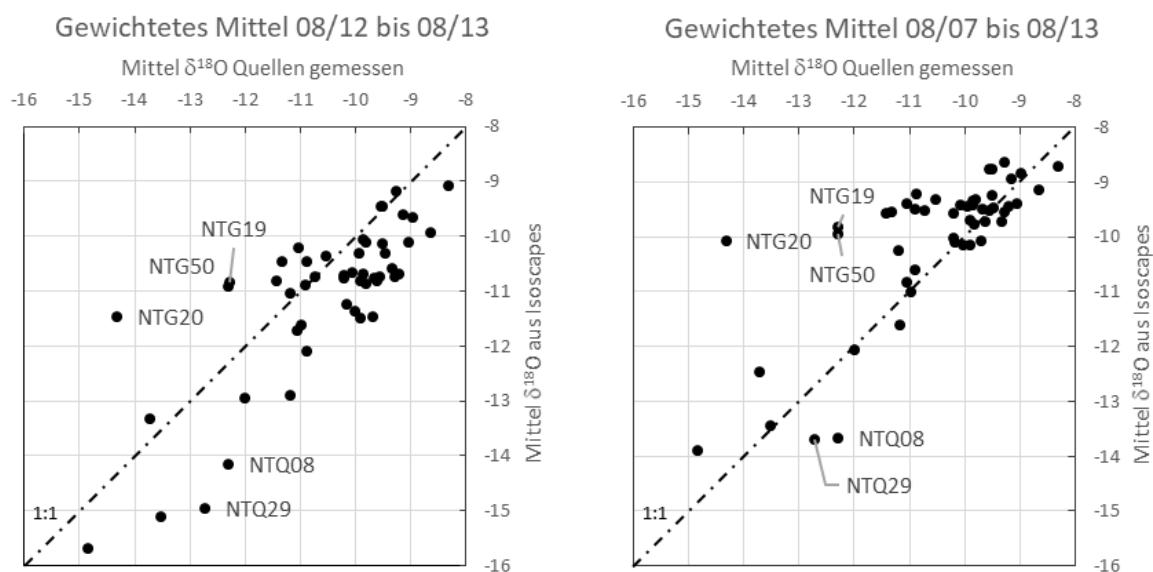


Abbildung 25: Vergleich der Mittelwerte der ^{18}O -Gehalte im Jahr 2013 an ausgewählten Quellen mit den gewichteten Mitteln über ein Jahr (links) und sieben Jahre (rechts) aus den Isoscapes.

Geringere Isotopenkonzentrationen als aus den Messwerten ersichtlich (Werte unter der 1:1 Linie), werden beispielsweise für die EZGs NTQ08 und NTQ29 berechnet. In der räumlichen Darstellung in Abbildung 26 sind diese blau und NTQ29, wenige Kilometer nordöstlich gelegen, weiß gefärbt. Beide befinden sich im Tessin an der Grenze zum Hochgebirge. Diese Abweichung von der 1:1 Linie dürfte an den Unsicherheiten in den Isoscapes in diesem Bereich liegen. Diese erklären sich durch die dort verlaufende Klimagrenze und wurden in den vorangegangenen Kapiteln dargelegt. In diesem

Zusammenhang wird nochmals darauf hingewiesen, dass das im Tessin gelegene Locarno nicht gut mit der nächstgelegenen Hochgebirgsstation Grimsel-Hospiz korreliert, was die Qualität der Interpolation im Übergangsbereich beeinträchtigt.

Einen räumlichen Überblick bietet die folgende Abbildung 26, in welcher die Ergebnisse vor dem Hintergrund des langjährigen, niederschlagsgewichteten Sauerstoff-18-Rasters (vgl. Abbildung 25 rechts) in einer Karte dargestellt werden. Wie zuvor erwähnt werden die Isotopenkonzentrationen von EZGs vor allem in Flusstälern mit hoch reichenden Einzugsgebieten überschätzt (rot, orange). In tieferen Lagen gebildete Wässer können durch die Isoscapes meist mit einer geringen Differenz von -1 bis 1‰ (weiß) abgebildet werden. In wenigen EZGs werden die Isotopenkonzentrationen unterschätzt (blau). Diese liegen, wie zuvor erwähnt, meist im Tessin bzw. an der Klimagrenze zum Alpenhauptkamm.

Validierung der Isoscapes an Quellen- und Brunnenmessungen

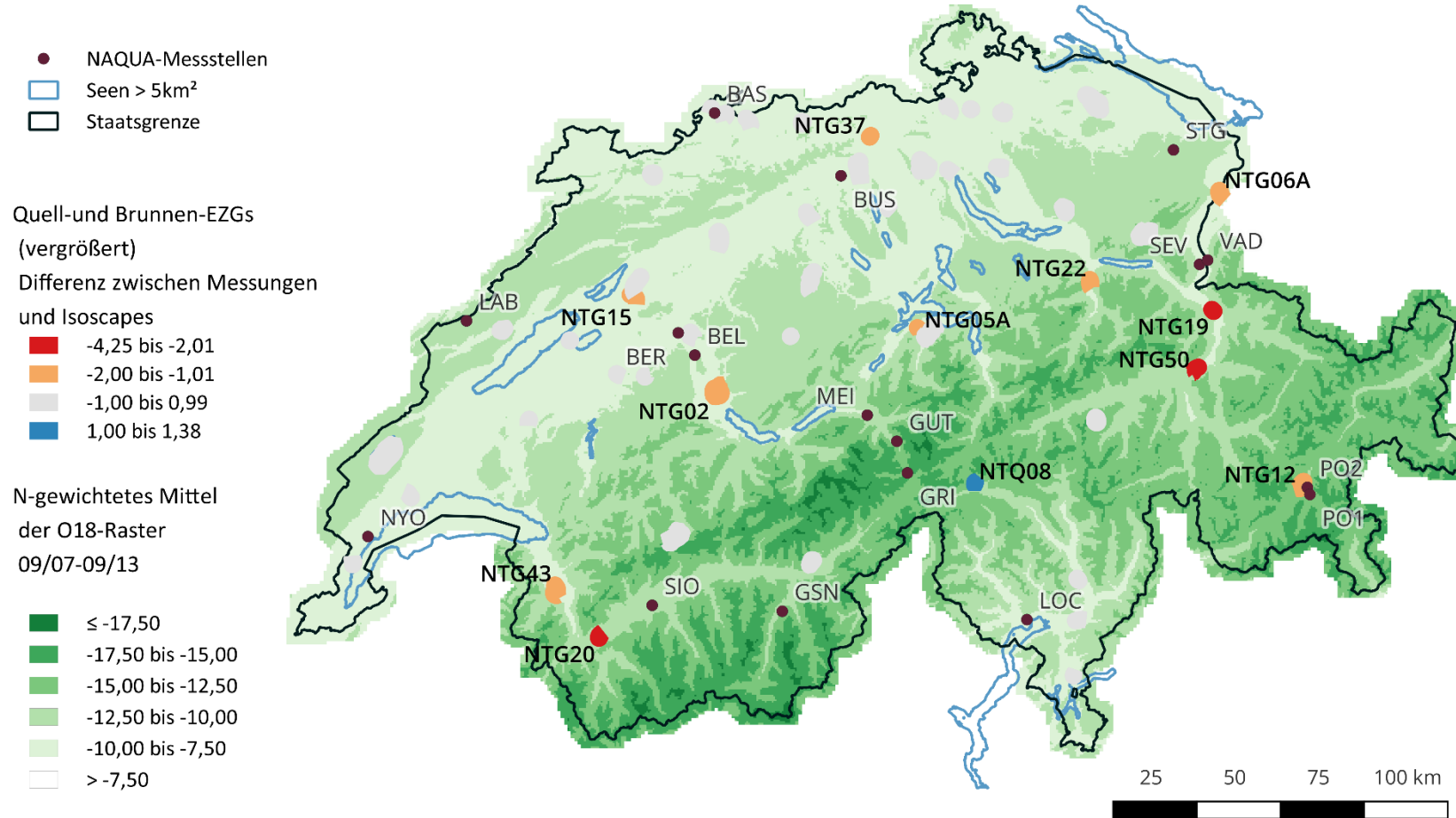


Abbildung 26: Validierung anhand der Differenz zwischen Quellen- und Brunnenmessungen und einzugsgebietgemittelten Rasterwerten aus den Isoscapes. Meist werden die Messwerte unterschätzt (orange und rot), in wenigen Fällen überschätzt (blau). Zur besseren Lesbarkeit sind die EZGs vergrößert abgebildet und nur jene namentlich gekennzeichnet, die außerhalb des geringen Differenzbereiches von -1 bis 1‰ liegen (weiß). Im Hintergrund dargestellt ist das N-gewichtete Mittel der monatlichen ¹⁸O-Raster im Zeitraum 09/07 bis 09/13.

4.7 Beispiele von Verweilzeitberechnungen mit den monatlichen Isoscapes

In einer zusätzlichen Auswertung wird auf die Möglichkeiten der Anwendung der Isoscapes zur Ermittlung von Input-Funktionen in Modellen zur Ermittlung von Verweilzeiten bzw. Fließzeiten hingewiesen. In einem ausgewählten Einzugsgebiet wird exemplarisch die relativ einfache „Sinus-Fit“-Methode herangezogen. Bei dieser Methode wird eine Sinusfunktion sowohl an die Isotopenwerte aus dem Niederschlag (Isoscapes) als auch an die Isotopenwerte der Quell- und Brunnenmessungen angepasst. Aus der Differenz der Amplituden wird die mittlere Verweilzeit T berechnet (z.B. Rodgers et al., 2005):

$$T = c^{-1} \left[\left(\frac{A_Q}{A_P} \right)^{-2} - 1 \right]^{0.5}$$

A_Q ist die Amplitude der gefitteten Sinus-Funktion an die Schüttungsdaten, A_P ist die Amplitude der gefitteten Sinus-Funktion an die Isotopengehalte im Niederschlag (Input-Funktion). Der Parameter c ist radiale Periodizität über ein Jahr, d.h. im vorliegenden Fall ist $c = 2\pi/12 = 0.52$.

Abbildung 27 zeigt das Ergebnis für das 2.4 km² große, im Lockergestein gelegene, Brunneneinzugsgebiet „NTG43 - Monthey – Boeuferrant“. Die Amplitude bei den Messwerten ergibt sich zu 0.8 ‰. Der Sinus-Fit des EZG gemittelten Niederschlages weist eine Amplitude von 5.8 ‰ auf. Das Bestimmtheitsmaß der beiden Sinus-Fits beträgt $R^2=0.27$ für den Abfluss und $R^2=0.65$ für den Niederschlag. Daraus ergibt sich eine grob geschätzte, mittlere Verweilzeit von rund 14 Monaten.

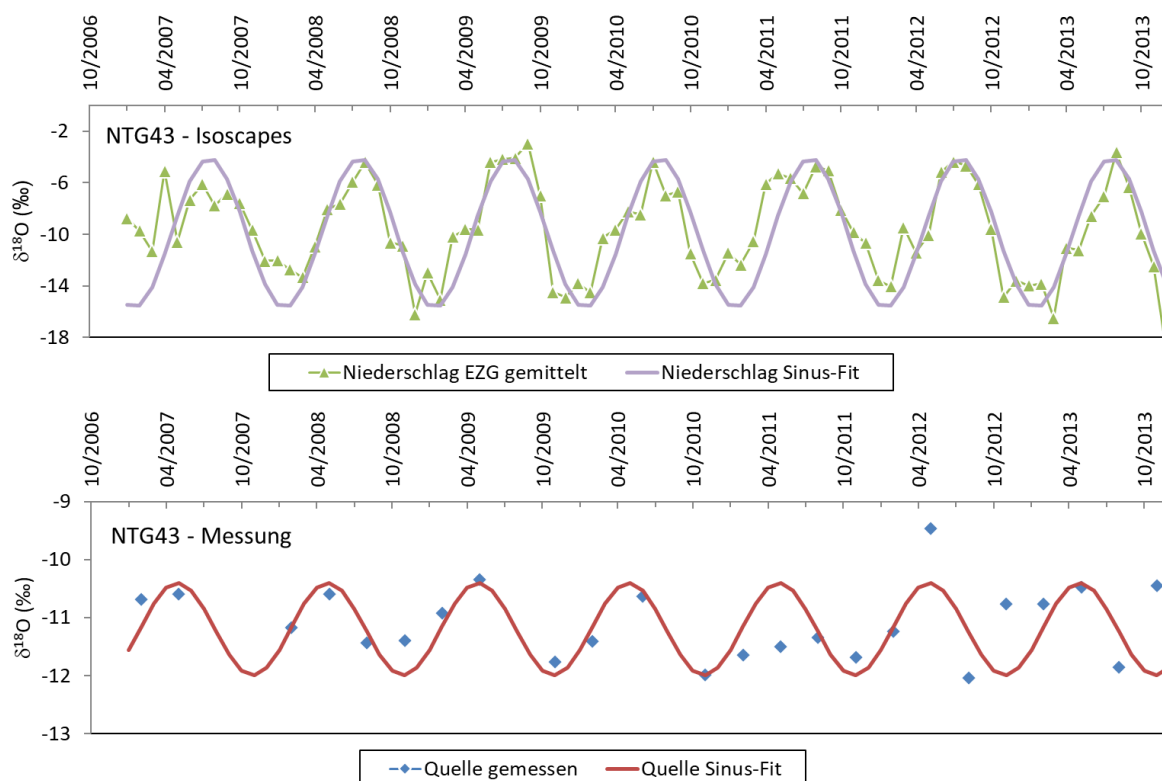


Abbildung 27: Abschätzung der Verweilzeit im Brunneneinzugsgebiet "NTG43 - Monthey – Boeuferrant" durch die „Sinus-Fit“-Methode. Für den Niederschlags-Sinus-Fit wurden die einzugsgebietsgemittelten monatlichen Isoscapes herangezogen.

In einem zweiten Beispiel (hier nicht dargestellt) wurde die mittlere Verweilzeit des 17 km² großen Karstquelleinzugsgebietes „NTQ03 - L'Abbaye - La Lionne“ berechnet. Bei guten Anpassungen der Sinus-Funktionen ($R^2=0.57$ für den Niederschlag und $R^2=0.60$ für den Abfluss) ergab sich eine mittlere Verweilzeit von rund 8 Monaten.

Die beiden Beispiele ergaben plausible Schätzungen mit den typischerweise in Karstgebieten deutlich geringeren Verweilzeiten. Mit abnehmender Amplitude der Isotopenwerte der Quell- und Brunnenmessungen verringert sich aber die Zuverlässigkeit der Aussagen über die Verweildauer. Ebenso sind lange kontinuierliche Zeitreihen für ein verlässliches Ergebnis notwendig.

5 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Ziel dieser Studie war es, für das Gebiet der Schweiz ein Modell für räumliche Muster der Isotopengehalte im Niederschlag (sogenannte „Isoscapes“) zu erstellen. Nach einer umfangreichen Datenprüfung und Einbeziehung von Stationen in den Nachbarstaaten wurde ein Tool entwickelt, mit welchem Isoscapes in relativ hoher räumlicher Auflösung (500 m) unter Berücksichtigung mehrerer geographischer und klimatischer Variablen ermittelt werden können. Das Tool besteht aus einer Mehrfachregression, bei welcher die Variablen ausgewählt werden können, und einer nachgeschalteten Interpolation der Residuen mit Ordinary Kriging. Aus der Testung mehrerer Varianten anhand einer Kreuzvalidierung ging die Variante unter Verwendung der topographischen Variablen zusammen mit den monatlichen Niederschlagssummen als Zusatzinformation (Methode „GEO+N“) als beste Methode hervor. Folgende, in den beiden Tabellen (Tabelle 6 und Tabelle 7) aufgelistete Genauigkeiten bzw. Interpolationsfehler sind dabei zu erwarten. Bei den Schweizer Stationen variieren die mittleren absoluten Fehler (MAE) je nach Betrachtungszeitraum zwischen 1.25 und 1.31 ‰ für $\delta^{18}\text{O}$ und 10.34 und 10.53 ‰ für $\delta^2\text{H}$. Bei Betrachtung des gesamten Modellenwicklungsgebietes inclusive räumlich nahegelegener Stationen außerhalb der Schweiz werden die Fehler noch geringer.

Tabelle 6: Mittelwerte der Interpolationsfehler aus der Kreuzvalidierung betreffend Sauerstoff-18 (^{18}O).

Zeitraum	Mittel über die Stationen in der Schweiz		Mittel über alle verwendeten Stationen	
	MAE (‰)	RMSE (‰)	MAE (‰)	RMSE (‰)
2007-2013	1.31	1.74	1.22	1.61
2014-2020	1.35	1.85	1.27	1.75
2013	1.48	1.91	1.33	1.69
2020	1.39	1.73	1.33	1.75

Tabelle 7: Mittelwerte der Interpolationsfehler aus der Kreuzvalidierung betreffend Deuterium (²H).

Zeitraum	Mittel über die Stationen in der Schweiz		Mittel über alle verwendeten Stationen	
	MAE (‰)	RMSE (‰)	MAE (‰)	RMSE (‰)
2007-2013	10.53	14.06	9.69	12.79
2014-2020	11.03	15.25	10.02	13.83
2013	11.94	15.50	10.65	13.63
2020	10.64	13.42	10.22	13.42

Im Zuge detaillierter Fehleranalysen zeigte sich, dass die Modellgüte der Isoscapes in Abhängigkeit von der betrachteten Station, dem beobachteten Zeitraum und dem generellen Jahresverlauf regional deutliche Unterschiede aufweisen kann. Im Norden der Schweiz mit geringen Höhenunterschieden konnten die gemessenen Isotopengehalte im Niederschlag sehr gut wiedergegeben werden. Für ¹⁸O-Werte variieren die MAE aus der Kreuzvalidierung im Bereich von 0.6 ‰ (z.B. Station Sevelen) bis 0.8 ‰ (z.B. Stationen Basel, Belp, St. Gallen). Im hochalpinen Bereich konnten bei den Stationen Meiringen, Guttanen, Grimsel ebenfalls relativ gute Ergebnisse erzielt werden (MAE im Bereich von 0.9 bis 1.5 ‰). Auch im Westen der Schweiz (Stationen Nyon, La Brevine) sind die Ergebnisse noch zufriedenstellend.

Im Wallis (aufgelassene Station Sion und Station Graechen-St.Niklaus) und im Südosten des Gebietes (Station Pontresina_alt) wurden hingegen höhere Fehler in der Kreuzvalidierung verzeichnet. Die MAE für ¹⁸O liegen beispielsweise im Bereich von 2 ‰.

Die höchsten Unsicherheiten in den Isoscapes treten im Tessin auf. Bei Wegfall der Station Locarno wurden bei der Interpolation anhand der umliegenden Stationen, die bereits in anderen Klimazonen liegen, die höchsten Fehler ermittelt. Die Kreuzvalidierung ergab für den Standort der Station Locarno z.B. für die ¹⁸O-Werte einen mittlere absoluten Fehler von über 3 ‰. Dazu muss aber angemerkt werden, dass sich diese Fehler nur bei Wegfallen der Station Locarno ergeben; wenn diese Station aber Daten liefert, sind die Isocapes in der Region um Locarno gut abgesichert.

In den letztgenannten Bereichen (Wallis, Osten, Tessin) wird empfohlen, die Dichte an Stationen zu erhöhen. Konkret wären eine Wiederaufnahme der Messungen im Bereich Sion, eine weitere Station im Osten, zwischen Sevelen und Pontresina_alt, und vor allem eine zusätzliche Station im Tessin, bzw. nahe des Übergangs zum Alpenhauptkamm, besonders von Vorteil.

Das Modell wurde anhand der Daten in den Zeiträumen 2007 bis 2020 entwickelt. Übergeben werden monatliche Raster in den Jahren 2013 und 2020 in 500 m Auflösung. Das Modell ist so aufgebaut, dass es relativ einfach auf weitere Zeiträume oder (Teil-)Regionen angewendet werden kann. Auch das Hinzuziehen von zusätzlichen Stationen (z.B. Italien, Frankreich) oder weiteren Klimavariablen, die künftig flächenhaft zur Verfügung stehen können, ist möglich.

Schließlich wird im Anhang auch ein Überblick über die bisher erfolgten Präsentationen bzw. Publikationen der Arbeiten gegeben.

6 Literaturverzeichnis

- Bowen, G.J. und Revenaugh, J. (2003): Interpolating the isotopic composition of modern meteoric precipitation. *Water Resour. Res.* Vol. 39, no. 10, 1299, doi:10.1029/2003WR002086, 2003.
- Bowen, G. J., und Wilkinson, B. (2002): Spatial distribution of $\delta^{18}\text{O}$ in meteoric precipitation. *Geology*, 30(4), 315-318.
- Courtiol, A., Rousset, F., Rohwaeder, M.-S., Kramer-Schadt, S. (2016). Isoscape Computation and Inference of Spatial Origins Using Mixed Models. <https://CRAN.R-project.org/package=IsoriX>
- Courtiol, A., Rousset, F. (2017). Modelling isoscapes using mixed models, <https://www.biorxiv.org/content/early/2017/10/23/207662>
- Giustini, F., Brilli, M., Patera, A. (2016): Mapping oxygen stable isotopes of precipitation in Italy. *Journal of Hydrology: Regional Studies*. Volume 8, December 2016, Pages 162-181.
- Kern, Z., Kohán, B., und Leuenberger, M. (2014): Precipitation isoscape of high reliefs: interpolation scheme designed and tested for monthly resolved precipitation oxygen isotope records of an Alpine domain. *Atmos. Chem. Phys.*, 14, 1897–1907, 2014; doi:10.5194/acp-14-1897-2014.
- Liebming, A., Haberhauer, A., Varmuza, K., Papesch, W. und Heiss, G. (2006): Modeling the oxygen 18 concentration in precipitation with ambient climatic and geographic parameters. *Geophysical Research Letters*, Vol. 33, L05808, doi:10.1029/2005GL025049, 2006.
- Lykoudis, S. P., und A. A. Argiriou (2007): Gridded data set of the stable isotopic composition of precipitation over the eastern and central Mediterranean, *J. Geophys. Res.*, 112, D18107, doi:10.1029/2007JD008472.
- Pebesma, E. J. und Wesseling, C.G. (1998). Gstat: a program for geostatistical modelling, prediction and simulation. *Computers & Geosciences* 24.1 (1998): 17-31.
- Pebesma, E. J. (2004): Multivariable geostatistics in S: the gstat package. *Computers & geosciences* 30.7 (2004): 683-691.
- Rodgers, P., C. Soulsby, S. Waldron & D. Tetzlaff (2005): Using stable isotope tracers to assess hydrological flow paths, residence times and landscape influences in a nested mesoscale catchment. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 9, 139–155, 2005.
- Terzer, S., Wassenaar, L.I., Araguás-Araguás, L.J., and Aggarwal, P.K. (2013): Global isoscapes for ^{18}O and ^2H in precipitation: improved prediction using regionalized climatic regression models. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 17, 4713–4728. Doi:10.5194/hess-17-4713-2013
- Schüepf, M. und Gensler, G. (1980): Klimaregionen der Schweiz. In: Müller G., 1980. Die Beobachtungsnetze der Schweizerischen Meteorologischen Anstalt. Konzept 1980. Arbeitsberichte der Schweizerischen Meteorologischen Anstalt, Nr. 93, Anhang Ib. Zürich.

7 Anhang

7.1 Flussdiagramm im R-Skript

Dateneingabe, –aufbereitung und Plausibilitätsprüfung:

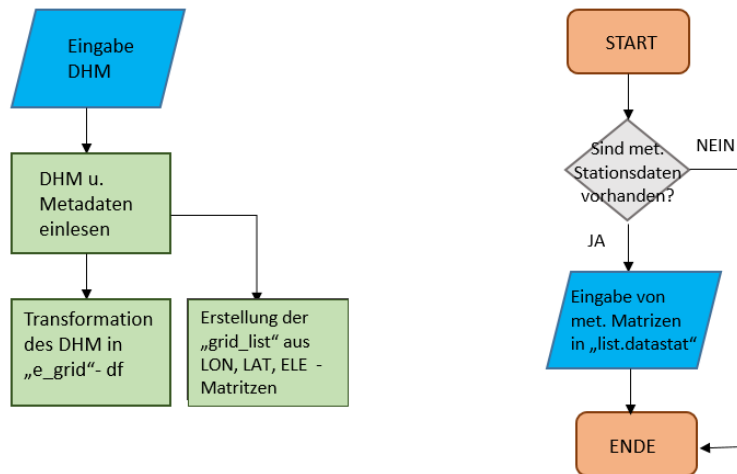


Abbildung 28: Flussdiagramm der Dateneingabe und –aufbereitung (Teil 1).

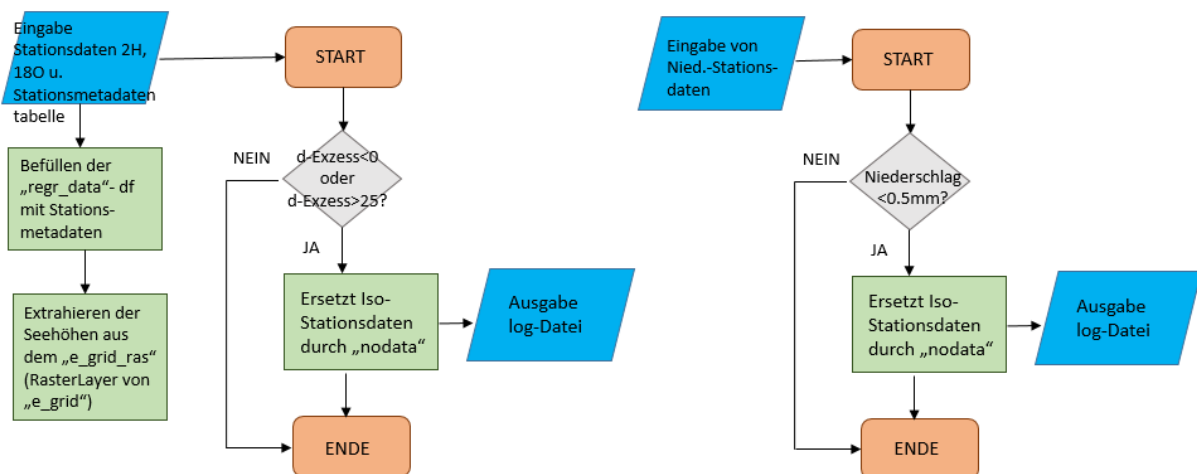


Abbildung 29: Flussdiagramm der Dateneingabe und –aufbereitung (Teil 2).

Monatliche Regression und Residueninterpolation:

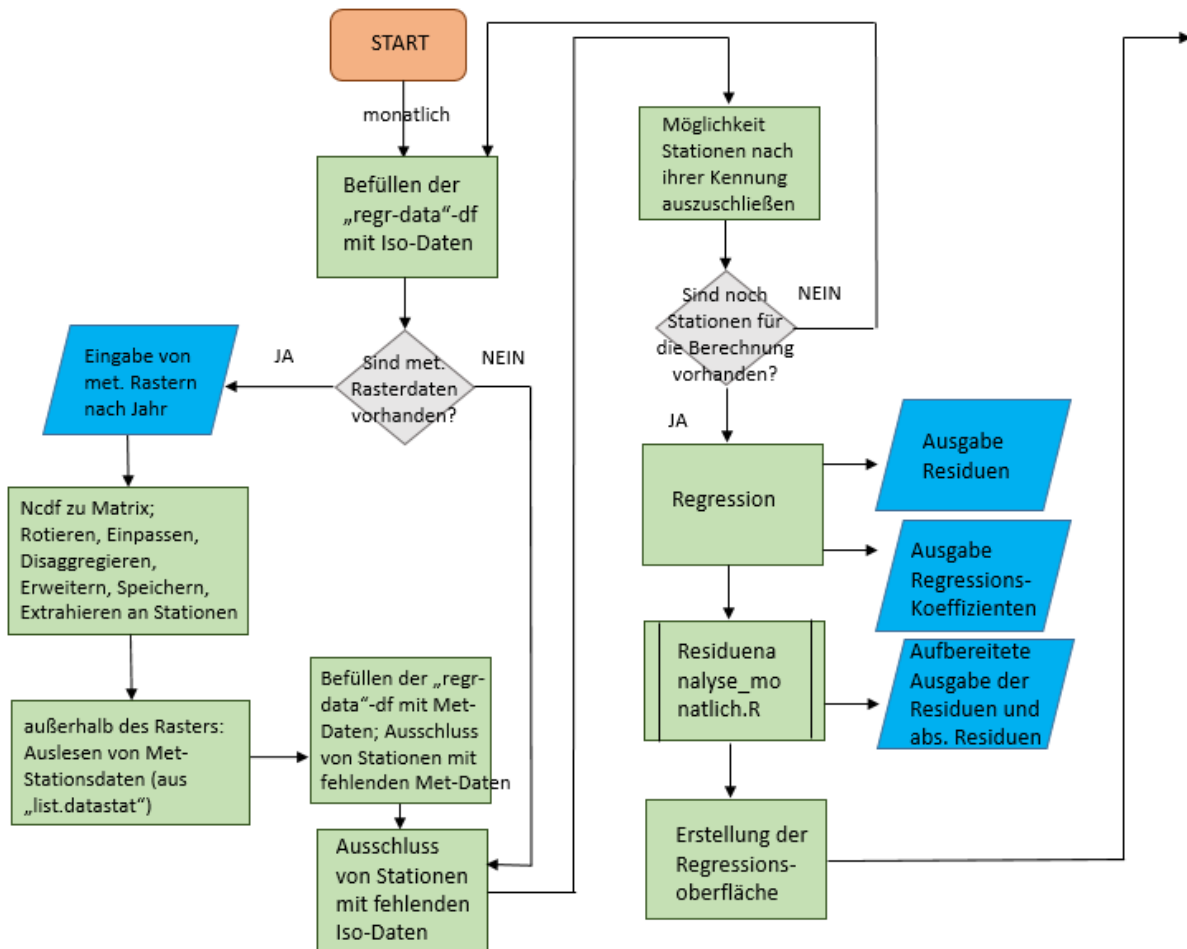


Abbildung 30: Flussdiagramm: Monatliche Regression und Residueninterpolation (Teil 1).

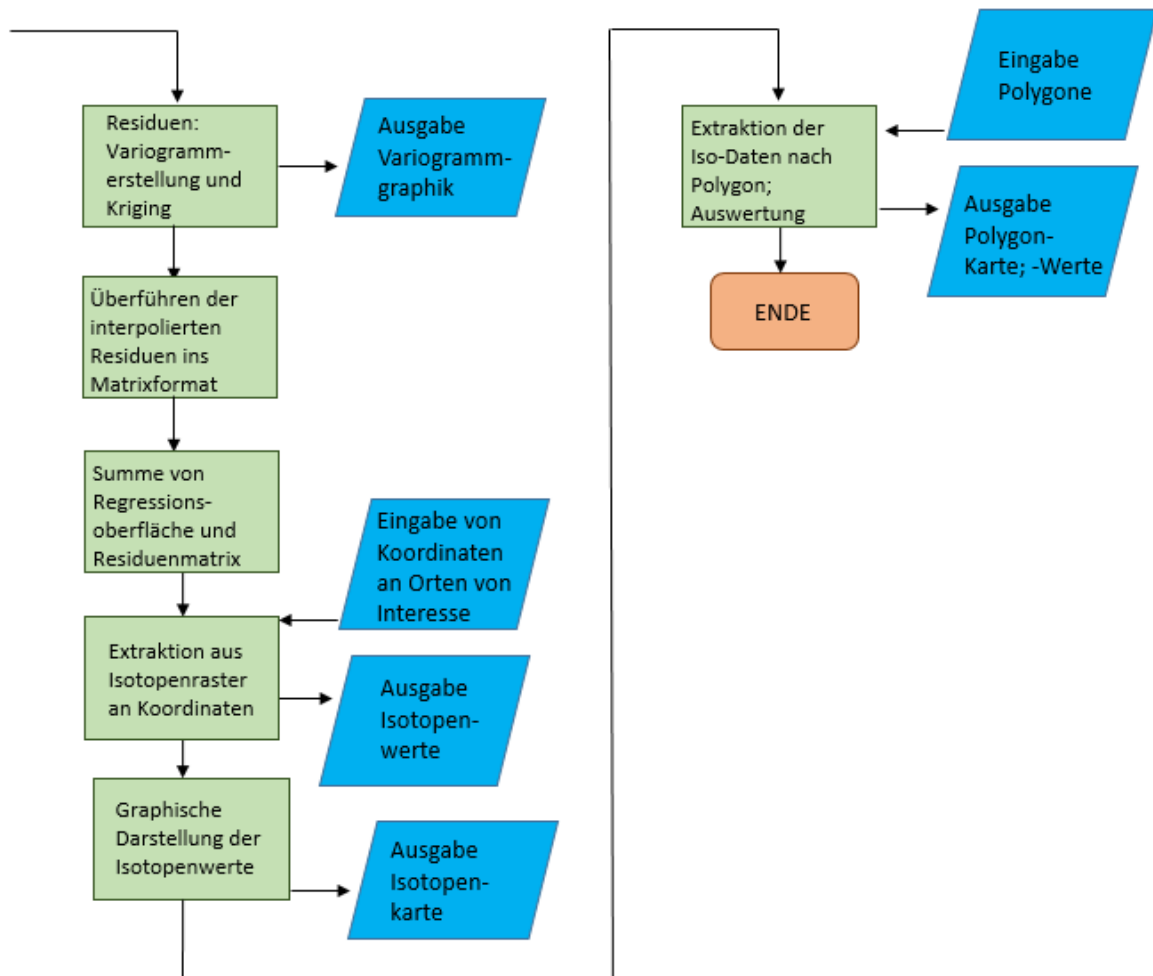


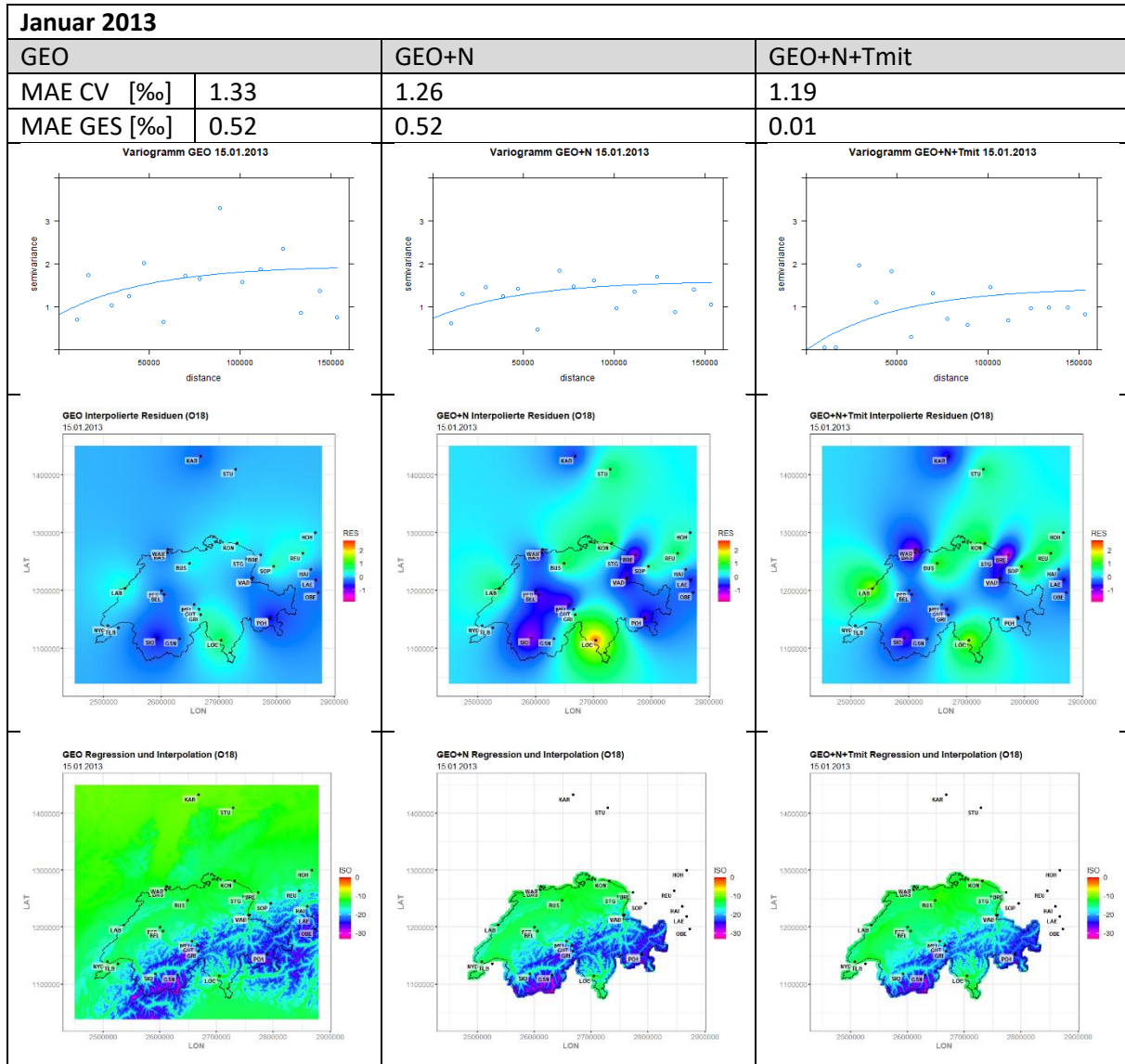
Abbildung 31: Flussdiagramm: Monatliche Regression und Residueninterpolation (Teil 2).

7.2 Vergleichsgraphiken der drei besten Methoden in den Ausgabe-Jahren

In diesem Abschnitt des Anhangs werden die Monate der zwei Berechnungsjahre 2013 und 2020 graphisch dargestellt und gleichzeitig die drei Methoden „GEO“, „GEO+N“ und „GEO+N+Tmit“ verglichen. Unter diesen drei Methoden erfolgte die Auswahl der geeignetsten Methode. Für jede Methode wird der Wert des mittleren absoluten Fehlers der Kreuzvalidierung (MAE CV) und die verbleibende absolute Differenz direkt am Stationsstandort, auch mittlerer absoluter Fehler unter Einbezug aller Stationen (MAE GES), angeführt. Diese verbleibende Differenz hängt mit dem ermittelten Nugget der Residueninterpolation zusammen. Darauf folgen Graphiken der Variogramme der Residuen, das Raster der Residueninterpolation und das Raster der Gesamtergebnisse.

Da die meteorologischen Raster nur für das Gebiet der Schweiz verfügbar sind, beschränken sich die Ergebnisraster unter der Verwendung meteorologischer Variablen in der zweiten und dritten Spalte auf dieses Gebiet. Viele der Abbildungen sind selbsterklärend; auf außergewöhnliche Situationen in machen Monaten wird aber verbal kurz eingegangen.

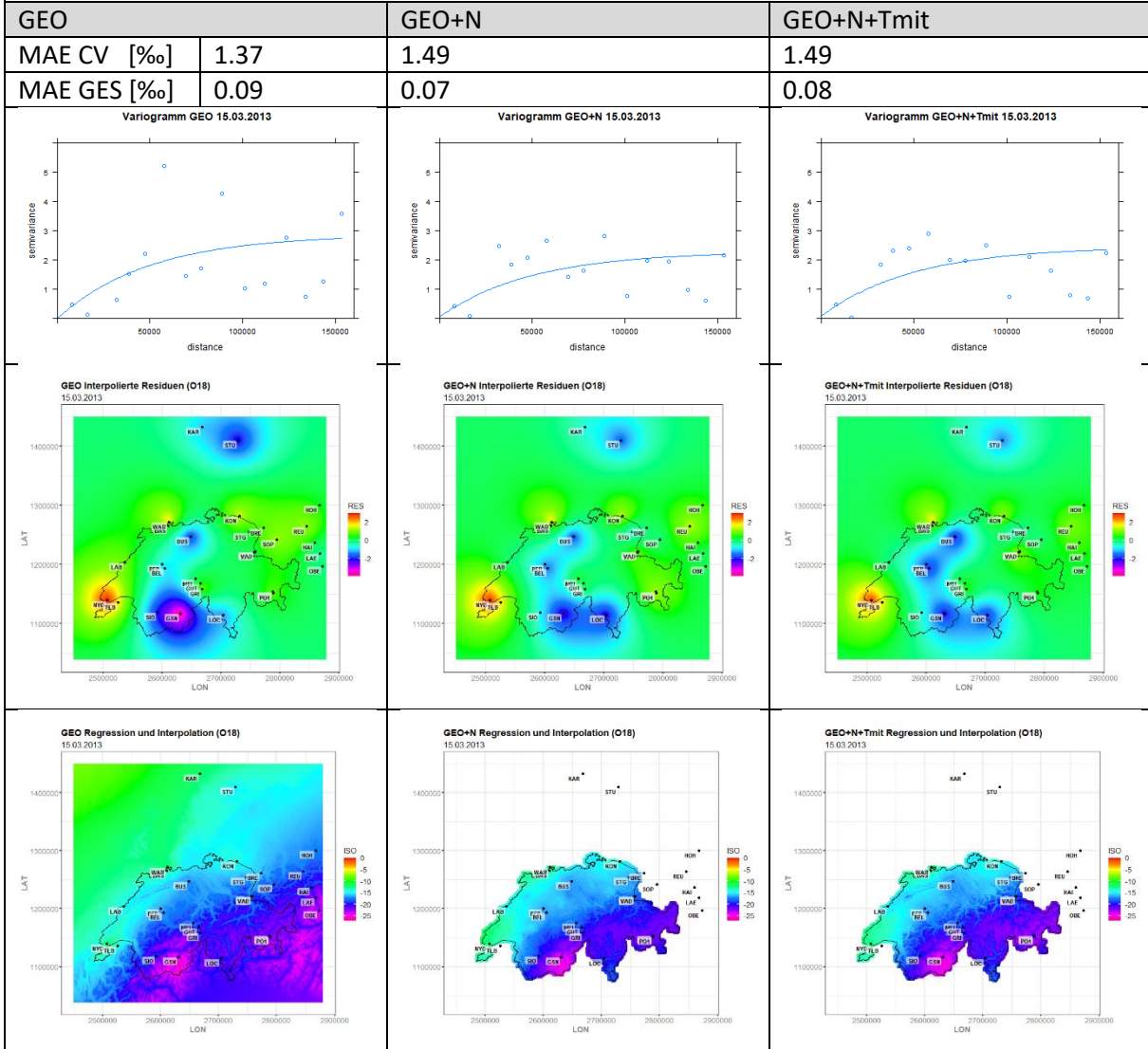
7.2.1 Ausgabe-Jahr 2013



Feber 2013

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.41	1.44	1.40
MAE GES [%o]	0.15	0.10	0.47
<p>Variogramm GEO 15.02.2013</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.02.2013</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.02.2013</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.02.2013</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.02.2013</p>		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.02.2013</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.02.2013</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.02.2013</p>	

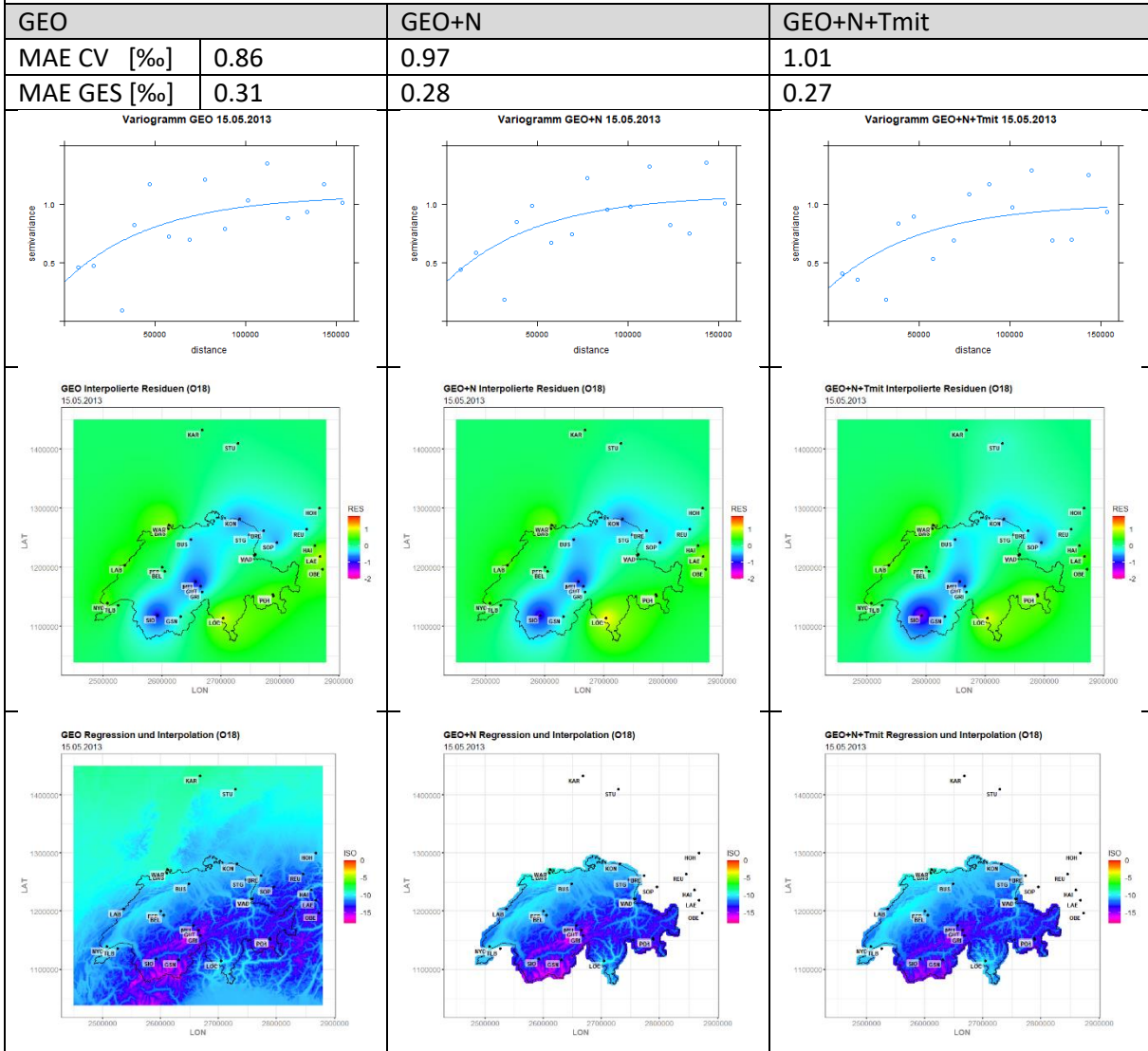
März 2013



April 2013

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%]	1.08	1.33	1.37
MAE GES [%]	0.40	0.22	0.20
<p>Variogramm GEO 15.04.2013</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.04.2013</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.04.2013</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.04.2013</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.04.2013</p>			
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.04.2013</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.04.2013</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.04.2013</p>	

Mai 2013



Juni 2013

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.50	1.55	1.71
MAE GES [%o]	0.63	0.74	0.73

Variogramm GEO 15.06.2013		Variogramm GEO+N 15.06.2013	Variogramm GEO+N+Tmit 15.06.2013
GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.06.2013 		GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.06.2013 	
GEO Regression und Interpolation (O18) 15.06.2013 		GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.06.2013 	
GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.06.2013 		GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.06.2013 	

Juli 2013

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	0.97	1.05	1.19
MAE GES [%o]	0.37	0.33	0.33

Variogramm GEO 15.07.2013		Variogramm GEO+N 15.07.2013	Variogramm GEO+N+Tmit 15.07.2013
GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.07.2013 		GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.07.2013 	
GEO Regression und Interpolation (O18) 15.07.2013 		GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.07.2013 	
GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.07.2013 		GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.07.2013 	

August 2013

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	0.92	0.99	1.09
MAE GES [%o]	0.02	0.01	0.01

Variogramm GEO 15.08.2013		Variogramm GEO+N 15.08.2013	Variogramm GEO+N+Tmit 15.08.2013
GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.08.2013 		GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.08.2013 	
GEO Regression und Interpolation (O18) 15.08.2013 		GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.08.2013 	
GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.08.2013 		GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.08.2013 	

September 2013

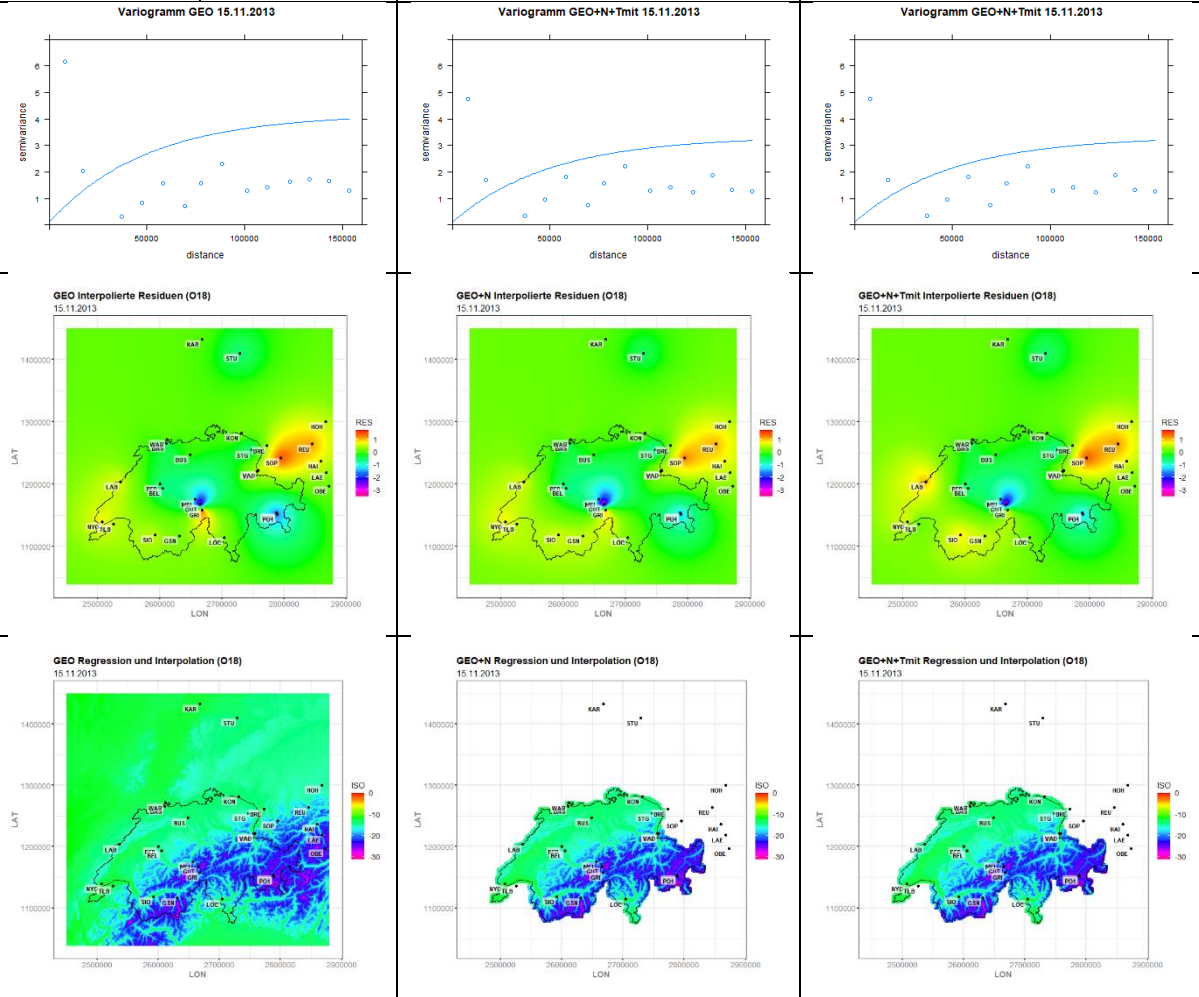
GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.42	1.46	1.52
MAE GES [%o]	0.01	0.00	0.29
<p>Variogramm GEO 15.09.2013</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.09.2013</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.09.2013</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.09.2013</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.09.2013</p>		<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.09.2013</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.09.2013</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.09.2013</p>	
<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.09.2013</p>		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.09.2013</p>	

Oktober 2013

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.14	1.16	1.16
MAE GES [%o]	0.07	0.01	0.01
<p>Variogramm GEO 15.10.2013</p>	<p>Variogramm GEO+N 15.10.2013</p>	<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.10.2013</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.10.2013</p>	<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.10.2013</p>	<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.10.2013</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.10.2013</p>	<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.10.2013</p>	<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.10.2013</p>	

November 2013

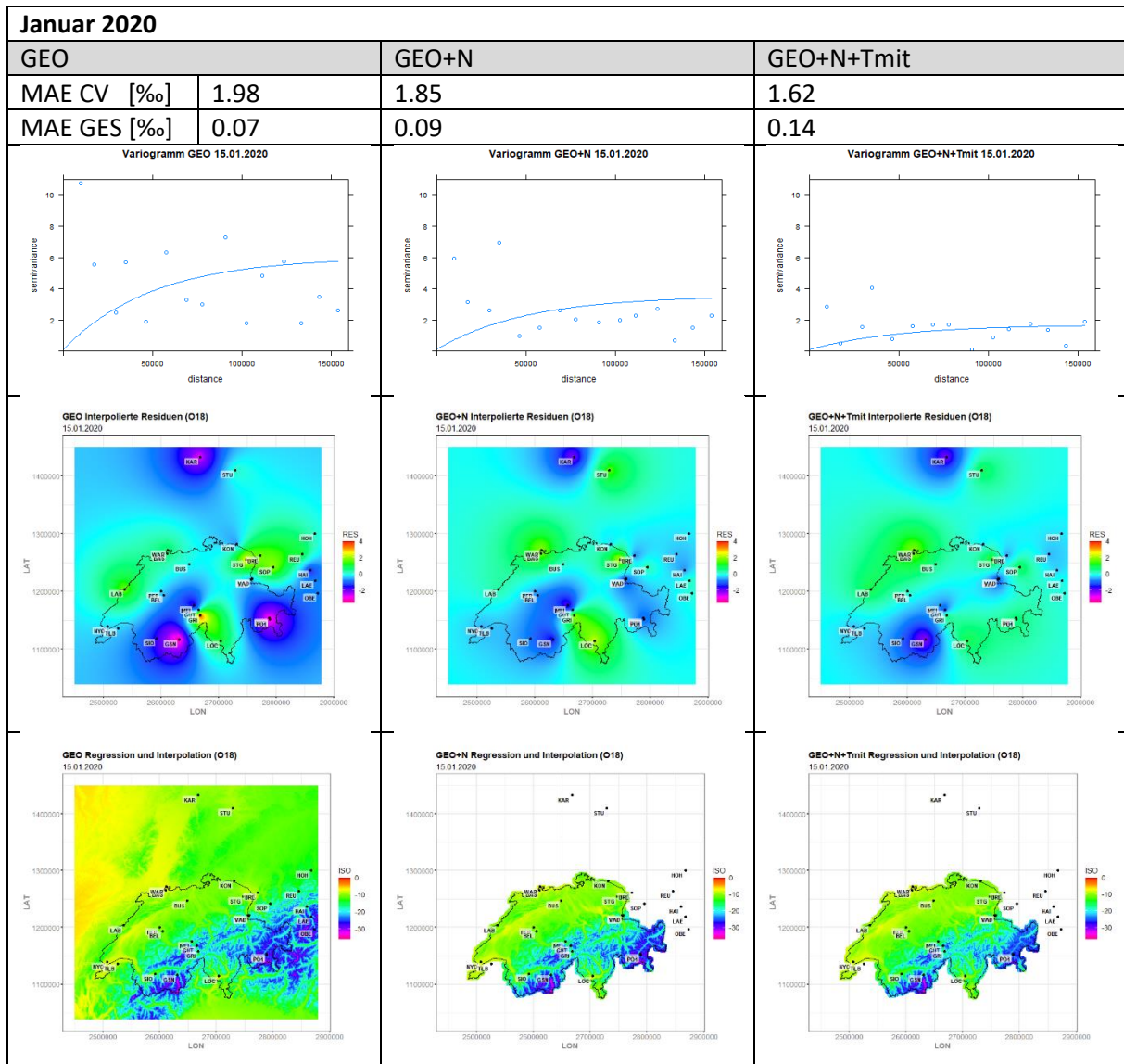
GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.02	1.06	1.20
MAE GES [%o]	0.08	0.09	0.10



Dezember 2013

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	3.18	3.20	3.39
MAE GES [%o]	0.18	0.07	0.07
<p>Variogramm GEO 15.12.2013</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.12.2013</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.12.2013</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.12.2013</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.12.2013</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.12.2013</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.12.2013</p>		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.12.2013</p>	

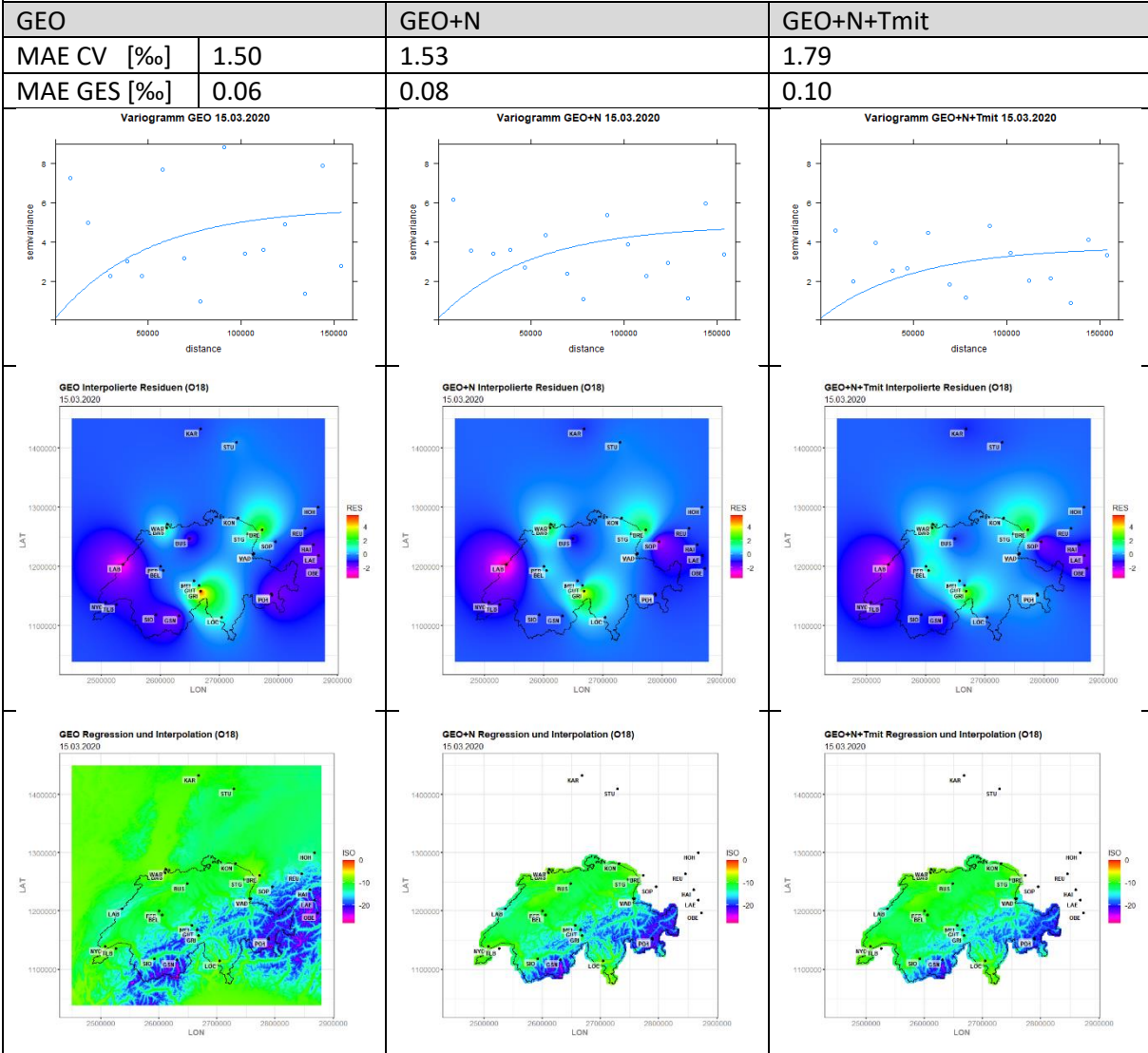
7.2.2 Ausgabe-Jahr 2020



Feber 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.13	0.95	0.95
MAE GES [%o]	0.12	0.14	0.18
<p>Variogramm GEO 15.02.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.02.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.02.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.02.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.02.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.02.2020</p>	
<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.02.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.02.2020</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.02.2020</p>	

März 2020



April 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.37	1.58	1.70
MAE GES [%o]	0.09	0.25	0.20
<p>Variogramm GEO 15.04.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.04.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.04.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.04.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.04.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.04.2020</p>	
<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.04.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.04.2020</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.04.2020</p>	

Mai 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.35	1.33	1.46
MAE GES [%o]	0.12	0.13	0.13
<p>Variogramm GEO 15.05.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.05.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.05.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.05.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.05.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.05.2020</p>	
<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.05.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.05.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.05.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.05.2020</p>	

Juni 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	0.71	0.69	0.73
MAE GES [%o]	0.29	0.18	0.18
<p>Variogramm GEO 15.06.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.06.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.06.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.06.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.06.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.06.2020</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Variogramm GEO+N+Tmit 15.06.2020</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.06.2020</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.06.2020</p>	

Juli 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.18	1.14	1.23
MAE GES [%o]	0.13	0.13	0.14
<p>Variogramm GEO 15.07.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.07.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.07.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.07.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.07.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.07.2020</p>	
		<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.07.2020</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.07.2020</p>	
		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.07.2020</p>	

August 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.43	1.27	1.36
MAE GES [%o]	0.47	0.66	0.63
<p>Variogramm GEO 15.08.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.08.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.08.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.08.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.08.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.08.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.08.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.08.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.08.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.08.2020</p>	

September 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	0.88	0.86	0.94
MAE GES [%o]	0.01	0.01	0.01
<p>Variogramm GEO 15.09.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.09.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.09.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.09.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.09.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.09.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.09.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.09.2020</p>	

Oktober 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.02	1.08	1.20
MAE GES [%o]	0.01	0.01	0.14
<p>Variogramm GEO 15.10.2020</p>	<p>Variogramm GEO+N 15.10.2020</p>	<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.10.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.10.2020</p>	<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.10.2020</p>	<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.10.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.10.2020</p>	<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.10.2020</p>	<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.10.2020</p>	

November 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	2.34	2.47	2.61
MAE GES [%o]	0.53	0.39	0.39
<p>Variogramm GEO 15.11.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.11.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.11.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.11.2020</p>	
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.11.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.11.2020</p>	
<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.11.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N+Tmit 15.11.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.11.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.11.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.11.2020</p>		<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.11.2020</p>	

Dezember 2020

GEO		GEO+N	GEO+N+Tmit
MAE CV [%o]	1.35	1.26	1.33
MAE GES [%o]	0.72	0.39	0.13
<p>Variogramm GEO 15.12.2020</p>		<p>Variogramm GEO+N 15.12.2020</p>	
<p>GEO Interpolierte Residuen (O18) 15.12.2020</p>		<p>GEO+N Interpolierte Residuen (O18) 15.12.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Interpolierte Residuen (O18) 15.12.2020</p>			
<p>GEO Regression und Interpolation (O18) 15.12.2020</p>		<p>GEO+N Regression und Interpolation (O18) 15.12.2020</p>	
<p>GEO+N+Tmit Regression und Interpolation (O18) 15.12.2020</p>			

7.3 Publikationen

Pelzmann, V., Leis, A., Schuerch, M., and Reszler, C.: Spatial patterns of stable isotopes in precipitation in Switzerland for the use in hydrological and hydrogeological applications, EGU General Assembly 2023, Vienna, Austria, 24–28 Apr 2023, EGU23-5166, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu23-5166>, 2023.

Pelzmann, V., Leis, A., Schuerch, M., and Reszler, C.: Regionalization of Oxygen-18 and Deuterium in precipitation in Switzerland as a basis for hydrological and hydrogeological studies. Poster P 13.25. Swiss Geoscience Meeting 2023, Swiss Academy of Sciences (SCNAT), Platform Geosciences. Symposium 13: Hydrology, Hydrogeology, and Limnology. In: Abstract Proceedings, p. 428-429.

Pelzmann, V., Leis, A., Schuerch, M., and Reszler, C.: Regionalization of stable isotope data (oxygen-18 and deuterium) in Swiss precipitation for hydrological studies. Poster at the 19th Stable Isotopes Network Austria (SINA) Meeting 2023. Nov. 17/18, Salzburg/Austria. Abstract in: Abstract book, p. 35.



JR-AquaConSol
ein Unternehmen der JOANNEUM RESEARCH