

Modellierung der Grundwasserströmung



DR.-ING. WOLFGANG SCHÄFER
GRUNDWASSERMODELLIERUNG

© Dr.-Ing. Wolfgang Schäfer
Grundwassermodellierung
Odenwaldstr. 6
D-69168 Wiesloch

Inhaltsverzeichnis

Modellierung der	1
Grundwasserströmung	1
1 Literatur	5
2 Grundlagen.....	6
2.1 Einsatzbereiche von Grundwasserströmungsmodellen.....	6
2.2 Die Piezometerhöhe	7
2.3 Aquifertypen.....	8
2.4 Poröse Medien	9
2.4.1 Porosität n (Hohlraumvolumen)	9
2.4.2 Durchlässigkeit.....	10
2.4.3 Darcy - Gesetz	10
2.4.4 Permeabilität:	11
2.4.5 Grenzen der Gültigkeit des Darcy - Gesetzes.....	12
3 Die Strömungsgleichung – Bestandteile und Lösungsverfahren.....	14
3.1 Die Kontinuitätsgleichung	14
3.2 Das Darcy - Gesetz in allgemeiner Form	14
3.3 Die Strömungsgleichung	15
3.3.1 Die zweidimensionale Strömungsgleichung	16
3.3.2 Die Strömungsgleichung in drei Dimensionen.....	17
3.4 Numerische Lösung der Strömungsgleichung mit dem Finite-Differenzen-Verfahren	17
3.4.1 Motivation für numerische Lösungsverfahren	17
3.4.2 Prinzip der Finite-Differenzen-Methode (FD)	18
3.5 Die zweidimensionale Strömungsgleichung für das Finite-Differenzen-Gitter.....	18
4 Aufbau eines numerischen Modells mit PMWIN	20
4.1 Schritte bei der Modellierung.....	20
4.2 Die Oberfläche PMWIN	20
4.2.1 Untermenü File	21
4.2.2 Untermenü Grid.....	21
4.2.3 Untermenü Parameters	21
4.2.4 Untermenü Models – MODFLOW.....	22
4.2.5 Untermenü Models – PMPATH.....	23
4.2.6 Untermenü Tools	23
4.3 Eingabe von Parametern.....	23
4.3.1 Eingabemaske für flächenhaft verteilte Modellparameter	24
4.3.2 Button-Leiste	24
4.3.3 Bearbeitung einer einzelnen Modellzelle	26
4.3.4 Bearbeitung mehrerer Modellzellen	26
5 Übungsaufgabe mit PMWIN	28
5.1 Festlegung des Dateinamens (Untermenü File)	28
5.2 Aufbau des Modellgitters (Untermenü Grid).....	28
5.2.1 Grid – Mesh Size – Model Grid:	28

5.2.2	Grid – Mesh Size – Coordinate System:	29
5.2.3	Grid – Layer Property:.....	29
5.2.4	Grid – Cell status – IBOUND:.....	29
5.2.5	Grid – Top of Layers:	31
5.2.6	Grid – Bottom of Layers:.....	31
5.3	<i>Eingabe der hydrogeologischen Kennwerte (Untermenü Parameters)</i>	32
5.3.1	Parameters – Time	32
5.3.2	Parameters – Initial & Prescribed Hydraulic Heads	32
5.3.3	Parameters – Horizontal Hydraulic Conductivity	32
5.3.4	Parameters – Vertical Hydraulic Conductivity	33
5.3.5	Parameters – Effective Porosity.....	33
5.4	<i>Eingabe von Messstellen (Untermenü Models – Modflow – Head Observations)</i>	34
5.5	<i>Eingaben der Quellen und Senken der Strömung (Untermenü Models – Modflow – Flow packages)</i> 34	
5.5.1	Grundwasserneubildung: Models – Modflow – Flow packages – Recharge	34
5.5.2	Entnahmekbrunnen: Models – MODFLOW – Flow packages - Well	35
5.5.3	Randzufluss: Models – Modflow – Flow packages – Well	35
5.6	<i>Gleichungslösung</i>	36
5.6.1	Models – Modflow – Solvers – PCG2	37
6	Einschub vereinfachtes Übungsbeispiel: Stationäre Grundwasserströmung im gespannten Aquifer (nach Kinzelbach und Rausch).	39
6.1	<i>Gegebene Parameter</i>	39
6.2	<i>Aufgabe</i>	39
6.3	<i>Numerische Lösung</i>	40
7	Berechnung der Wasserstände (Fortsetzung des numerischen Übungsbeispiels)	42
7.1	<i>Models – Modflow – Run</i>	42
7.2	<i>Verteilung der berechneten Wasserstände (Untermenü Tools – 2D-Visualization)</i>	42
7.2.1	Anpassung der Darstellung: Options – Environment.....	42
7.2.2	Laden einer Hintergrundkarte: Options - Maps.....	43
7.3	<i>Wasserbilanz für das Modellgebiet (Untermenü Tools – Water Budget)</i>	43
8	Bahnlinien (Untermenü Models – PMPATH)	44
8.1	<i>Setzen von Partikeln</i>	45
8.2	<i>Löschen von Partikeln</i>	45
8.3	<i>Zoom-Funktionen</i>	46
8.4	<i>Bewegen von Partikeln</i>	46
8.5	<i>Farbe der Bahnlinie</i>	46
8.6	<i>Vertikale Position des Startpunkts der Bahnlinie</i>	47
8.7	<i>Speichern von Bahnliniendarstellungen</i>	47
8.8	<i>Speichern von Partikeln</i>	47
8.9	<i>Darstellung der Bahnlinien</i>	47
8.10	<i>Generelle Steuerung der Bahnlinien</i>	48
8.11	<i>Anwendung der Bahnlinienberechnung</i>	49
9	Berücksichtigung eines Oberflächengewässers	50

9.1	Anbindung des Gewässers.....	50
9.2	Fortsetzung der Übungsaufgabe: Implementierung eines Oberflächengewässers.....	51
10	Zeitabhängige Strömung	54
10.1	Fortsetzung der Übungsaufgabe: Instationäre Strömung.....	54
11	Modellaufbau und Stratigraphie	57
11.1	Rastermodell vs. schichtorientiertes Modell	57
11.2	Aquifergeometrie und Rechteckgitter	58
11.3	Behandlung von Schichtlücken.....	60
12	Inverse Modellierung und automatische Kalibrierung	61
12.1	Prinzip der inversen Modellierung.....	61
12.2	Nichteindeutigkeit der Strömungskalibrierung	63

1 Literatur

Kinzelbach, W., Rausch, R.: Grundwassermodellierung - Eine Einführung mit Übungen. Gebrüder Borntraeger, Berlin Stuttgart 1995. Empfehlenswertes Übungsbuch zur Grundwassermodellierung, das auf dem beiliegenden Modell ASM basiert.

Chiang, W.-H.: Processing Modflow PRO, A Simulation System for Modeling Groundwater Flow and Transport Processes, 2006. Handbuch zu PMWINPro, über die Help-Funktion von PMWINPro abrufbar.

Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz NRW (LANUV): Hinweise zur Erstellung und Beurteilung von Grundwassermodellen im Altlastenbereich, 2010. Die Arbeitshilfe ist sehr praxisorientiert und bietet einen Überblick über das Thema.

DVGW: Technische Regel – Arbeitsblatt DVGW W 107 (A): Aufbau und Anwendung numerischer Grundwassermodelle in Wassereinzugsgebieten, Februar 2016. Aktualisiertes Regelwerk, gute Orientierungshilfe bei der Erstellung von Modellen und Modell-Berichten.

2 Grundlagen

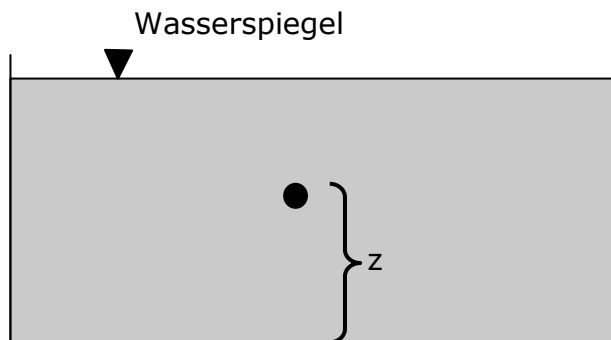
Gegenstand des Kurses ist die Modellierung der Grundwasserströmung im gesättigten Untergrund. Die treibende Kraft dieser Strömung ist die Schwerkraft. Nicht behandelt werden die ungesättigte Grundwasserströmung und die Strömung infolge von Dichte- oder Temperaturunterschieden.

Grundwasserströmungsmodellen liegen relativ einfache, überwiegend lineare Mechanismen zu Grunde, sie sind anwendungsorientiert und auf eine quantitative Interpretation der Grundwasserströmung ausgelegt. Sie unterscheiden sich daher u.a. von Ökosystemmodellen (z. B. Räuber-Beute-Modelle), die häufig weniger stark mechanistisch orientiert sind und oft für eine mehr qualitative Systembeschreibung ausgelegt sind, und auch von stark nicht-linearen Modellen wie Klima-Modellen.

2.1 Einsatzbereiche von Grundwasserströmungsmodellen

- Physikalisch begründete Interpolation von punktuell gemessenen Parametern
- Auswertung von Pumpversuchen
- Bestimmung von Schutz- und Einzugsgebieten
- Auslegung von Sanierungsmaßnahmen
- Prognose von Grundwasserstandsveränderungen
- Bilanzierung von Wasserflüssen
- Basis für die Transportmodellierung

2.2 Die Piezometerhöhe



Energie eines Wasserteilchens in einer nicht kompressiblen Flüssigkeit:

$$E = \frac{1}{2} m u^2 + pV + m g z$$
$$m g h = \frac{1}{2} m u^2 + pV + m g z$$

mit $E = \text{Energie [M L}^2\text{T}^{-2}\text{]}$

$m = \text{Masse [M]}$

$u = \text{Geschwindigkeit [LT}^{-1}\text{]}$

$p = \text{Druck [ML}^{-1}\text{T}^{-2}\text{]}$

$V = \text{Volumen [L}^3\text{]}$

$g = \text{Erdbeschleunigung [LT}^{-2}\text{]}$

$z = \text{Höhe über Bezugspunkt [L]}$

$h = \text{Energiehöhe [L]}$

Durch Division mit $m g$ erhält man die Energiehöhe h (Bernoulli-Gleichung):

$$h = \frac{u^2}{2g} + \frac{p}{\rho g} + z$$

Im Grundwasser ist u im Allgemeinen sehr klein und kann vernachlässigt werden. Mit den verbleibenden Termen ist die **Piezometerhöhe h** (Standrohrspiegelhöhe) definiert:

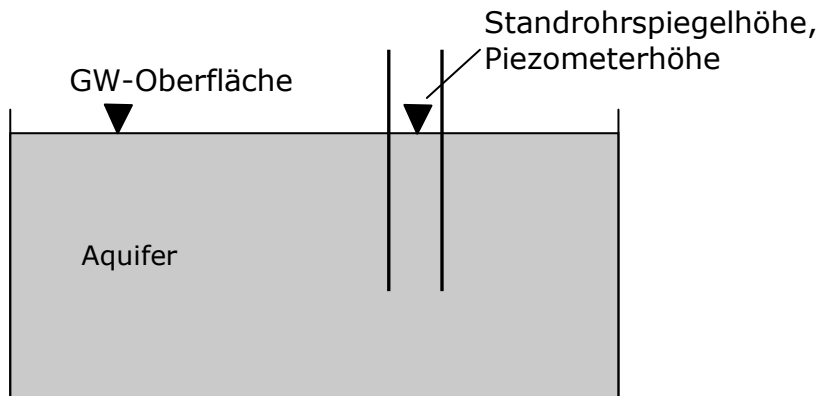
$$h = \frac{p}{\rho g} + z$$

Die Piezometerhöhe ist die Variable in der Strömungsgleichung.

2.3 Aquifertypen

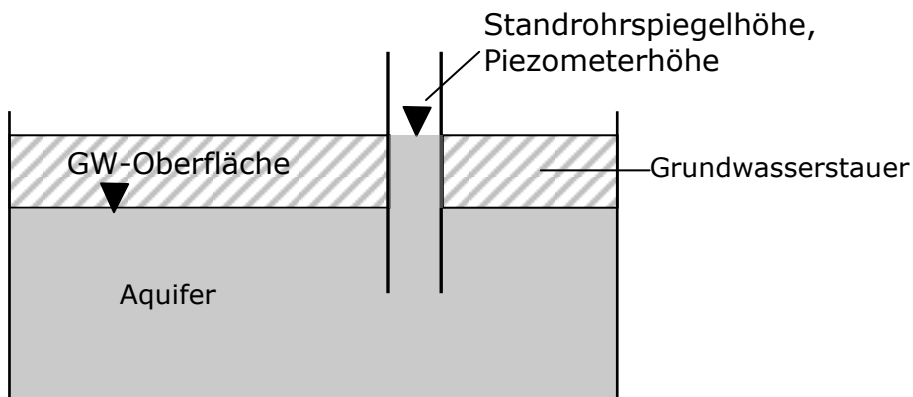
Freier Aquifer (unconfined aquifer):

Die Grundwasseroberfläche entspricht der Piezometerhöhe, die durchströmte Mächtigkeit hängt vom Grundwasserstand ab.



gespannter Aquifer (confined aquifer):

Die Grundwasseroberfläche liegt unterhalb der Piezometerhöhe, die durchströmte Mächtigkeit ist unabhängig vom Grundwasserstand:



2.4 Poröse Medien

Mikroskopische Betrachtung: Diskontinuierliches Medium aus Festkörpern (Gesteinsmaterial) und Hohlräumen (Poren)

Makroskopische Betrachtung: Übergang zur Kontinuumsmechanik in einem einheitlichem Medium. Effektiven Eigenschaften werden durch räumliche Mittelung gewonnen (repräsentatives Elementarvolumen REV)

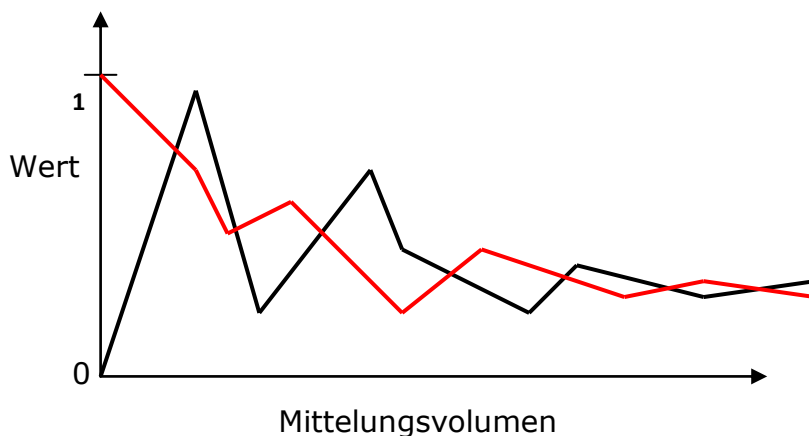
2.4.1 Porosität n (Hohlraumvolumen)

$$n = \frac{V_h}{V_{tot}}$$

mit

V_h = Hohlraumvolumen

V_{tot} = Bezugsvolumen (Gesamtvolumen)



Bestimmung durch Wiegen eines definierten Volumens

$$n = 1 - \frac{m_{tr}}{V\rho_G}$$

mit

m_{tr} = Trockengewicht der Probe [M]

V = Volumen der Probe [L^3]

ρ_G = Gesteinsdichte [ML^{-3}] (z. B. 2.65 kg l^{-1} für Quarz)

Porosität von Kugelpackungen:

dichteste Packung: 26%

lockerste Packung: 48%

Porosität von natürlichen Medien:

Ton: 40-70%

Schluff: 35-50%

Sand: 25-50%

Kies: 25-40%

nutzbare Porosität n_e :

$$n_e \leq n$$

- für Wasserspeicherung: entwässerbarer Anteil des Hohlraumvolumens (Näherungsweise entspricht die Differenz zwischen gesamter und entwässerbarer Porosität der Feldkapazität).
- für Wasserbewegung: Anteil des beweglichen Wassers

2.4.2 Durchlässigkeit

Auf der mikroskopischen Ebene (Porenebene) wirken auf ein Wasserteilchen die Schwerkraft und Trägheits- und Reibungskräfte ein. Die Wasserbewegung wird durch die Navier-Stokes-Gleichung beschrieben.

Die Anwendung dieser Gleichung zur Beschreibung der makroskopischen Wasserbewegung ist jedoch nicht praktikabel, weil dafür die Struktur des porösen Mediums im Detail bekannt sein müsste.

→ Vereinfachte makroskopische Beschreibung der Wasserbewegung ist notwendig.

2.4.3 Darcy - Gesetz

Der Durchfluss durch das poröse Medium ist proportional zum angelegten Piezometerhöhengradienten

$$Q \sim I$$

$$I = \frac{\Delta h}{L}$$

mit

Q = Wasserfluss [L^3T^{-1}]

I = Piezometerhöhengradient [-]

Δh = Differenz zwischen zwei Piezometerhöhen [L]

L = Entfernung, über die Δh wirksam ist [L]

Der Proportionalitätsfaktor heißt hydraulische Durchlässigkeit (k_f - Wert):

$$Q = -Ak_f I$$

mit

A = Querschnittsfläche, über die der Wasserfluss stattfindet [L^2]

k_f = Durchlässigkeitsbeiwert [$L T^{-1}$]

Nach Division durch A erhält man:

$$q = -k_f I$$

mit

q = spezifischer Fluss bzw. Darcy - Geschwindigkeit oder Filtergeschwindigkeit

Für den Wasserfluss steht jedoch nicht die gesamte Querschnittsfläche des porösen Mediums zur Verfügung, sondern nur der durchflusswirksame Anteil n_e . Um aus dem spezifischen Fluss q die mittlere Abstandsgeschwindigkeit zu erhalten, muss man durch n_e dividieren:

$$u = \frac{q}{n_e}$$

mit u = Abstandsgeschwindigkeit [$L T^{-1}$]

Die tatsächliche Geschwindigkeit der Wasserpartikel ist noch einmal größer als u , da die Bewegungsbahnen im Detail nicht gerade, sondern gewunden sind. Die tatsächlichen lokalen Geschwindigkeiten sind im Allgemeinen nicht bekannt.

Die Abstandsgeschwindigkeit u liegt typischerweise in der Größenordnung von 1 m d^{-1} .

2.4.4 Permeabilität:

$$k = k_f \frac{\mu_D}{\rho_w g}$$

mit

k = Permeabilität [L^2]

μ_D = dynamische Viskosität [$M L^{-1} T^{-1}$]

ρ_w = Dichte von Wasser [$M L^{-3}$]

g = Erdbeschleunigung [$L T^{-2}$]

Der k_f - Wert ist eine Funktion des Bodens und des Fluids, die Permeabilität k ist nur noch eine Bodeneigenschaft.

k wird häufig in "darcy" bzw. "millidarcy" angegeben, wobei 1 darcy ca. 10^{-12} m^2 entsprechen.

Typische Durchlässigkeitswerte unterschiedlicher Materialien:

Medium	k_f in m s^{-1}	k in darcy
Grobkies	$10^{-1} - 10^{-2}$	$10^4 - 10^3$
Sand und Kies	$10^{-2} - 10^{-5}$	$10^3 - 1$
Feinsand bis Schluff	$10^{-5} - 10^{-9}$	$1 - 10^{-4}$
Ton	$10^{-9} - 10^{-11}$	$10^{-4} - 10^{-6}$

$$k = k_f \frac{\mu_D}{\rho_w g}$$

mit

$$\mu_D = 1 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$\rho_w = 1000 \text{ kg m}^{-3}$$

$$g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$$

2.4.5 Grenzen der Gültigkeit des Darcy - Gesetzes

1. Sehr hohe Fließgeschwindigkeiten (obere Grenze):

Für die Anwendbarkeit des Darcy-Gesetzes muss gelten, dass die durch Veränderungen der Strömungsgeschwindigkeit hervorgerufenen Trägheitskräfte vernachlässigbar sind gegenüber den inneren Reibungskräften des Fluids. Eine Maßzahl, die das Verhältnis zwischen Trägheits- und Reibungskräften angibt, ist die dimensionslose Reynoldszahl Re_e .

In porösen Medien ist Re_e nicht eindeutig bestimmbar, häufig werden aber folgende zwei Näherungsformeln verwendet:

$$Re' = \frac{q d \rho_w}{\mu_D} \quad \text{bzw.}$$

$$Re'' = \frac{q \sqrt{k} \rho_w}{\mu_D}$$

Für d wird üblicherweise d_{10} eingesetzt.

$Re_e < 1 - 10$: Laminare Fließen (schleichende Strömung, Trägheitskräfte können vernachlässigt werden): Darcy-Gesetz ist voll gültig. Diese Situation trifft auf beinahe alle Grundwasserleiter zu. Ausnahmen sind Karst-Systeme und die unmittelbare Umgebung von Brunnen.

$R_e > 10$: Übergang zu turbulentem Fließen (Trägheitskräfte können nicht mehr vernachlässigt werden). Darcy - Gesetz in der ursprünglichen Form ist nicht mehr gültig, aber es existieren Erweiterungen.

2. Sehr geringe Fließgeschwindigkeiten (untere Grenze):

In sehr bindigen Böden, wie z. B. Tondichtungen um Deponien, gibt es einen kritischen Gradienten I_{kr} , unterhalb dessen kein linearer Zusammenhang mehr zwischen q und I besteht, d. h. wo k_f von I abhängig ist.

3 Die Strömungsgleichung – Bestandteile und Lösungsverfahren

Zur formalen Beschreibung der Grundwasserströmung werden zwei Gleichungen benötigt:

1. Die Kontinuitätsgleichung
2. Das Darcy-Gesetz

3.1 Die Kontinuitätsgleichung

Die Kontinuitätsgleichung beschreibt die Massenerhaltung im System. Sie besagt, dass die Summe aller Zu- und Abflüsse über die Grenzen eines Kontrollvolumens (z.B. Modellzelle) gleich der Wasserspeicherung und der externen Flüsse in diesem Kontrollvolumen sein muss. Dies kann für Wasser mit konstanter Dichte durch folgende Differentialgleichung ausgedrückt werden:

$$\operatorname{div} q = -\frac{\partial n_e}{\partial t} + w$$

mit

$$\operatorname{div} q = \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = \nabla q$$

div = Divergenz

∇ = Nabla-Operator

∂ = partielles Differential

q = Vektor der Darcy- bzw. Filtergeschwindigkeit [$L T^{-1}$]

q_x, q_y, q_z = Komponenten von q in x, y und z - Richtung [$L T^{-1}$]

n_e = nutzbare Porosität [-]

w = Externer Zufluss (positiv) oder Abfluss (negativ) bezogen auf das Kontrollvolumen [$1 T^{-1}$]

3.2 Das Darcy - Gesetz in allgemeiner Form

Im Allgemeinen ist die hydraulische Durchlässigkeitsverteilung anisotrop, d. h. die Durchlässigkeit ist abhängig von der Strömungsrichtung. Dadurch ist es z. B. möglich, dass ein Gradient in x-Richtung eine Strömungskomponente in z-Richtung verursacht.

Um dies zu berücksichtigen, muss anstelle des Durchlässigkeitsbeiwerts k_f der Durchlässigkeitstensor \mathbf{K}_f verwendet werden. \mathbf{K}_f hat folgende Komponenten:

$$K_f = \begin{vmatrix} k_{f,xx} & k_{f,xy} & k_{f,xz} \\ k_{f,yx} & k_{f,yy} & k_{f,yz} \\ k_{f,zx} & k_{f,zy} & k_{f,zz} \end{vmatrix}$$

mit $k_{xy} = k_{yx}$, $k_{xz} = k_{zx}$, $k_{yz} = k_{zy}$

Durch Ausrichten der räumlichen Koordinaten x , y , z entlang der Hauptachsen der Anisotropie vereinfacht sich der Durchlässigkeitstensor, da nur noch die Elemente auf der Hauptdiagonalen von Null verschieden sind:

$$K_f = \begin{vmatrix} k_{f,xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{f,yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{f,zz} \end{vmatrix}$$

In der Praxis bedeutet das, dass zwei Achsen des Koordinatensystems parallel und eine Achse senkrecht zur Schichtung ausgerichtet werden sollten. Meist werden höchstens zwei unterschiedliche Komponenten des Durchlässigkeitstensors berücksichtigt, nämlich eine horizontale Durchlässigkeit $k_{f,xx} = k_{f,yy}$ und eine vertikale Durchlässigkeit $k_{f,zz}$.

Der Anisotropiefaktor $k_{f,xx} / k_{f,zz}$ liegt für Lockergesteins-Aquifere meist zwischen 2 und 10.

Im Allgemeinen dreidimensionalen Fall bekommt das Darcy - Gesetz damit folgende Form:

$$q = -k_f \nabla h$$

mit

$$\nabla h = \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial z}$$

3.3 Die Strömungsgleichung

Aus der Kombination von Kontinuitätsgleichung und Darcy-Gesetz erhält man die instationäre Strömungsgleichung für eine nicht kompressible Flüssigkeit mit konstanter Dichte und Viskosität:

$$\nabla(k_f \nabla h) = -S_0 \frac{\partial h}{\partial t} + w$$

mit S_0 = spezifischer Speicherkoeffizient [L^{-1}]

gespannter Aquifer:

$$S_0 = \frac{S_g}{m}$$

mit S_g = Speicherkoeffizient im gespannten Aquifer [-]

m = wassererfüllte Mächtigkeit des Aquifers [L]

Die Speicherung im gespannten Aquifer ist vor allem auf die Deformierbarkeit des porösen Mediums (Gefüge-Kompressibilität) zurückzuführen. Die Kompressibilität von Wasser spielt nur eine untergeordnete Rolle.

Typische Werte für S_0 im gespannten Aquifer zeigt die folgende Tabelle:

Medium	Bereich für S_0 in m^{-1}
Ton	$10^{-2} - 10^{-4}$
Sand	$10^{-3} - 10^{-5}$
Kies	$10^{-4} - 10^{-7}$

freier Aquifer:

$$S_0 = \frac{n_e + S_g}{m}$$

mit n_e = entwässerbare Porosität

Im freien Aquifer ist S_g meist vernachlässigbar gegenüber n_e , und S_0 kann direkt aus n_e berechnet werden.

S_0 kann durch Pumpversuche oder durch die inverse Modellierung instationärer Grundwasserströmungen bestimmt werden

3.3.1 Die zweidimensionale Strömungsgleichung

Die Integration der Kontinuitätsgleichung über die durchströmte Mächtigkeit liefert folgende partielle Differentialgleichung:

$$\frac{\partial(mq_x)}{\partial x} + \frac{\partial(mq_y)}{\partial y} = -mS_0 \frac{\partial h}{\partial t} + mw$$

mit m = durchströmte Mächtigkeit (im freien Aquifer ist $m = h-b$, b ist die Bezugshöhe) [L]

Durch Einsetzen des Darcy-Gesetzes erhält man:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-mk_{f,xx} \frac{\partial h}{\partial x} - mk_{f,xy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-mk_{f,yx} \frac{\partial h}{\partial x} - mk_{f,yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = -S \frac{\partial h}{\partial t} + w_2$$

mit

$k_{f,xx}$ usw.: Komponenten des Durchlässigkeitstensors [$L T^{-1}$]

$S = mS_0$: Speicherkoeffizient [-]

w_2 = Externer Zufluss (positiv) oder Abfluss (negativ), bezogen auf die Querschnittsfläche in der x-y-Ebene [$L T^{-1}$]

Im Allgemeinen gibt es keine analytischen Verfahren zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen der Grundwasserströmung und es müssen daher numerische Lösungsverfahren angewandt werden. Lediglich für die radialsymmetrische Brunnenströmung (z.B. Theis'sche Brunnenformel) und die Strömung im zweidimensionalen homogenen gespannten Aquifer mit einfachen Randbedingungen (Superpositionsverfahren) gibt es analytische Lösungsverfahren.

3.3.2 Die Strömungsgleichung in drei Dimensionen

Bei der zweidimensionalen Strömung wird die Strömungsgleichung über die durchströmte Mächtigkeit integriert. Bei der dreidimensionalen Strömung findet keine Integration mehr statt, da alle drei räumlichen Dimensionen explizit behandelt werden.

Nicht für alle Strömungssituationen muss jedoch ein dreidimensionaler Ansatz gewählt werden. Unter bestimmten Umständen kann auch der zweidimensionale Ansatz ausreichend bzw. angemessen sein. Grundsätzlich sollten dafür folgende Voraussetzungen erfüllt sein:

- Die Mächtigkeit des Aquifer ist sehr viel kleiner als dessen horizontale Erstreckung
- Es wird nur ein Grundwasserstockwerk betrachtet
- Die Brunnen im Modellgebiet sind voll verfiltert
- Informationen liegen nur tiefengemittelt vor

Ein dreidimensionaler Ansatz ist hingegen erforderlich, wenn eines oder mehrere der folgenden Merkmale vorliegen:

- Betrachtung mehrerer Grundwasserstockwerke bzw. von Aquifersystemen
- unvollkommene Brunnen in Aquiferen größerer Mächtigkeit
- Informationen liegen vertikal differenziert vor

3.4 Numerische Lösung der Strömungsgleichung mit dem Finite-Differenzen-Verfahren

3.4.1 Motivation für numerische Lösungsverfahren

Vorteil analytischer Lösungen:

- Geringer Rechen- und Programmieraufwand
- Kontinuierliche Parameterverteilung
- Exakte Lösung der vorgegebenen Gleichungen

Nachteil:

- nur für homogene Verteilungen der Aquiferparameter und einfache Randbedingungen anwendbar

Zur Simulation komplizierterer Strömungen in realen Aquiferen sind analytische Modelle im Allgemeinen nicht geeignet. Es müssen daher numerische Modelle verwendet werden.

3.4.2 Prinzip der Finite-Differenzen-Methode (FD)

Die Differentialgleichung zur Beschreibung der Grundwasserströmung wird durch Differenzenquotienten in Raum und Zeit angenähert:

$$\frac{\partial h}{\partial x} \approx \frac{\Delta h}{\Delta x} = \frac{h_2 - h_1}{x_2 - x_1}$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} \approx \frac{\Delta h}{\Delta t} = \frac{h_2 - h_1}{t_2 - t_1}$$

Die Verwendung von Differenzen anstelle von Differentialen bringt es mit sich, dass das Modellgebiet kein räumliches Kontinuum mehr darstellt, sondern auf einem Modellgitter diskretisiert sein muss. Die Piezometerhöhen und damit die Geschwindigkeiten werden daher nicht überall im Modellgebiet berechnet, sondern nur an diskreten Gitterpunkten. Diese Gitterpunkte werden auch Berechnungspunkte oder Knoten genannt.

Ebenso wird bei instationären Berechnungen das zeitliche Kontinuum durch diskrete Zeitpunkte ersetzt, an denen die neuen Höhen berechnet werden.

Neben der Finite-Differenzen-Methode ist noch die Finite-Elemente-Methode (FE) als numerisches Verfahren verbreitet. Mithilfe FE-Methode lassen sich zwar räumliche Strukturen flexibler nachbilden als mit der FD-Methode, dennoch ist es nicht so, dass eines der beiden Verfahren dem anderen überlegen wäre oder grundsätzlich zu besseren Ergebnissen führt. Ein in Deutschland verbreitetes FE-Modell ist FEFLOW.

3.5 Die zweidimensionale Strömungsgleichung für das Finite-Differenzen-Gitter

Wasserbilanz für einen Berechnungsknoten im Zeitintervall Δt :

$$\Delta Q_x + \Delta Q_y = -S \frac{\Delta V}{\Delta t} + Q_{ex}$$

mit ΔQ_x = Änderung des Wasserflusses in x-Richtung [$L^3 T^{-1}$]

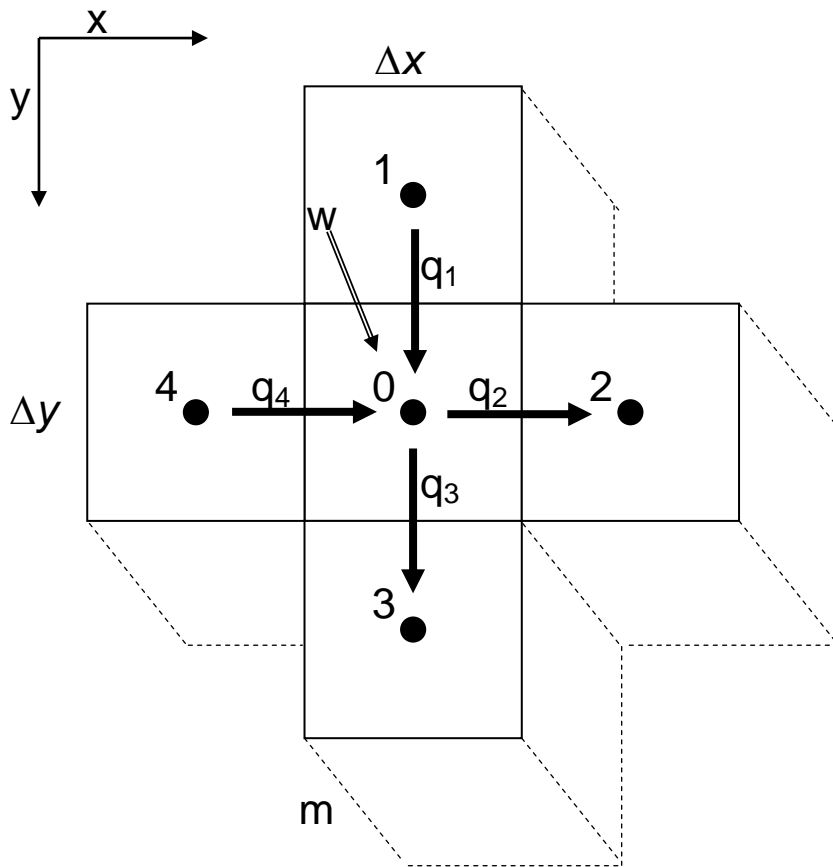
ΔQ_y = Änderung des Wasserflusses in y-Richtung [$L^3 T^{-1}$]

Q_{ex} = Externe Entnahmen (negativ) oder Zugaben (positiv) [$L^3 T^{-1}$]

S = Speicherkoeffizient [-]

ΔV = Änderung des gesättigten Aquifervolumens [L^3]

Δt = Zeitschritt, innerhalb dessen die Änderung ablaufen [T]



Bilanzgleichung für ein diskretes Volumenelement des Aquifers ($\Delta x \Delta y m$):

$$\Delta x_0 m q_3 - \Delta x_0 m q_1 + \Delta y_0 m q_4 + \Delta y_0 m q_2 = -S \Delta x_0 \Delta y_0 \frac{\Delta h_0}{\Delta t} + \Delta x_0 \Delta y_0 m w$$

Mit Hilfe des Darcy-Gesetzes kann man schreiben:

$$q_1 = -k_{f10} \frac{h_0(t') - h_1(t')}{0.5(\Delta y_0 + \Delta y_1)}$$

$$q_2 = -k_{f02} \frac{h_2(t') - h_0(t')}{0.5(\Delta x_0 + \Delta x_2)}$$

$$q_3 = -k_{f03} \frac{h_3(t') - h_0(t')}{0.5(\Delta y_0 + \Delta y_3)}$$

$$q_4 = -k_{f40} \frac{h_0(t') - h_4(t')}{0.5(\Delta x_0 + \Delta x_4)}$$

Durch Einsetzen obiger Terme für q in die Bilanzgleichung erhält man die **diskretisierten Strömungsgleichung** mit der Piezometerhöhe h als Variablen. Nach dieser Variablen wird die Gleichung gelöst.

4 Aufbau eines numerischen Modells mit PMWIN

4.1 Schritte bei der Modellierung

Der grundsätzliche Ablauf einer Strömungsmodellierung lässt sich folgendermaßen skizzieren (im Einzelfall müssen nicht immer alle Schritte durchgeführt werden):

- Problemstellung
- Wahl des Modells
- Datensichtung und Datenbeschaffung
- Festlegung des Modellgebiets
- Diskretisierung
- Definition der Randbedingungen
- Dateneingabe
- Anpassung des Lösungsverfahrens
- Modellkalibrierung
- Plausibilitätsprüfung / Sensitivitätsanalyse
- Validierung
- Modellanwendung
- Modellpflege

4.2 Die Oberfläche PMWIN

Das Programm **MODFLOW** wurde von McDonald und Harbaugh (1988) vom U.S. Geological Survey entwickelt. Es ist ein Finite-Differenzen-Modell zur Berechnung der dreidimensionalen gesättigten Grundwasserströmung. Alle Modellparameter, von der Diskretisierung bis zur Brunnenposition, sind in eigenen Dateien mit speziellen Endungen abgelegt (modularer Aufbau). MODFLOW dürfte das weltweit am häufigsten verwendete Grundwasser-Simulationsmodell sein.

Die Oberfläche **PMWIN** (Processing Modflow for Windows) ist ein Prä- und Post-processing-Werkzeug für MODFLOW. Es wurde erstmals 1996 von W.-H. Chiang und W. Kinzelbach herausgebracht und wird seit dem ständig aktualisiert. Es läuft unter Windows und erleichtert die Dateneingabe für MODFLOW erheblich. Es erlaubt außerdem die graphische Darstellung der Eingabewerte (zur Kontrolle) und der Ergebnisse (z. B. Piezometerhöhenverteilung). Intern werden die mit PMWIN erstellten binären Eingabefiles in MODFLOW (ASCII)-Format umgewandelt. Die eigentliche Simulationsrechnung wird dann mit MODFLOW durchgeführt.

MODPATH ist ein speziell auf MODFLOW zugeschnittenes Simulationsmodell zur Berechnung von Bahnlinien. Es greift direkt auf die mit MODFLOW berechneten

Flüsse zwischen den Zellen zurück und interpoliert daraus eine kontinuierliche Geschwindigkeitsverteilung für das Modellgebiet.

Nach dem Starten von PMWIN befindet man sich im Hauptmenü und hat Zugriff auf die Untermenüs **File – Grid – Parameters – Models – Tools – Help**. Die Untermenüs werden im Folgenden beschrieben.

4.2.1 Untermenü File

New Model: Erstellen eines neuen Modells

Open Model: Öffnen eines bestehenden Modells

Convert Model: Öffnen eines bestehenden Modells aus einer älteren Version von PMWIN und Ausschneiden eines Teilmodellgebiets aus einem bestehenden Modell

Preferences: Erlaubt die Auswahl unterschiedlicher Versionen von MODFLOW und der zugehörigen Programme

4.2.2 Untermenü Grid

Mesh Size: Eingabe des horizontalen Modellgitters

Layer Properties: Charakterisierung des Aquifers (gespannt, frei, variabel)

Cell Status – IBOUND: Knotenkennung (1: normale Modellzelle Feldknoten; -1: Festpotenzial; 0: inaktive Zelle)

Top of Layers: Oberkante der Modellschichten

Bottom of Layers: Unterkanten der Modellschichten (Wahlweise können die Oberkanten der liegenden Schichten mit dem Unterkanten der hangenden Schichten gleichgesetzt werden).

4.2.3 Untermenü Parameters

Time: stationäre oder instationäre Strömung; Einheit der Modellzeit (Sekunden, Tage...); Aufteilung des Modellzeitraums in Perioden; bei instationärer Strömung Eingabe der Zeitschritte.

Initial & Prescribed Hydraulic Heads: Vorgabe der Anfangswasserstände im gesamten Modellgebiet. Diese Anfangshöhen sind in Festpotenzialzellen (Knotenkennung = -1) automatisch die unveränderlichen Festpotenzialhöhen.

Horizontal Hydraulic Conductivity: Eingabe der horizontalen Durchlässigkeit (schichtweise).

Vertikal Hydraulic Conductivity: Eingabe der vertikalen Durchlässigkeit (schichtweise). Das Verhältnis zwischen horizontaler und vertikaler Durchlässigkeit ist der vertikale Anisotropiefaktor. Eine eventuelle horizontale Anisotropie wird im Untermenü *Layer Properties* eingegeben.

Specific Storage: Eingabe des spezifischen Speicherkoeffizienten bei gespanntem Wasserspiegel (nur bei instationärer Strömung).

Horizontal Anisotropy: Vorgabe eines Faktors zur Berechnung unterschiedlicher Durchlässigkeiten in der horizontalen Richtung (meist x und y Richtung)

Vertical Anisotropy: Vorgabe eines Faktors zur Berechnung unterschiedlicher Durchlässigkeiten in der vertikalen Richtung (meist z Richtung)

Transmissivity: Vorgabe der Transmissivität (Produkt aus hydraulischer Durchlässigkeit und Schichtmächtigkeit, nur falls im Untermenü *Layer Properties* in der Spalte *Transmissivity* die Option *User Specified* gewählt wurde).

Vertical Leakance: Vorgabe der vertikalen Verbindung zwischen der bearbeiteten und der liegenden Schicht (nur falls im Untermenü *Layer Properties* in der Spalte *Leakance* die Option *User Specified* gewählt wurde)

Storage Coefficient: Eingabe des Speicherkoeffizienten bei gespanntem Wasserspiegel (nur bei instationärer Strömung; nur falls im Untermenü *Layer Properties* in der Spalte *Storage Coefficient* die Option *User Specified* gewählt wurde).

Effective Porosity: Eingabe der effektiven (transportwirksamen) Porosität; wird im Rahmen der Strömungsmodellierung nur für die Geschwindigkeitsbestimmung bei der Bahnlinienberechnung benötigt.

Specific Yield: Eingabe des Speicherkoeffizienten bei freiem Wasserspiegel (nur bei instationärer Strömung).

4.2.4 Untermenü Models – MODFLOW

Flow Packages: Vorgabe von Zu- oder Abflüssen für das Modellgebiet, z.B. über flächenhafte Grundwasserneubildung (Recharge), Oberflächengewässer (River), oder Brunnen (Well).

Solvers: Festlegung des Gleichungslösers und der zugehörigen Steuerparameter.

Head (Drawdown – Subsidence – Compaction) Observations: Eingabe der Messstellen, in denen berechnete Werte aufgezeichnet wird und die z.B. zur Modellkalibrierung herangezogen werden können.

Output Control: Festlegung der Steuerparameter für die Ausgabe der berechneten Ergebnisse (Wasserstände, Absenkungen usw.). Bei instationärer Strömung auch Vorgabe der Häufigkeit der Ausgabe (z.B. jeder Zeitschritt, jeder 10. Zeitschritt usw.).

Run: Schnittstelle zwischen PMWIN und MODFLOW; Erzeugung der von MODFLOW benötigten Eingabedateien (ASCII-Format) aus den PMWIN-Dateien (binäres Format); Start der Berechnungen.

View: Darstellung der Modell-Ergebnisse, u.a. Eingabe- und Ergebnis-Protokoll (Listing File), Streudiagramme (Head Scatter Diagram), zeitlicher Verlauf berechneten Wasserstände (Head Time Curves).

Die Untermenüs *File*, *Grid* und *Parameters* müssen bearbeitet werden, ansonsten ist keine Berechnung möglich. Im Untermenü *Models – Flow Packages* werden zusätzliche, für die Berechnung nicht grundsätzlich erforderliche Modellparameter eingegeben.

4.2.5 Untermenü Models – PMPATH

Ermittlung und Darstellung von Bahnlinien auf der Basis der berechneten Wasserstände

4.2.6 Untermenü Tools

Digitizer: Digitalisierung von Punkten aus Karten

Field Interpolator: Erzeugt eine Eingabe-Matrix aus verteilten Werten durch Interpolation auf das Rechengitter

Field Generator: Erstellt stochastisch verteilte Eingabematrizen und Berücksichtigung der statistischen Parameter (Mittelwert, Standardabweichung, räumliche Korrelation)

2D/3D – Visualization: Darstellung von berechneten Verteilungen, z.B. Verteilung der Wasserstände in den einzelnen Schichten. Hier können auch die Verteilungen von Eingabeparameter grafisch dargestellt werden.

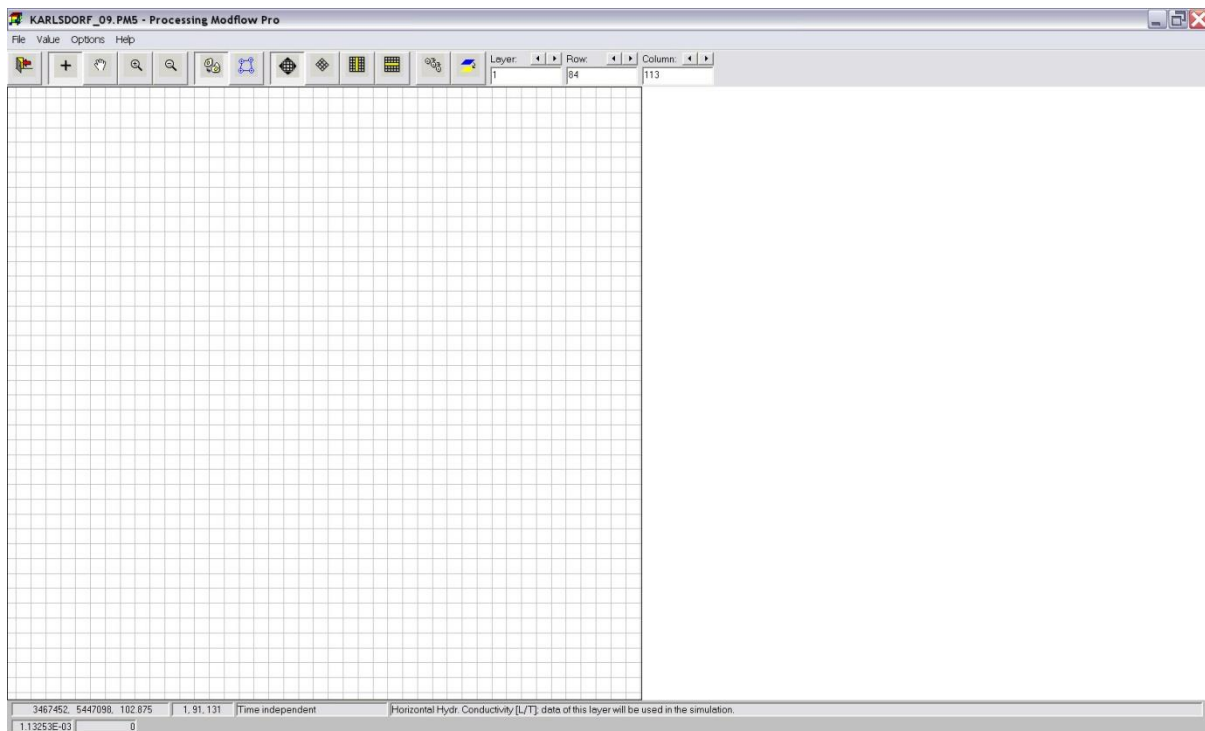
Results Extractor: Erzeugt Matrizen aus ausgewählten Eingabe-Parametern

Water Budget: Erstellen der Wasserbilanz für das gesamte Modellgebiet oder für ausgewählte Teilbereiche (Zones). Die Wasserbilanz sollte für jede Berechnung überprüft werden.

4.3 Eingabe von Parametern

Die meisten Parameter werden über eine grafische Eingabemaske in das Modell eingelesen. Diese Eingabemaske orientiert sich an den Schichten des Modells. Dabei stehen verschiedene Eingabe-Möglichkeiten zur Verfügung:

4.3.1 Eingabemaske für flächenhaft verteilte Modellparameter



Oberste Zeile: Einblendung des Modell-Namens


Zweite Zeile von oben: Speichern der Eingabe als Grafik (*File*), Auswahl der Eingabe-Methode (*Value*) und Anpassung der Darstellung (*Options*).

Dritte Zeile von oben: Button-Leiste zur Steuerung der Eingabe (s.u.) und drei Anzeige-Fenster für die aktuelle Cursor-Position (diese kann durch entsprechende Eingabe verändert werden).

Feld: Grafische Darstellung des Eingabebereichs

Zweit-unterste Zeile: Cursor-Position in globalen Koordinaten (z.B. Rechts und Hochwerte der Zelle und Höhenlage der Zelle in mNN); Cursor-Position in Zell-Koordinaten: Schicht (Layer), Zeile (Row), Spalte (Column); zeitliches Verhalten (stationär oder instationär); ausgewählter Parameter.

Unterste Zeile: Wert des Parameters der bearbeiteten Zelle und Parameter

Nummer (falls die unterste Zeile nicht sichtbar ist, bitte Windows-Symbol  (rechts oben) drücken).

4.3.2 Button-Leiste



Leave: Speichern der Eingabedaten - Verlassen der Eingabemaske – Rückkehr zum Hauptmenü von PMWIN



Entry-Mode: Dateneingabe ist nur möglich, wenn dieser Knopf gedrückt ist.



Pan: Horizontales Verschieben des Modellgitters (die Koordinaten des Modellgitters bleiben erhalten)



Zoom-in-Button: Auswahl und Vergrößerung eines Teils des Modellgitters (sinnvoll bei sehr großen Gittern oder hoch aufgelösten Teilbereichen)



Show-Full-Extent-Button: Darstellung des gesamten Modellgitters (Rückkehr aus dem Zoom-Modus)



Cell-by-Cell Input Method: Eingabe der Parameterwerte für einzelne Zellen



Polygon Input Method: Eingabe der Parameterwerte für ein oder mehrere vorgegebene Polygone (z.B. um Verteilungen aus Karten zu übernehmen)



Grid View: Horizontale Darstellung des Modellgitters unter optimaler Ausnutzung des Bildschirms



Map View: Horizontale Darstellung des Modellgitters in seiner tatsächlichen Lage und Ausrichtung bezüglich eines gewählten Hintergrunds (Vorsicht, im Untermenü *Environment - Coordinate System* muss ein geeignetes Fenster gewählt sein)



Column View: Darstellung eines vertikalen Schnitts durch das Modellgebiet entlang einer Spalte des Modellgitters



Row View: Darstellung eines vertikalen Schnitts durch das Modellgebiet entlang einer Zeile des Modellgitters



Duplication Mode: Kopieren des Parameterwerts einer Zelle auf alle Zellen, die mit dem Cursor markiert werden (entweder durch Pfeiltasten oder durch Mausbewegung + Anklicken)



Layer Copy Mode: Kopieren der Parameterwerte einer ganzen Modellschicht auf Schichten, die angesteuert werden (entweder durch die Tasten PageUp bzw. PageDown oder durch Eingabe im *Layer* Fenster)



4.3.3 Bearbeitung einer einzelnen Modellzelle

- Auswahl der Modellzelle mit der linken Maustaste (ausgewählte Zelle ist fett umrandet).
- Öffnen der Eingabemaske durch klicken der rechten Maustaste

- Eingabe des Parameterwerts, z.B. horizontale hydraulische Durchlässigkeit der Zelle (*Parameter Number* dient der automatischen Kalibrierung und wird im Kurs nicht verwendet).
- Speichern der Eingabe mit über den *OK*-Knopf.

4.3.4 Bearbeitung mehrerer Modellzellen

Methode 1: Wiederholtes Vorgehen mit dem Verfahren zur Bearbeitung einer einzelnen Modellzelle (s.o.)

Methode 2: Einschalten des *Duplication Mode*  oder des *Layer-Copy Mode*  aus der Button-Leiste (s.o.) (Vorsicht, *Duplication Mode* oder des *Layer-Copy Mode* muss nach Verwendung wieder ausgeschaltet werden).

Methode 3: Verwendung der *Polygon-Input-Method* .

Methode 4: Überschreiben einer Modellschicht oder aller Modellschichten mit einem einzigen Parameterwert über *Value – Reset Matrix* (zweite Zeile von oben bei der Eingabemaske für flächenhaft verteilte Parameter).

5 Übungsaufgabe mit PMWIN

5.1 Festlegung des Dateinamens (Untermenü File)

File – New Model: Vorgabe des **Modellnamens** (Vorsicht, keine Umlaute, ß o.ä. im Dateinamen); sinnvoll ist die Verwendung eines eigenen Ordners für das Modell

5.2 Aufbau des Modellgitters (Untermenü Grid)

Einschub: Einheiten

Die Zeiteinheit für die Modellrechnungen wird im Untermenü *Parameters - Time* festgelegt. Die verwendete Längeneinheit (m, km, miles) muss nicht gesondert spezifiziert werden. Es ist jedoch darauf zu achten, dass für alle Modellparameter die gleiche Längeneinheit gewählt wird. Wenn beispielsweise die Ausdehnung des Modellgebiets in m eingegeben wird, müssen auch alle anderen Parameter in der Längeneinheit m gegeben sein (beispielsweise k_f in m/s, Entnahmerate in m^3/s). Ein Wechsel der Längeneinheiten während der Dateneingabe ist nicht möglich.

5.2.1 Grid – Mesh Size – Model Grid:

3 Modellschichten (Layers)

Gesamtmächtigkeit des Modells (Model Thickness): **110** m

Oberkante des Modells (Model Top Elevation): **100** mNN

90 Zeilen (Rows)

Ausdehnung des Modells in y-Richtung: **9000** m

130 Spalten (Columns)

Ausdehnung des Modells in x-Richtung: **13000** m

Vertikale Überhöhung (bei der Darstellung): **20** fach

Das Modellgitter muss grundsätzlich zunächst mit einer einheitlichen Gitterweite in x- bzw. y-Richtung vorgegeben werden, aber die Größe für jede Zeile und jede Spalte kann nachträglich beliebig verändert werden. Es ist jedoch zu beachten, dass sich dabei die Gesamtausdehnung des Gitters ändert.

5.2.2 Grid – Mesh Size – Coordinate System:

Grid Position

Koordinaten der linken oberen Ecke des Modellgebiets:

X0 = **3463500**; Y0 = **5492500**

Winkel der X-Achse des Modellgitters zur West-Ost-Richtung: A = **0°**

Viewing Window Size

X1 = **3454000**

Y1 = **5476000**

X2 = **3478000**

Y2 = **5500000**

5.2.3 Grid – Layer Property:

Type = **3** (variabel) für alle drei Schichten (während der Berechnung wird modellintern für alle Zellen überprüft, ob der Wasserspiegel frei oder gespannt ist).

Horizontaler Anisotropiefaktor = **1** für alle drei Schichten (d.h. die hydraulische Durchlässigkeit in x- und y-Richtung ist gleich)

Vertikale Anisotropie = **VK** für alle drei Schichten (die vertikale hydraulische Durchlässigkeit wird später direkt eingegeben und nicht aus einem Anisotropiefaktor berechnet).

Transmissivität = **calculated** für alle drei Schichten (die Transmissivität wird aus der hydraulischen Durchlässigkeit und der Zellmächtigkeit intern berechnet).

Leakance = **calculated** für alle drei Schichten (die vertikale hydraulische Durchlässigkeit zwischen zwei Schichten wird modellintern aus den vertikalen Durchlässigkeiten der beiden Schichten und den Abständen der Zellmittelpunkte berechnet)

5.2.4 Grid – Cell status – IBOUND:

Vorgabe eines Festpotenzials (*Cell Status* = **-1**) für Spalte 1 in Schicht 1 und Schicht 3. Alle anderen Zellen sind als normale Rechenknoten gekennzeichnet (*Cell Status* = **1** [Default]).

Wenn eine aktive Modellzelle am Rand des Modellgebiets liegt, ist dieser Rand automatisch undurchlässig und muss nicht gesondert gekennzeichnet werden.

Für das Übungsbeispiel bedeutet dies, dass alle Ränder außer dem Westrand zunächst undurchlässig sind.

Einschub: Erläuterung zu Rand- und Anfangsbedingungen

Randbedingungen: Zur Lösung des linearen Gleichungssystems sind immer Angaben zum Strömungsverhalten am Rand des Modellgebiets notwendig. Es werden 3 Arten von Randbedingungen unterschieden:

I. Randbedingungen der 1. Art oder Dirichlet-Randbedingung oder Festpotentialrand:

$$h_{Rand} = h_{FP} = \text{konstant}$$

Als Festpotentiale kommen z. B. aus Messwerten interpolierte Wasserstände am Modellrand oder die Wasserstände von hydraulisch gut angebundenen Oberflächengewässern in Frage. Zur stationären Lösung der Strömungsgleichung muss im Modellgebiet mindestens ein Festpotential vorhanden sein.

II. Randbedingung der 2. Art oder Neumann-Randbedingung oder Zustromrand:

$$q_{Rand} = -k_f \frac{\partial h_{Rand}}{\partial n} = \text{konstant}$$

Randzuflüsse sind dann sinnvoll, wenn z. B. ein Lockergesteins-Aquifer im Tal einen Zufluss aus dem angrenzenden Gebirge erhält. Ein häufig verwendeter Sonderfall ist der undurchlässige Rand, an dem gilt: $q_{Rand} = 0$. Der undurchlässige Rand beschreibt z.B. die Situation, dass der Modellgebietsrand von einer Stromlinie gebildet wird.

III. Randbedingung der 3. Art oder gemischte Randbedingung:

$$q_{Rand} = -k_f \frac{\partial h_{Rand}}{\partial n} = l(\hat{h} - h_{Rand})$$

mit $l = \text{Leakage-Faktor} = k_{f,l} d_l^{-1} [T^{-1}]$

$k_{f,l} = \text{hydraulische Durchlässigkeit der Leakage-Schicht} [L T^{-1}]$

$d_l = \text{Dicke der Leakage-Schicht} [L]$

$\hat{h} = \text{Wasserstand, der die Leakage-Strömung antreibt} [L]$

Die Randbedingung der 3. Art stellt eine Kombination aus den ersten beiden Randbedingungen dar. Sie wird dann verwendet, wenn z. B. ein Oberflächengewässer nicht perfekt an den Aquifer angeschlossen ist. Je größer der Leakage-Faktor l ist, umso besser ist die Anbindung. Für große Werte von l nähert sich die Randbedingung der 3. Art einem Festpotentialrand an.

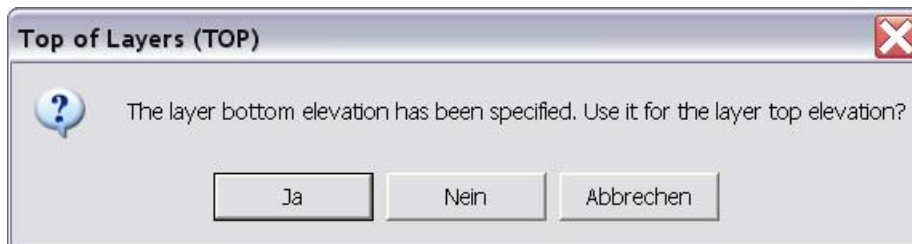
Ein Leakage-Rand wird auch für Drainagen oder Quellaustritte verwendet. Damit wird, im Gegensatz zum Festpotentialrand, verhindert, dass dem Aquifer Wasser aus der Drainage oder dem Quellaustritt zufließt, wenn die Piezometerhöhen im Aquifer lokal unter die Randhöhen fallen.

Anfangsbedingungen: Bei instationären Strömungsberechnungen muss eine sinnvolle Anfangsverteilung der Piezometerhöhen im Modellgebiet vorgegeben werden. Von dieser Anfangsverteilung aus wird dann die zeitliche Entwicklung der Piezometerhöhen berechnet.

Die stationäre Höhenverteilung ist unabhängig von den Anfangshöhen und wird nur über die Ränder gesteuert. In vielen Modellen muss trotzdem eine Höhenverteilung vorgegeben.

5.2.5 Grid – Top of Layers:

Beim Aufrufen dieses Untermenüs (und auch des Untermenüs *Grid – Bottom of Layers*) erscheint folgendes icon:



Ja bedeutet, dass die Unterkante von Schicht 1 automatisch mit der Oberkante von Schicht 2 gleichgesetzt wird usw., d.h. im Modellgebiet werden alle Schichten erfasst.

Nein bedeutet, dass im Modellgebiet Schichtlücken vorkommen können, d.h. einzelne Schichten (z.B. Trennhorizonte) werden nicht explizit berücksichtigt. Die Unterkante von Schicht 1 kann dann beispielsweise höher liegen als die Oberkante von Schicht 2.

Für die Übungsaufgabe soll **Ja** gewählt werden.

Folgende Lagen der *Schicht-Oberkanten* sollen gewählt werden:

Schicht 1 = **100** mNN

Schicht 2 = **60** mNN

Schicht 3 = **50** mNN

5.2.6 Grid – Bottom of Layers:

Folgende Lagen der *Schicht-Unterkanten* sollen gewählt werden:

Schicht 1 = **60** mNN

Schicht 2 = **50** mNN

Schicht 3 = **-10** mNN

Die Eingabe der Gitter-Geometrie ist abgeschlossen.

5.3 Eingabe der hydrogeologischen Kennwerte (Untermenü Parameters)

5.3.1 Parameters – Time

Periode 1 **Active** ; Transient **nicht** aktivieren, d.h. stationäre Strömung; Periodenlänge = **1** (s); Rest Vorgabe übernehmen

Einheit für die Simulationszeit = **Sekunden**

5.3.2 Parameters – Initial & Prescribed Hydraulic Heads

Folgende Werte sollen für die *Anfangshöhen* gewählt werden:

Schicht 1 = **87.5** mNN

Schicht 2 = **87.5** mNN

Schicht 3 = **85.5** mNN

Die *Anfangshöhen* werden für Festpotenzial-Zellen (Cell Status = -1) als unveränderliche *Festpotenzialhöhen* verwendet.

5.3.3 Parameters – Horizontal Hydraulic Conductivity

Folgende Werte sollen für die *horizontale hydraulische Durchlässigkeit* gewählt werden:

Schicht 1 = **1.3x10⁻³** m/s (Eingabe als 0.0013 oder 1.3e-3)

Schicht 2 = **2x10⁻⁸** m/s

Schicht 3 = **5x10⁻⁴** m/s

Einschub: Durchlässigkeiten zwischen den Zellen

Eingabeparameter des numerischen Modells sind die Durchlässigkeiten bzw. Transmissivitäten der einzelnen Zellen, zur Berechnung der Wasserbilanzen der diskretisierten Strömungsgleichung werden jedoch die Transmissivität **zwischen** den Zellen benötigt. Diese müssen aus den Eingabewerten interpoliert werden. Meist wird dazu das harmonische Mittel der Transmissivitäten der zwei benachbarten Zellen verwendet. Bei einem regelmäßigen Gitter ergibt sich dann:

$$\frac{1}{T_{10}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_0} \right) = \frac{1}{2} \frac{T_1 + T_0}{T_1 T_0}$$

$$T_{10} = \frac{2T_1 T_0}{T_1 + T_0}$$

Das harmonische Mittel errechnet sich aus dem Mittelwert der Kehrwerte. Dabei werden kleine Transmissivitäten stärker gewichtet. folgende Beispielsrechnung verdeutlicht dies:

$$T_1 = 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}, T_0 = 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s};$$

Für das harmonische Mittel T_{10} ergibt sich:

$$T_{10} = \frac{2T_1T_0}{T_1 + T_0} = \frac{2 \cdot 10^{-6}}{1.01 \cdot 10^{-2}} = 1.98 \cdot 10^{-4}$$

Das arithmetische Mittel $T_{10,a}$ ergibt einen sehr viel größeren Wert:

$$T_{10,a} = \frac{T_1 + T_0}{2} = \frac{1.01 \cdot 10^{-2}}{2} = 5.05 \cdot 10^{-3}$$

Wenn z.B. eine der beiden Zelltransmissivitäten null ist, ist bei der harmonischen Mittelung auch die Transmissivität zwischen den Zellen null. Dies bedeutet, dass kein Wasser zwischen den Zellen ausgetauscht wird, was auch physikalisch sinnvoll ist. Bei arithmetischer Mittelung hingegen würde fälschlich ein Fluss in eine undurchlässige Zelle ermöglicht. Die harmonische Mittelung bei der Grundwasserströmung entspricht der Hintereinanderschaltung von Widerständen beim elektrischen Stromfluss.

Falls das Gitter unregelmäßig ist, müssen die Zelltransmissivitäten noch mit der Zellgröße gewichtet werden.

Fast alle Strömungsmodelle verwenden automatisch eine harmonische Mittelung.

5.3.4 Parameters – Vertical Hydraulic Conductivity

Folgende Werte sollen für die *vertikale hydraulische Durchlässigkeit* gewählt werden:

Schicht 1 = 2×10^{-4} m/s

Schicht 2 = 2×10^{-8} m/s

Schicht 3 = 1×10^{-4} m/s

5.3.5 Parameters – Effective Porosity

Für das gesamte Modellgebiet soll ein einheitlicher Wert von 22 % gewählt werden.

Eigentlich wird die effektive Porosität bei der Strömungsberechnung nicht benötigt. Für die Darstellung von Zeitmarkern im Bahnlinien-Modul ist der Parameter aber erforderlich. PMWIN verlangt die Eingabe in jedem Fall.

Die Eingabe der hydrogeologischen Kennwerte ist damit abgeschlossen. Die bisherigen Eingaben (Modellgitter + Kennwerte) sind unbedingt erforderlich, um ein lauffähiges Modell zu erhalten. Die übrigen Eingaben betreffen vor allem externe Quellen und Senken der Strömung (z.B. Randzuflüsse, Grundwasserneubildung, Entnahmen). Diese können für den jeweils vorliegenden Fall notwendig sein, sie sind aber nicht grundsätzlich erforderlich.

5.4 Eingabe von Messstellen (Untermenü Models – Modflow – Head Observations)

Im Modellgebiet sollen später sechs Brunnen eines Wasserwerks betrieben werden, drei im oberen Grundwasserleiter (FB1 – FB3, Schicht 1) und drei im tieferen Stockwerk (TB1 – TB3, Schicht 3). Die Lage der sechs Brunnen zeigt die folgende Tabelle:

Brunnen	Modellschicht	Rechtswert	Hochwert
FB1	1	3465650	5490350
FB2	1	3466150	5489350
FB3	1	3466550	5487350
TB1	3	3466150	5490150
TB2	3	3466050	5488650
TB3	3	3466150	5487850

Um die Position der im Modell zu berücksichtigenden Brunnen leichter finden zu können ist es sinnvoll, diese zunächst als Messstellen einzugeben.

- Im Feld *Name* bitte keine Leerzeichen, Umlaute oder Schrägstriche (/) verwenden.
- Der Namen kann aus maximal 8 Zeichen bestehen.
- Im Feld *Layer Proportions* ist bei den Flachbrunnen (FB1 – FB3) für Schicht 1 eine **1** zu wählen, in den übrigen beiden Schichten eine **0**. Bei den Tiefbrunnen (TB1 – TB3) ist in Schicht 3 eine **1** zu wählen und ansonsten eine **0**.

5.5 Eingaben der Quellen und Senken der Strömung (Untermenü Models – Modflow – Flow packages)

5.5.1 Grundwasserneubildung: Models – Modflow – Flow packages – Recharge

Für das Modellgebiet soll ein einheitlicher Wert der *Grundwasserneubildung* von **5×10^{-9}** m/s (= 158 mm/a) angenommen werden.

Bei der Eingabe der Grundwasserneubildung gibt es folgenden Optionen hinsichtlich der Verteilung:

Option 1 ist der Standard und soll auch für das Übungsbeispiel verwendet werden. Option 2 und 3 werden nur für Sonderfälle benötigt, beispielsweise wenn die Schicht 1 nur in Teilen des Modellgebiets vorkommt und in anderen Teilen eine der liegenden Schichten den obersten Aquifer bildet.

Die Grundwasserneubildung wird im Eingabemenü zwar in allen Schichten dargestellt, sie wird aber nur für eine Schicht berücksichtigt.

5.5.2 Entnahmebrunnen: Models – MODFLOW – Flow packages - Well

Die Förderraten der sechs Brunnen sind in der folgenden Tabelle dargestellt:

Brunnen	Modellschicht	Förderrate
FB1	1	60 l/s (0.06 m ³ /s)
FB2	1	30 l/s
FB3	1	40 l/s
TB1	3	25 l/s
TB2	3	40 l/s
TB3	3	25 l/s

Die Förderrate ist mit einem **negativen Vorzeichen** zu versehen und in m³/s einzugeben.

Einschub: Entnahme über mehrere Modellschichten

Falls ein Brunnen über mehr als eine Modellschicht verfiltert wäre, könnte dies mit einer der folgenden Vorgehensweisen berücksichtigt werden.

- Die Entnahmerate wird gleichmäßig auf alle betroffenen Schichten verteilt, d.h. in jeder Modellschicht wird ein Brunnen mit der entsprechenden Teil-Entnahmerate definiert.
- Die Entnahmerate wird nicht gleichmäßig, sondern entsprechend der Zell-Transmissivität ($k_f \times \Delta z$) verteilt
- Die Gesamt-Entnahme wird nur in der Zelle angesetzt, in der sich die Pumpe befindet. Die restlichen Zellen, die vom Brunnen erfasst werden, werden mithilfe einer künstlich erhöhten vertikalen Durchlässigkeit (z.B. $K_{fz} = 1$ m/s) angeschlossen.

5.5.3 Randzufluss: Models – Modflow – Flow packages – Well

Eine Randzufluss wird in PMWIN in Form eines Zugabebrunnens, d.h. als Brunnen mit positiver Rate, angesetzt.

Es soll von einem Zufluss am östlichen (rechten) Modellrand in Höhe von 10 l/s /km ausgegangen werden. Der Zufluss sei auf die oberste Modellschicht beschränkt. Da eine Zelle 100 m breit ist, ergibt sich für jede Zelle am östlichen Modellrand in Schicht 1 eine Zuflussrate von **1** l/s (**0.001** m³/s).

5.6 Gleichungslösung

Zur Lösung der diskretisierten Strömungsgleichung stehen mehrere Verfahren zur Verfügung.

Einschub: Lösung der Strömungsgleichung

Alle gängigen Grundwassermodell verwenden implizite Verfahren zur Gleichungslösung, d.h. für die räumlichen Differenzen werden die unbekanntes Piezometerhöhen des neuen Zeitschritts verwendet, d. h. $h(t')=h(t+\Delta t)$. Dadurch können die einzelnen Knotengleichungen nicht unabhängig von den Gleichungen für die anderen Knoten gelöst werden, sondern sie müssen jetzt als Gleichungssystem behandelt werden.

Das Gleichungssystem ist linear und kann folgendermaßen geschrieben werden:

$$A \cdot h = b$$

mit

(A) = Matrix der Größe $(NX \times NY \times NZ) \times (NX \times NY \times NZ)$, in der die **bekanntes** Koeffizienten des Gleichungssystems gespeichert sind. Diese Koeffizienten bestehen aus den Transmissivitäten T, den Gitterabständen Δx und Δy und den Speicherkoeffizienten S.

(h) = Vektor der Länge $NX \times NY \times NZ$, in dem die **unbekanntes** Piezometerhöhen h zur Zeit $t+\Delta t$ gespeichert sind

(b) = Vektor der Länge $NX \times NY \times NZ$, in dem die **bekanntes** externen Zu- oder Abflüsse w und die Speicherkoeffizienten S gespeichert sind

Bei der Lösung dieses Gleichungssystems kann man zwischen direkten und iterativen Verfahren unterscheiden. Beim **direkten Gleichungslöser** wird die Koeffizientenmatrix z. B. mit dem Gauß-Jordan Eliminationsverfahren umgeformt und durch Einsetzen gelöst. Der Nachteil des direkten Verfahrens besteht darin, dass die ganze Koeffizientenmatrix gespeichert werden muss. Dies führt generell zu einem hohen Speicherbedarf. Bei ein Modellgebiet, das in $130 \times 90 \times 3$ Zellen diskretisiert wurde, beträgt z. B. die Größe der Koeffizientenmatrix bereits $(130 \times 130) \times (90 \times 90) \times (3 \times 3) > 1$ Milliarden Elemente. In MODFLOW wird auch ein direkter Gleichungslöser angeboten, dieser funktioniert aber nur bis zu einer bestimmten Anzahl von Zellen.

Zusätzlich zum direkten Lösungsverfahren werden in MODFLOW mehre **iterative Gleichungslöser** angeboten. Bei diesen Lösern muss immer nur ein Teil der Matrix, z. B. nur eine Zeile oder Spalte, gleichzeitig gespeichert werden, deshalb können sie auch bei sehr großen Modellgebieten eingesetzt werden. Eine relativ effiziente iterative Lösungsmethode ist das in MODFLOW angebotene PCG-Verfahren (Preconditioned Conjugate Gradient). Dabei wird das Gleichungssystem $(A) (h) = (b)$ iterativ als Minimum-Problem gelöst. Das Konvergenzverhalten kann mit Hilfe einer Prädiktionierungs-Matrix beschleunigt werden: $(M)^{-1} (A) (h) = (M)^{-1} (b)$.

Sonderfall freier Aquifer

Die Transmissivität T ist das Produkt aus der Durchlässigkeit k_f und der durchströmten Aquifermächtigkeit. Im gespannten Fall ist diese Mächtigkeit konstant. Im freien Aquifer jedoch entspricht die durchströmte Mächtigkeit der Differenz aus Piezometerhöhe h und der Lage der Aquifersohle b . Dadurch taucht die Piezometerhöhe nicht nur im Vektor (h), sondern auch in der Koeffizientenmatrix (A) auf. Das Gleichungssystem ist daher nichtlinear und numerisch schwieriger zu handhaben.

Die bisher vorgestellten Lösungsverfahren sind ausschließlich für lineare Gleichungssysteme verwendbar. Um sie dennoch einsetzen zu können, wird das Gleichungssystem für den freien Aquifer linearisiert. Zu diesem Zweck wird die Transmissivität innerhalb eines Iterationsschritts konstant gehalten und erst am Ende der Iteration mit Hilfe der Neuberechneten Piezometerhöhen aktualisiert. Im Laufe der Iterationen werden die Änderungen in T immer kleiner, bis sie vernachlässigt werden können:

$$A^{alt} \cdot h^{neu} = b$$

Für das Übungsbeispiel soll der PCG2-Löser verwendet werden:

5.6.1 Models – Modflow – Solvers – PCG2

Es sollen **100** äußere Iterationen und **70** innere Iterationen gewählt werden. Als Konvergenzkriterium ist für die Änderungen der Wasserstände (head change) ist **10^{-7}** m vorzugeben, und für die Änderungen der Wasserflüsse (residual) **10^{-7}** m³/s. Die anderen Parameter sollen unverändert übernommen werden.

Einschub: Iterationen

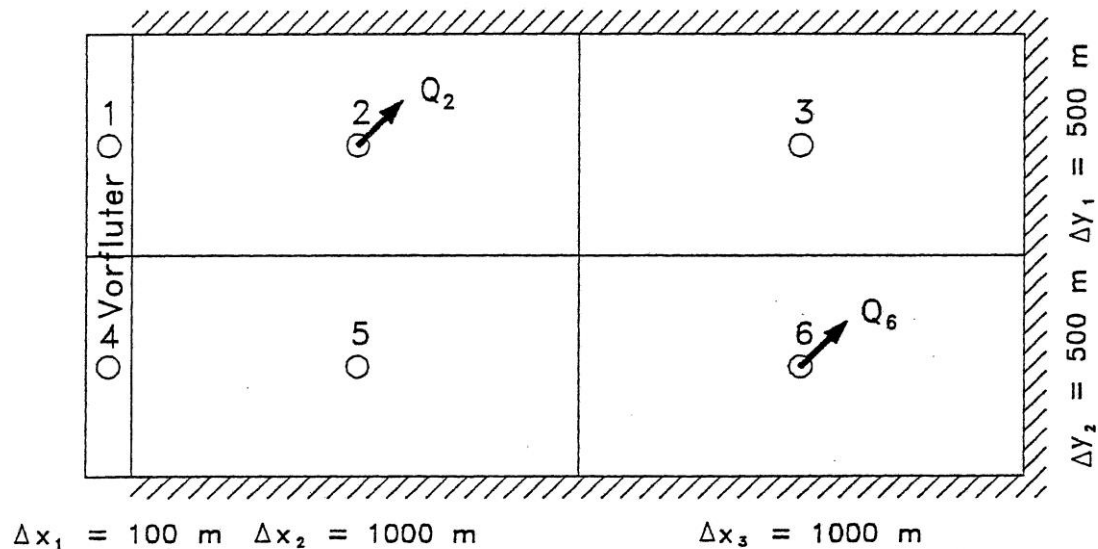
Iterative Gleichungslöser wie z.B. das PCG-Verfahren lösen das lineare Gleichungssystem der Grundwasserströmung nicht exakt, sondern liefern lediglich eine Näherungslösung. Dabei wird zunächst eine Wasserspiegelverteilung geschätzt (*Initial Heads*) und diese dann durch mehrfaches Wiederholen des Lösungsalgorithmus sukzessive verbessert. Die einzelnen Teilschritte bei dieser Näherungslösung nennt man Iteration. Das Verfahren prüft nach jeder Iteration, wie stark sich das Berechnungsergebnis verändert hat, und zwar sowohl hinsichtlich der Wasserstände als auch hinsichtlich der Flüsse zwischen den Zellen. Sobald diese Änderungen geringer sind als die Werte, die in den Konvergenzkriterien (*head change* und *residual*) vorgegeben sind, wird die Gleichungslösung abgeschlossen und das Ergebnis gespeichert. Grundsätzlich gilt, dass das Ergebnis umso genauer wird, je kleiner die Konvergenzkriterien eingestellt werden. Allerdings wird im konkreten Fall nicht jede beliebig hohe Genauigkeit erreicht werden können. Das Ergebnis sollte immer mithilfe der Wasserbilanz des Modellgebiets kontrolliert werden (s.u.).

Mithilfe einer beschränkten Anzahl an äußeren Iterationen wird erreicht, dass die Berechnung auch im Fall von Konvergenzproblemen endet. Das Berechnungsergebnis ist in dann jedoch meist unbrauchbar.

Die Vorgabe einer bestimmten Anzahl innerer Iterationen ist erforderlich, weil der PCG-Löser in zwei Stufen arbeitet. Zunächst werden für die Wasserstände Schätzwerte vorgegeben, und auch die Wasserstands-abhängigen Randzuflüsse (z.B. River) werden auf Basis dieser Schätzwerte festgelegt. Innerhalb einer äußeren Iteration werden nun die Wasserstände neu berechnet, und zwar solange, bis entweder die Konvergenzkriterien unterschritten oder die maximale Anzahl an inneren Iterationen überschritten wird. Die Randzuflüsse werden dabei nicht verändert. Für die nächste äußere Iteration werden dann die Wasserstands-abhängigen Randzuflüsse aktualisiert und eine weitere Folge innerer Iterationen gestartet usw.

Bei großen Modellen mit langen Rechenzeiten oder bei Konvergenzproblemen kann es sich lohnen, die Anzahl innerer Iterationen zu variieren, um einen optimalen Wert zu finden. Man kann hier eigentlich nichts falsch machen, denn es gibt ja nur eine Lösung für das Gleichungssystem, und diese sollte unabhängig vom Lösungsschema sein. Allerdings lässt sich die Rechendauer mit einem geeigneten Verfahren und optimalen Steuerparametern u.U. deutlich verkürzen.

6 Einschub vereinfachtes Übungsbeispiel: Stationäre Grundwasserströmung im gespannten Aquifer (nach Kinzelbach und Rausch).



6.1 Gegebene Parameter

Transmissivitäten der Zellen:

$$T_1 = T_2 = T_3 = 0,05 \text{ m}^2/\text{s}$$

$$T_4 = T_5 = T_6 = 0,01 \text{ m}^2/\text{s}$$

Festpotenzial: $h_1 = h_4 = 10 \text{ m}$

1. Brunnen: $Q_2 = -0,001 \text{ m}^3/\text{s}$

2. Brunnen: $Q_6 = -0,005 \text{ m}^3/\text{s}$

Grundwasserneubildung: $Q_{\text{GWN}} = 10^{-8} \text{ m/s}$ (315 mm/a)

6.2 Aufgabe

Berechnen Sie die Wasserstände h_2 , h_3 , h_5 und h_6 . Besteht bei dem o.g. Betrieb die Gefahr, dass schadstoffbelastetes Flusswasser in die Brunnen gelangt?

6.3 Numerische Lösung

Aufstellen der Wasserbilanz für die Zellen 2, 3, 5 und 6

(Kontinuitätsbedingung)

$$\text{Zelle 2: } Q_{12} + Q_{52} + Q_{32} + Q_N + Q_2 = 0$$

$$\text{Zelle 3: } Q_{23} + Q_{63} + Q_N = 0$$

$$\text{Zelle 5: } Q_{45} + Q_{25} + Q_{65} + Q_N = 0$$

$$\text{Zelle 6: } Q_{56} + Q_{36} + Q_N + Q_6 = 0$$

Berechnung der Zu- und Abflüsse am Beispiel der Zelle 2

(Darcy-Gesetz)

$$Q_{12} = T_{12} \frac{h_1 - h_2}{\frac{\Delta x_1}{2} + \frac{\Delta x_2}{2}} \Delta y_1$$

mit

$$T_{12} = \frac{(\Delta x_1 + \Delta x_2) T_1 \cdot T_2}{T_1 \Delta x_2 + T_2 \Delta x_1}$$

$$Q_{12} = 0,454545 - 0,045455 \cdot h_2$$

$$Q_{52} = 0,033333 \cdot h_5 - 0,045455 \cdot h_2$$

$$Q_{32} = 0,025000 \cdot h_3 - 0,025000 \cdot h_2$$

$$Q_N = Q_{GWN} \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta y_1 = 10^{-8} \cdot 1000 \cdot 500 = 0,005 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_2 = -0,001 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_6 = -0,005 \text{ m}^3/\text{s}$$

Bilanzgleichungen

$$\text{Zelle 2: } 0,458545 - 0,103788 \cdot h_2 + 0,025000 \cdot h_3 + 0,033333 \cdot h_5 = 0$$

$$\text{Zelle 3: } 0,005000 + 0,025000 \cdot h_2 - 0,058333 \cdot h_3 + 0,033333 \cdot h_6 = 0$$

$$\text{Zelle 5: } 0,095909 + 0,033333 \cdot h_2 - 0,005000 \cdot h_5 + 0,005000 \cdot h_6 = 0$$

$$\text{Zelle 6: } 0,000000 + 0,033333 \cdot h_3 + 0,005000 \cdot h_5 - 0,038333 \cdot h_6 = 0$$

4 Gleichungen für 4 Unbekannte

$$-0,103788 \cdot h_2 + 0,025000 \cdot h_3 + 0,033333 \cdot h_5 + 0,000000 \cdot h_6 = -0,458545$$

$$0,025000 \cdot h_2 - 0,058333 \cdot h_3 + 0,000000 \cdot h_5 + 0,033333 \cdot h_6 = -0,005000$$

$$0,033333 \cdot h_2 + 0,000000 \cdot h_3 + 0,047424 \cdot h_5 + 0,005000 \cdot h_6 = -0,095909$$

$$0,000000 \cdot h_2 + 0,033333 \cdot h_3 + 0,005000 \cdot h_5 + 0,038333 \cdot h_6 = 0,000000$$

Iterative Lösung des Gleichungssystems mit dem Gauß-Seidel-Verfahren

$$h_2 = 0,240876 \cdot h_3 + 0,321164 \cdot h_5 + 4,418093$$

$$h_3 = 0,428574 \cdot h_2 + 0,571426 \cdot h_6 + 0,085715$$

$$h_5 = 0,702872 \cdot h_2 + 0,105432 \cdot h_6 + 2,022373$$

$$h_6 = 0,869564 \cdot h_3 + 0,130436 \cdot h_5$$

Ablauf der Iteration

	Startwerte	Iteration Nr.						
		1	2	3	...	20	21	22
h_2	10	10,04	10,11	10,15	...	10,24	10,24	10,24
h_3	10	10,10	10,19	10,26	...	10,42	10,43	10,43
h_5	10	10,13	10,19	10,23	...	10,32	10,32	10,32
h_6	10	10,11	10,19	10,25	...	10,41	10,41	10,41

Alle Werte in mNN

7 Berechnung der Wasserstände (Fortsetzung des numerischen Übungsbeispiels)

7.1 Models – Modflow – Run

Vor dem Beginn der eigentlichen Berechnung werden die Daten, die bisher nur im binären (speicherschonenden) Format von PMWIN abgespeichert sind, in das ASCII-Format überführt, das von MODFLOW benötigt wird. Dabei erkennt PMWIN automatisch, welche Dateien erzeugt werden müssen und welche bereits vorhanden sind.

Im unteren Teil des Run-Fensters können vier Check-Boxen angeklickt werden:

- *Check Model Data*: Es wird überprüft, ob die Modellgeometrie und die Eingangsparameter plausibel sind, beispielsweise ob die Oberkanten der Schicht 2 nirgends höher sind als die zugehörigen Unterkanten der Schicht 1. Diese Datenüberprüfung garantiert natürlich nicht, dass die Eingabedaten auch inhaltlich richtig sind. Das Ergebnis der Überprüfung wird in der Datei CHECK.LIS protokolliert. Diese Datei kann mit einem Text-Editor angesehen werden.
- *Regenerate all input files*: Die MODFLOW-Dateien werden neu erzeugt, auch wenn die entsprechenden Dateien schon existieren. Diese Option ist schlimmstenfalls überflüssig, sie erzeugt aber keinen Schaden.
- *Don't generate MODPATH Files anyway*: Die MODPATH-Files werden nur manchmal benötigt, sie können aber sehr groß werden. Um Speicherplatz zu sparen, kann diese Option aktiviert werden.
- *Generate input files only, don't start MODFLOW*: Falls es Probleme bei der Berechnung gibt, können die MODFLOW-Dateien durch Aktivieren dieser Option erzeugt und überprüft werden, ohne dass die Modellrechnung startet.

Nach dem Start der Modellrechnungen öffnet sich automatisch ein DOS-Fenster, auf dem der Verlauf der Gleichungslösung dargestellt wird.

Die Modellrechnungen sind jetzt abgeschlossen, und die Ergebnisse sind in verschiedenen Dateien abgelegt. PMWIN bietet neben der bisher gezeigten Erleichterung der Dateneingabe auch die Möglichkeit, die Berechnungsergebnisse darzustellen. Einige der Darstellungsmöglichkeiten werden im Folgenden vorgestellt.

7.2 Verteilung der berechneten Wasserstände (Untermenü Tools – 2D-Visualization)

Wählen Sie bitte unter MODFLOW als *Result type* **Hydraulic Head**.

Sie erhalten nun eine Darstellung der berechneten Wasserstände für alle Schichten.

7.2.1 Anpassung der Darstellung: Options – Environment

Unter *Appearance* können Sie entscheiden, welche Modellparameter in welcher Farbe dargestellt werden.

Unter *Coordinate System* könnten Sie die Einbindung des Modellgitters in ein globales Koordinatensystem verändern.

Unter *Contours* lassen sich die Einstellungen für die Darstellung der berechneten Wasserstände anpassen. Wenn Sie auf das graue Feld *Level...* klicken, können Sie den dargestellten Bereich und die Abstände zwischen den Isolinien wählen. Unter *Label Format* können Sie die Beschriftung der Isolinien verändern.

7.2.2 Laden einer Hintergrundkarte: Options - Maps

Es soll die Hintergrundkarte **Hintergrund.dxf** als DXF-File geladen werden (die Einstellungen *X*, *Y* und *Factor* bleiben unverändert). Zu erkennen ist dann der Verlauf einiger Gewässer und die Lage von Baggerseen im Modellgebiet.

7.3 Wasserbilanz für das Modellgebiet (Untermenü Tools – Water Budget)

Klicken Sie die Option *create water budget of the following stress period/time step* an und wählen Sie *Stress Period 1* und *Time Step 1*

Klicken Sie auf die *OK*-Box. Die Wasserbilanz wird jetzt erstellt und in der Datei *WATERBDG.DAT* abgespeichert. Diese Datei wird auch direkt dargestellt:

Unter *WATER BUDGET OF THE WHOLE MODEL DOMAIN* sind die einzelnen Bilanzterme zu sehen. Die Spalte *IN* zeigt die Flüsse in das Modellgebiet hinein, die Spalte *OUT* die Flüsse aus dem Modellgebiet heraus. Die Einheiten der Flüsse sind diejenigen, die für die Eingabe der Parameter gewählt wurden, im vorliegenden Fall also m^3/s .

Bei einer absolut exakten Lösung der Strömungsgleichungen wäre die Summe *IN* – *OUT* Null, da alles Wasser, das in das Modellgebiet hineinfließt, dort entweder gespeichert wird (nur bei instationärer Berechnung) oder wieder herausfließen muss.

Der Wert im Feld Summe *IN* – *OUT* ist der Bilanzfehler, der durch die iterative Gleichungslösung entsteht (s.o.,). Dieser Bilanzfehler sollte möglichst klein sein, in jedem Fall kleiner als 1 %. Wenn der Bilanzfehler zu hoch ist, muss das Abbruchkriterium für Gleichungslöser (Untermenü *Models – Modflow – Solvers – PCG2*) verringert und die Berechnung wiederholt werden.

8 Bahnlinien (Untermenü Models – PMPATH)

Eine sehr anschauliche Methode zur Darstellung der berechneten Strömungsverhältnisse ist die Erzeugung von Bahnlinien. Dafür sind keine eigenständigen Berechnungen notwendig, sondern es werden die im Rahmen der Strömungsberechnung erzeugten Darcy-Geschwindigkeiten verwendet.

Zur Darstellung von Bahnlinien werden mittels einer speziellen Oberfläche ein oder mehrere virtuelle Partikel im Modellgebiet gesetzt. Das Modell interpoliert dann die Geschwindigkeit an der Startposition aus den an den Zellgrenzen der umgebenden Modellzellen bekannten Geschwindigkeiten. Im nächsten Schritt wird das Partikel entsprechend der interpolierten Geschwindigkeiten u bewegt:

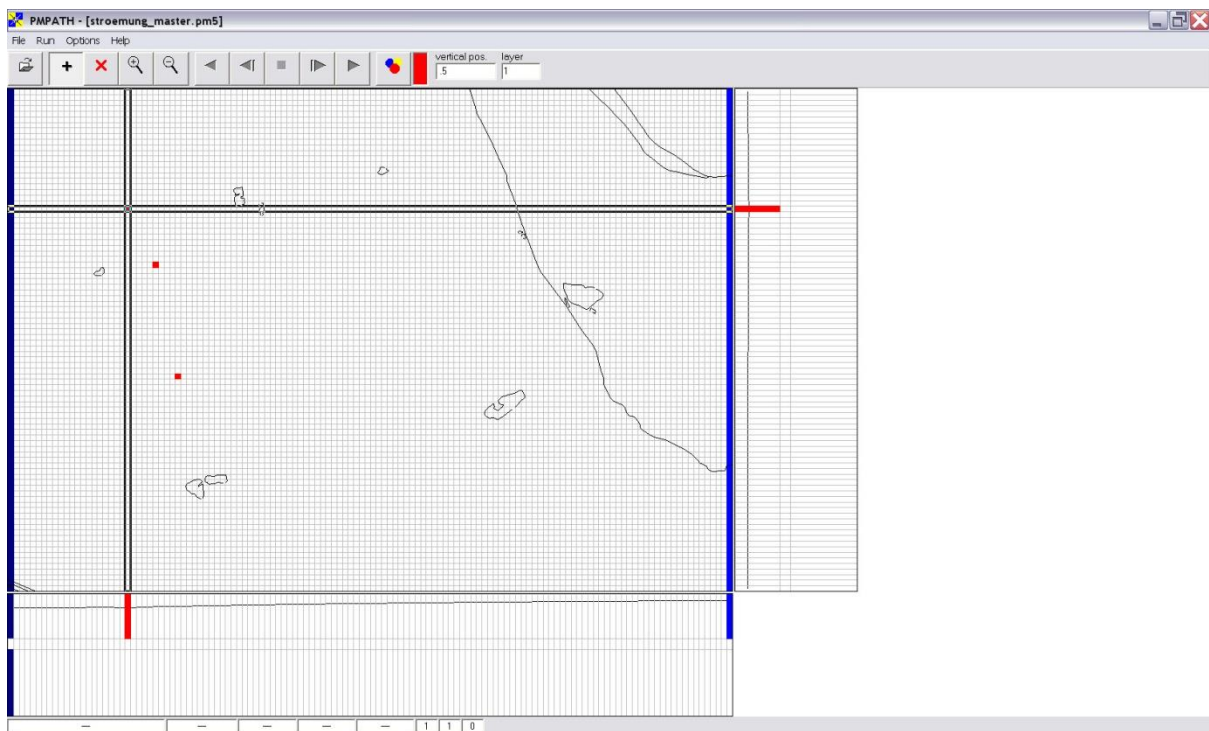
$$\Delta x = u_x \cdot \Delta t$$

$$\Delta y = u_y \cdot \Delta t$$

$$\Delta z = u_z \cdot \Delta t$$

Dabei ist Δt der gewählte Zeitschritt. An der neuen Position wird der Vorgang wiederholt, und zwar solange, bis das Partikel entweder in eine Senke gelangt ist (z.B. Entnahmebrunnen), oder den Modellrand erreicht hat, oder bis die vorgegebene maximale Zeit (Summe über alle Δt) erreicht ist. Die Verbindungslinie aller Start- und Endpunkte ist die Bahnlinie.

Im Untermenü *Models – PMPATH* öffnet sich zunächst eine grafische Eingabefläche:



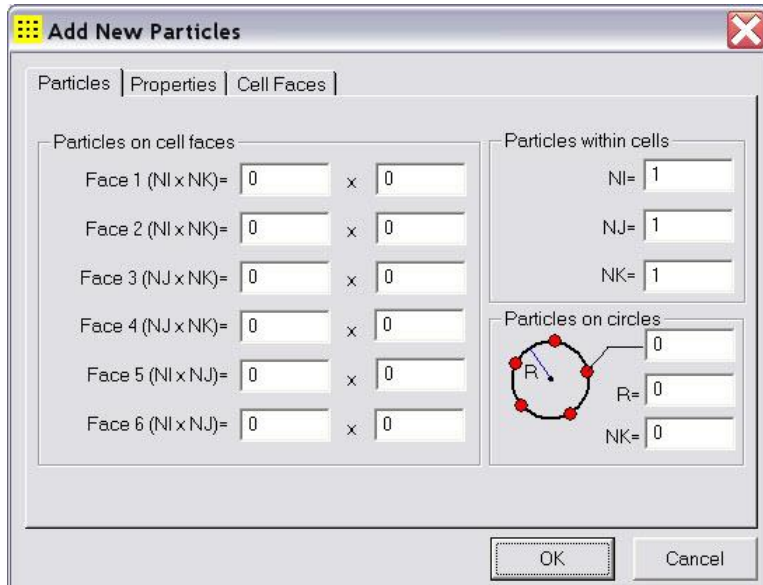
Der Cursor hat die Form eines Fadenkreuzes. Zur Eingabe der Startpositionen von Partikeln muss der INPUT-Modus aktiviert sein.

8.1 Setzen von Partikeln

Zum Setzen der Partikel sind mehrere Methoden möglich. Grundsätzlich können Partikel nur in derjenigen Schicht gesetzt werden, in der man sich gerade befindet.

Einzelpartikel: Bewegen des Cursors an die gewünschte Position – Klicken der rechten Maustaste

Partikel in mehreren Zellen mit vorgegebener Position: Festlegen eines Ausschnitts des Modellgitters durch Aufziehen mit der linken Maustaste. Es erscheint eine Eingabemaske:




Wenn im Feld *Particles within cells* $NI = 1$, $NJ = 1$ und $NK = 1$ vorgegeben wird, wird in jeder Zelle des zuvor aufgezogenen Ausschnitts genau ein Partikel jeweils in die Zellmitte gesetzt.

Partikel auf einem Kreis (geeignet für Brunnen-Zellen): Auswahl einer Modellzelle mit Brunnen durch Aufziehen mit der linken Maustaste. Es erscheint wieder obige Eingabemaske.



Im Feld *Particles on circles* wird festgelegt, wie viele Partikel auf dem Kreis gesetzt werden (z.B. **12**), wie groß der Radius R des Kreises ist (ein sinnvoller Wert für das Übungsbeispiel mit der Zellgröße 100 m x 100 m ist z.B. **40** m), und wie viele Partikel-Kreise in der Zelle übereinander liegen (z.B. $NK = 3$ für drei Kreise).

8.2 Löschen von Partikeln

Einzelne Partikel oder Partikel-Gruppen können durch Drücken des Buttons  gelöscht werden. Dabei muss zuvor die Modellschicht gewählt werden, in der sich das zu löschende Partikel befindet.

Mithilfe der Option *File – Delete All Particels* werden alle Partikel in allen Schichten gelöscht.

8.3 Zoom-Funktionen

Durch Drücken des Buttons  kann ein Ausschnitt des Modellgebiets vergrößert werden, Drücken des Buttons  führt wieder zur Gesamt-Ansicht zurück.

8.4 Bewegen von Partikeln



: Bewegen der Partikel entgegen der Strömungsrichtung bis zum Ende des Gesamt-Zeitraums



: Bewegen der Partikel entgegen der Strömungsrichtung für einen Zeitschritt



: Vorzeitiges Beenden der Partikel-Bewegung




: Bewegen der Partikel mit der Strömungsrichtung für einen Zeitschritt



: Bewegen der Partikel mit der Strömungsrichtung bis zum Ende des Gesamt-Zeitraums

8.5 Farbe der Bahnlinie

Zur Festlegung der Farbe eines Partikels bzw. der entsprechenden Bahnlinie gibt es zwei Möglichkeiten.

1. Drücken des Buttons  und Auswahl der Farbe. Diese Auswahl muss vor dem Setzen de Partikels geschehen sein, eine bereits dargestellte Bahnlinie kann so nicht mehr verändert werden.

2. Unter *Options-Particle Tracking (Time) – Pathline Colors* erscheint ein Fenster, in dem die Farbe einer Bahnlinie in Abhängigkeit der Schicht, in der sie sich befindet, dargestellt werden kann. Diese Möglichkeit muss durch Anklicken des über der Farbauswahl stehenden Kästchens aktiviert werden. Zuvor gewählte Bahnlinienfarben werden überschrieben, und bereits dargestellte Bahnlinien können auch nachträglich verändert werden. Diese Option eignet sich besonders, um die vertikale Position einer Bahnlinie in der Draufsicht zu zeigen.

8.6 Vertikale Position des Startpunkts der Bahnlinie

Auswahl der Schicht durch Eingabe im Feld *layer* oder mithilfe der Tasten Page Up – Page Down. In der Schicht selbst kann die vertikale Position irgendwo zwischen Schichtbasis (*vertical pos.* = **0**) und Schichtoberkante bzw. Wasserspiegel (*vertical pos.* = **1**) gewählt werden. Der Vorgabewert ist die Mitte der Schichte (*vertical pos.* = **.5**)

8.7 Speichern von Bahnliniendarstellungen

Unter *File – Save Plot As...* kann ein Bahnlinienbild als Grafik abgespeichert werden (z.B. im DXF-Format oder im BMP-Format).

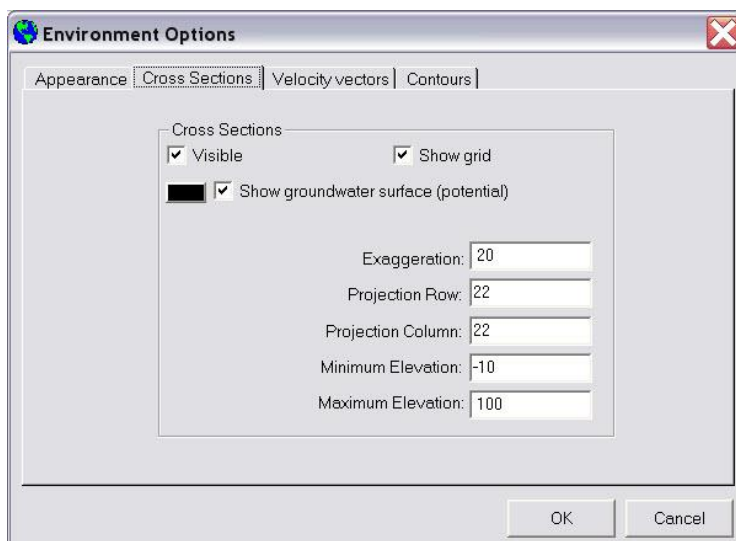
8.8 Speichern von Partikeln

Wenn für unterschiedliche Strömungssituationen immer die gleichen Partikel gesetzt werden sollen, ist es zweckmäßig, die Partikelpositionen zunächst unter *File – Save Particles As...* abzuspeichern. Diese Partikel können dann unter *File – Load Particles* für die neue Strömungssituation wieder geladen werden.

8.9 Darstellung der Bahnlinien

Options – Environment.. – Appearance: Festlegung, welche Parameter in welcher Farbe dargestellt werden.

Options – Environment.. – Cross Sections: Abbildung des vertikalen Verlaufs der Bahnlinien. Es wird das folgende Fenster geöffnet:



Exaggeration: Überhöhungsfaktor der vertikalen Dimension

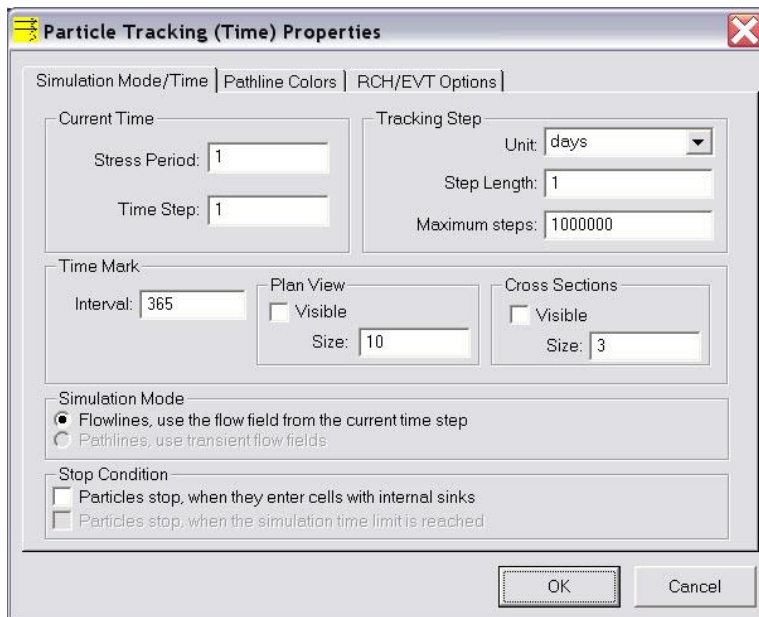
Projection Row: Auswahl der Zeile, die in der unteren Projektion dargestellt wird.

Projection Column: Auswahl der Spalte, die in der rechten Projektion dargestellt wird.

Minimum Elevation bzw. *Maximum Elevation*: Festlegung des vertikalen Ausschnitts in mNN.

8.10 Generelle Steuerung der Bahnlinien

Unter *Options – Particle Tracking (Time)... - Simulation Mode/Time* öffnet sich das folgende Fenster:



Current Time: Auswahl des zeitlichen Abschnitts, für den die Bahnlinie dargestellt werden; nur wichtig für instationäre Berechnungen oder falls der Modellzeitraum in mehrere Abschnitte (*Stress Periods*) unterteilt ist.

Tracking Step: Festlegung des Zeitschritts Δt , mit dem die Partikelbewegung berechnet wird (s.o.). Die gewählte Zeiteinheit (*Unit*, hier Tage) muss nicht mit der Zeiteinheit aus dem Strömungsmodell übereinstimmen. Die zeitliche Schrittlänge (*Step Length*, hier 1 Tag) sollte nicht zu groß gewählt werden, um eine möglichst genaue Darstellung der Bahnlinien zu erhalten. Die maximale Anzahl der Zeitschritte, für die die Partikel bewegt werden (*Maximum Steps*, hier 1000000) legt fest, wann die Bahnliniendarstellung in jedem Fall endet, falls die Bahnlinie nicht bereits vorher das Modellgebiet verlässt. Beispielsweise kann mit der Vorgabe *Maximum Steps* = 50 Tage die Schutzzone 2 eines Brunnen dargestellt werden.

Time Mark: Darstellung von Zeitmarkern entlang der Bahnlinien. Im vorliegenden Fall würde für jeden 365. Zeitschritt, d.h. alle 365 Tage eine Markierung gesetzt, falls diese Option durch anklicken des Kästchen *Visible* aktiviert wird. Aus den Zeitmarkern lässt sich beispielsweise die Verweilzeit eines Wasserpartikels im Modellgebiet ablesen.

Simulation Mode: Auswahl, ob zur Darstellung der Bahnlinien das Strömungsbild eines einzelnen Zeitschritts oder der gesamte zeitliche Verlauf der Strömung herangezogen werden soll (nur relevant bei instationärer Strömung).

Stop Condition: Wenn in einer Modellzelle eine externe Wasserentnahme (Senke bzw. sink) vorhanden ist (z.B. ein Entnahmebrunnen), gibt es hinsichtlich der Strömung über die Zellränder zwei Möglichkeiten:

1. Die Entnahme ist so hoch, dass alle Flüsse über die Zellflächen nach innen gerichtet sind. In diesem Fall spricht man von einer starken Senke, und eine Bahnlinie, die in eine solche Zelle führt, endet dort.
2. Die Entnahme ist geringer als die Zuflüsse in die Zelle, d.h. nicht alles Wasser wird aus der Zelle entnommen, sondern ein Teil wird auch wieder aus der Zelle hinausströmen. In diesem Fall spricht man von einer schwachen Senke.

Das Verhalten einer Bahnlinie, die in eine Zelle mit einer schwachen Senke führt, ist dort nicht eindeutig vorgegeben. Wenn die Option ***Particles stop, when they enter cells with internal sinks*** aktiviert ist, endet die Bahnlinie, sobald sie eine Zelle mit einer Senke erreicht, auch wenn dies nur eine schwache Senke ist. Ist diese Option nicht aktiviert, enden Bahnlinien nur in Zellen mit starken Senken.

Mit der aktivierten Option wird die Bedeutung schwacher Senken, überschätzt, im anderen Fall unterschätzt. Das Auftreten schwacher Senken ist letztlich die Folge einer zu groben Diskretisierung. In der Praxis werden jedoch schwache Senken nicht immer zu vermeiden sein. Um ihre Auswirkungen zu erkennen, können die Bahnlinien einmal mit und einmal ohne die STOP-Option berechnet werden.

Bei der Rückwärtsberechnung von Bahnlinien gilt das zuvor gesagte sinngemäß für starke und schwache Quellen.

8.11 Anwendung der Bahnlinienberechnung

Stellen Sie die Einzugsgebiete der sechs Brunnen dar. Wie wirkt sich die Entnahme im zweiten Stockwerk aus?

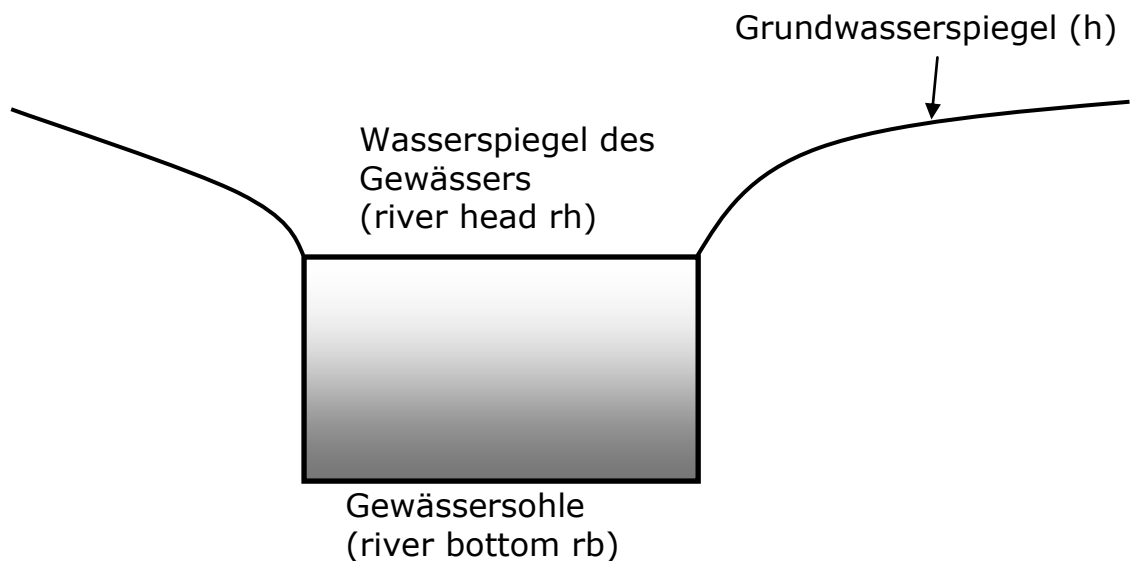
9 Berücksichtigung eines Oberflächengewässers

Zur Simulation der Grundwasseranbindung an ein Oberflächengewässer stehen in MODFLOW mehrere Möglichkeiten zur Verfügung. Im Folgenden soll das RIVER-Package vorgestellt werden.

9.1 Anbindung des Gewässers

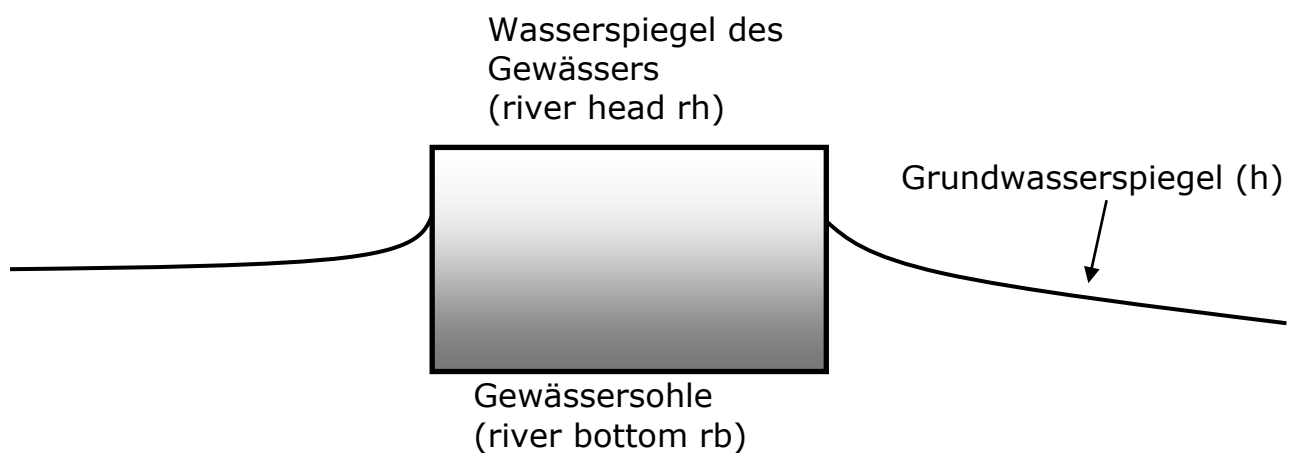
Bezüglich des Verhältnisses zwischen Grundwasserspiegel und Wasserspiegel im Oberflächengewässer sind drei Situationen zu unterscheiden.

Situation 1 (exfiltrierend):



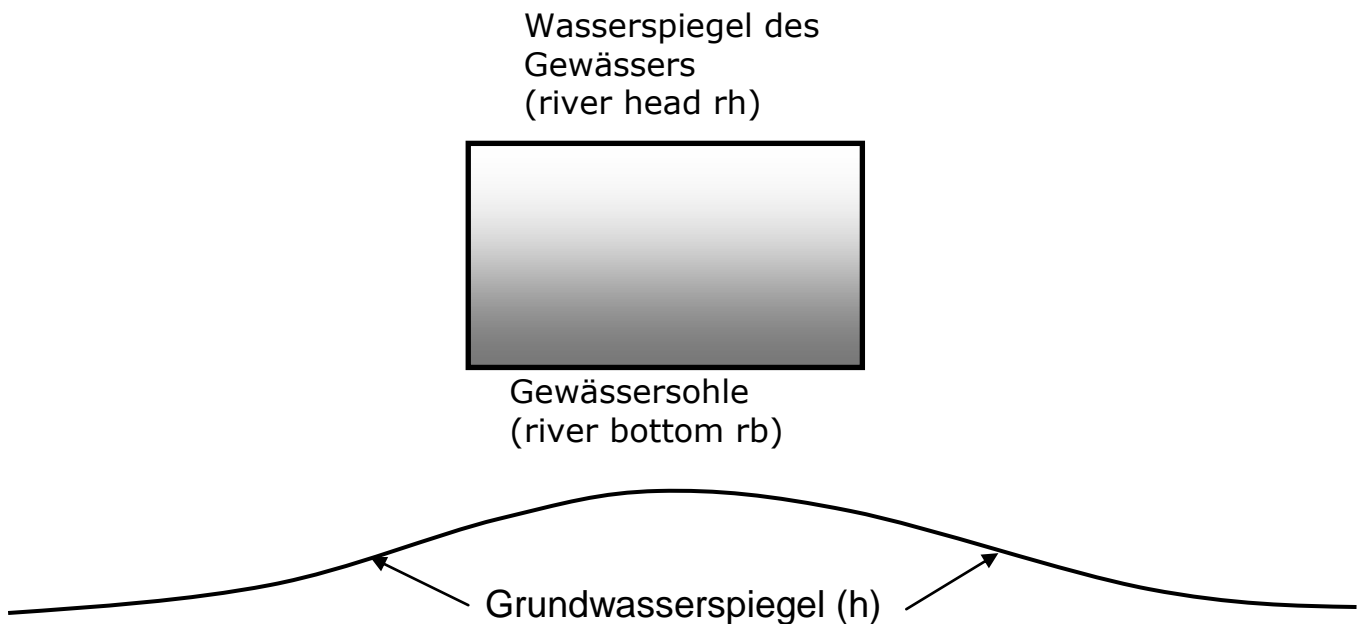
Treibender Gradient des Wasseraustauschs: $(rh - h)$

Situation 2 (infiltrierend):



Treibender Gradient des Wasseraustauschs: $(rh - h)$


Situation 3 (infiltrierend):



Treibender Gradient des Wasseraustauschs: $(rh - rb)$

9.2 Fortsetzung der Übungsaufgabe: Implementierung eines Oberflächengewässers

Zur Eingabe eines Oberflächengewässers mit dem RIVER-Package stehen in PMWIN zwei Eingabemöglichkeiten zur Verfügung, nämlich der Cell-by-Cell-Modus und der Polyline-Modus. Für die Übung soll letztere Möglichkeit gewählt werden.

- Die Eingabe erfolgt im Untermenü *Models – Modflow – Flow Packages – River*.
- Durch Anklicken des Polyline-Buttons  wird der Polyline-Modus aktiviert (Default ist der Cell-by-Cell Modus).
- Berücksichtigt werden soll das Gewässer, das das Modellgebiet im östlichen Teil von Südosten aus in nordnordwestlicher Richtung durchströmt.
- Fahren Sie den Verlauf durch Klicken mit der linken Maustaste nach. Schließen Sie die Eingabe durch einen **Doppel-Klick** ab. Verwenden Sie zwischen 10 und 30 Punkte.
- Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf den nördlichsten Punkt des Gewässers. Es öffnet sich folgendes Eingabefenster:

River Parameters

Layer Option (apply to the selected polyline)
Assign layer number automatically

Parameters (apply to the selected vertex)

Active

Hydraulic Conductivity of Riverbed [L/T]: .000001

Head in the River [L]: 98

Elevation of the Riverbed Bottom [L]: 97

Width of the River [L]: 5

Thickness of Riverbed [L]: 1

Parameter Number [-]: 0

Layer Number [-]: 1

- Übernehmen Sie die Eingabewerte aus obiger Abbildung. Der Leakage-Koeffizient L wird modellintern aus der *Hydraulic Conductivity of the Riverbed* (K_{fR}) und der *Thickness of the Riverbed* (d_R) berechnet:

$$L = \frac{k_{fR}}{d_R}$$

Mit *Width of the River* wird der Anteil der Austauschwirksamen Fläche an der gesamten Zellfläche berechnet.

- Klicken Sie dann mit der rechten Maustaste auf den südlichsten Punkt des Gewässers und übernehmen Sie die folgenden Eingabewerte:

River Parameters

Layer Option (apply to the selected polyline)
Assign layer number automatically

Parameters (apply to the selected vertex)

Active

Hydraulic Conductivity of Riverbed [L/T]: .000001

Head in the River [L]: 110

Elevation of the Riverbed Bottom [L]: 109

Width of the River [L]: 5

Thickness of Riverbed [L]: 1

Parameter Number [-]: 0

Layer Number [-]: 1

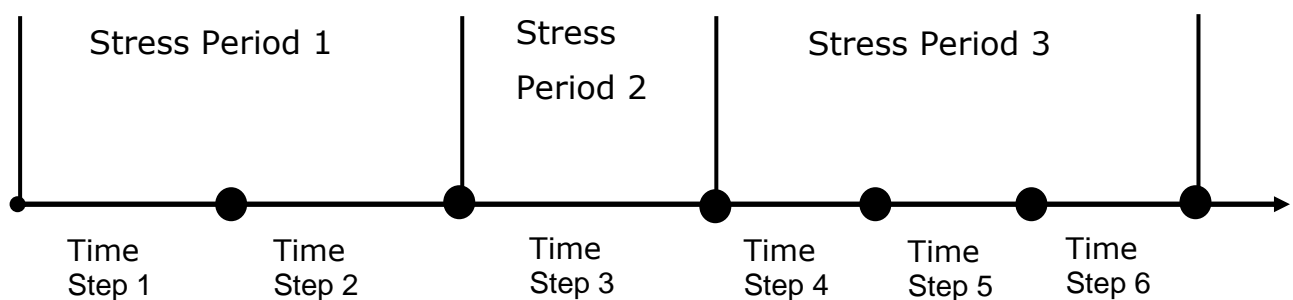
- Die anderen Punkte des Gewässers sollen nicht angeklickt werden. Sie dienen im Übungsbeispiel lediglich dazu, den Verlauf des Gewässers festzulegen. PMWIN interpoliert jetzt automatisch zwischen den Werten, die in den beiden aktivierten Punkten eingegeben wurden.
- Schließen Sie die Eingabe ab und führen Sie eine erneute Berechnung der Grundwasserströmung durch. Wie wirkt sich das Gewässer auf die Strömung aus. Wie hoch ist der Wasseraustausch und in welche Richtung verläuft er?

Das RIVER-Package erlaubt lediglich eine stark vereinfachte Berücksichtigung eines Oberflächengewässers. Der Abfluss im Gewässer selbst wird nicht simuliert, und so wird beispielsweise auch nicht überprüft, ob der Abfluss im Oberflächengewässer überhaupt die mit dem Modell errechnete Infiltration in das Grundwasser erlaubt. Für eine detailliertere Berücksichtigung muss das STREAMFLOW-Package verwendet werden.

10 Zeitabhängige Strömung

Die zeitliche Grundeinheit in MODFLOW ist der Zeitschritt (**Time Step**). Zusätzlich kann der Simulationszeitraum noch in **Stress Periods** unterteilt werden. Innerhalb einer Stress Period sind die hydrologischen Randbedingungen (z.B. Pumpraten) konstant. Zwischen den Stress Periods jedoch können alle hydrologischen Randbedingungen verändert werden.

Eine Unterteilung des Simulationszeitraums in Stress Periods ist sowohl für die stationäre als auch für die instationäre Strömung möglich. Den Zusammenhang zwischen Time Step und Stress Period verdeutlicht die nachfolgende Abbildung.

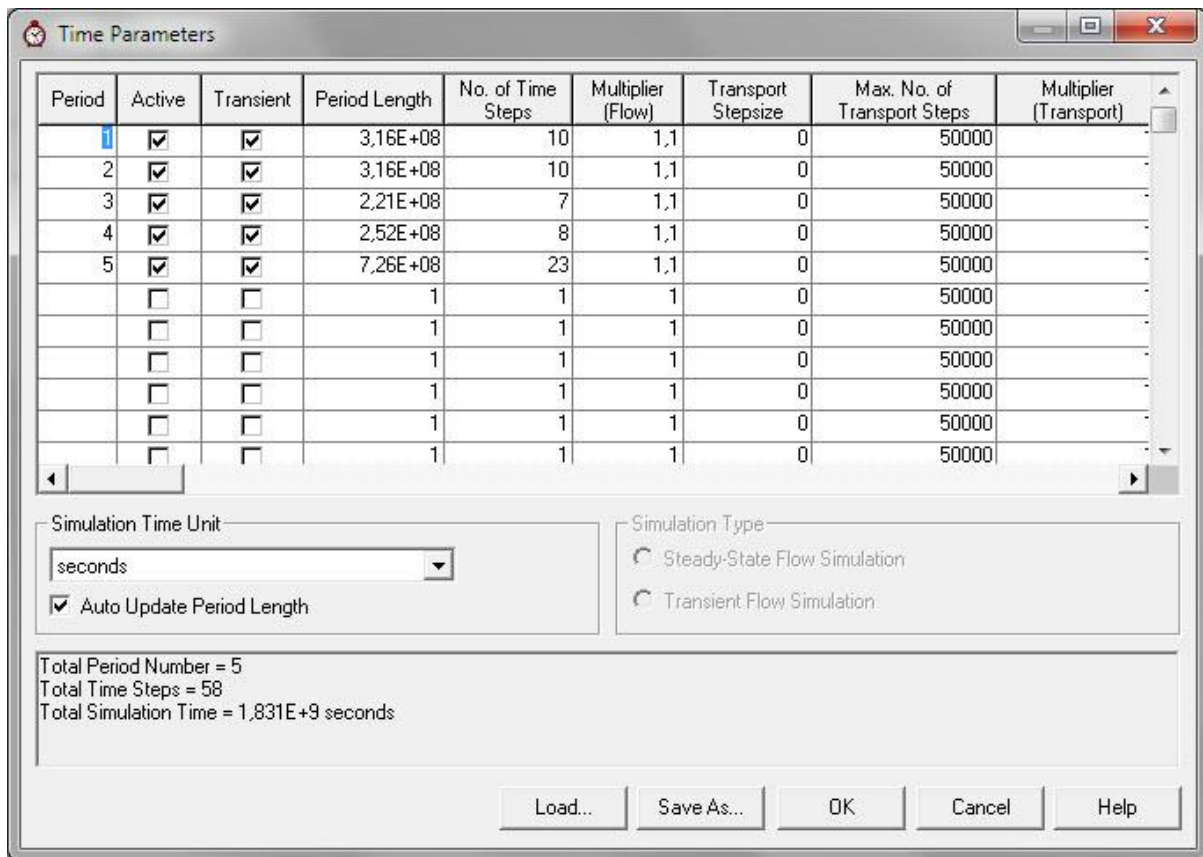


10.1 Fortsetzung der Übungsaufgabe: Instationäre Strömung


Zur Simulation eines variablen Brunnenbetriebs soll die Strömung instationär von 1961 – 2018 (58 Jahre) berechnet werden. Der Brunnenbetrieb für diesen Zeitraum ist in der folgenden Tabelle aufgeführt. In der ersten Periode wird die natürliche Strömungssituation vor Beginn des Pumpbetriebs simuliert.

Zeitraum	Dauer		Förderrate [m^3/s]					
	Jahre	Sekunden	FB1	FB2	FB3	TB1	TB2	TB3
1961 - 1970	10	3.16e8	0	0	0	0	0	0
1971 - 1980	10	3.16e8	-0.03	-0.02	0	0	0	0
1981 - 1987	7	2.21e8	-0.04	-0.03	-0.02	-0.01	-0.02	0
1988 - 1995	8	2.25e8	-0.06	-0.05	-0.05	-0.03	-0.05	-0.04
1996 - 2018	23	7.26e8	-0.06	-0.03	-0.04	-0.025	-0.04	-0.025

Zunächst ist der Simulationszeitraum vorzugeben. Dies geschieht im Untermenü *Parameters – Time*. Dort öffnet sich das folgende Eingabefenster:



Bitte übernehmen Sie die oben abgebildete Einteilung in fünf Perioden.

- Die Strömung wird instationär berechnet (**Transient**). Der Wert **1.1** für den *Multiplier (Flow)* bedeutet, dass die zeitliche Schrittweite innerhalb einer Periode nicht konstant ist, sondern pro Zeitschritt um 10% zunimmt. Damit wird der Umstand berücksichtigt, dass sich die Wasserstände bei einer Änderung der Strömungsbedingungen (z.B. Pumpbeginn) zunächst sehr stark und dann immer weniger stark ändern.
- Die instationäre Strömungssimulation verlangt außerdem die Vorgabe der Speicherkoeffizienten. Der Speicherkoeffizient im gespannten Fall wird im Untermenü *Parameters – Specific Storage* eingegeben. Es soll ein einheitlicher Wert von 10^{-5} 1/m für den gesamten Aquifer gewählt werden (über *Value – Reset Matrix...*). Der Speicherkoeffizient für Modellzellen mit freier Grundwasser Oberfläche wird im Untermenü *Parameters – Specific Yield* eingegeben. Hier soll ein einheitlicher Wert von **0.2** für das gesamte Modellgebiet gewählt werden.
- Schließlich ist noch der zeitliche Verlauf der Wasserförderung im Untermenü *Models – MODFLOW – Flow Packages – Well* einzugeben. Beim Öffnen des Untermenüs befindet man sich automatisch in der Periode 1. Die Förderraten für die Perioden 2, 3, 4 und 5 werden eingegeben, in dem man den Button  drückt und die entsprechende Periode auswählt.
- Nach Eingabe der Förderraten verlassen Sie bitte das Untermenü und berechnen die Strömung neu. Stellen Sie zunächst die Piezometerhöhenverteilung

für den Modellzeitraum im Untermenü *Tools – 2D Visualization – MODFLOW – Hydraulic Head* dar.

- Im Untermenü *Models – MODFLOW – View – Head-Time Curves – Charts* kann der zeitliche Verlauf der Grundwasserstände für die 6 Brunnen betrachtet werden. Welche Ursache hat der Wasserspiegelanstieg in den ersten Jahren des Modellzeitraums?

11 Modellaufbau und Stratigraphie

11.1 Rastermodell vs. schichtorientiertes Modell

Bei der Nachbildung des hydrostratigrafischen Untergrundaufbaus im Modell, d.h. bei der Umsetzung der hydrogeologischen bzw. hydrostratigrafischen Einheiten in Modellzellen, können zwei grundsätzlich unterschiedliche Strategien verfolgt werden.

Im ersten Fall wird die vertikale Aquifergeometrie, genau wie die horizontale, in einem gleichmäßigen Rechteckgitter aufgelöst, d.h. alle Zellen einer Modellschicht weisen die gleichen Werte für die Ober- und Unterkanten (**Rastermodell**) auf.

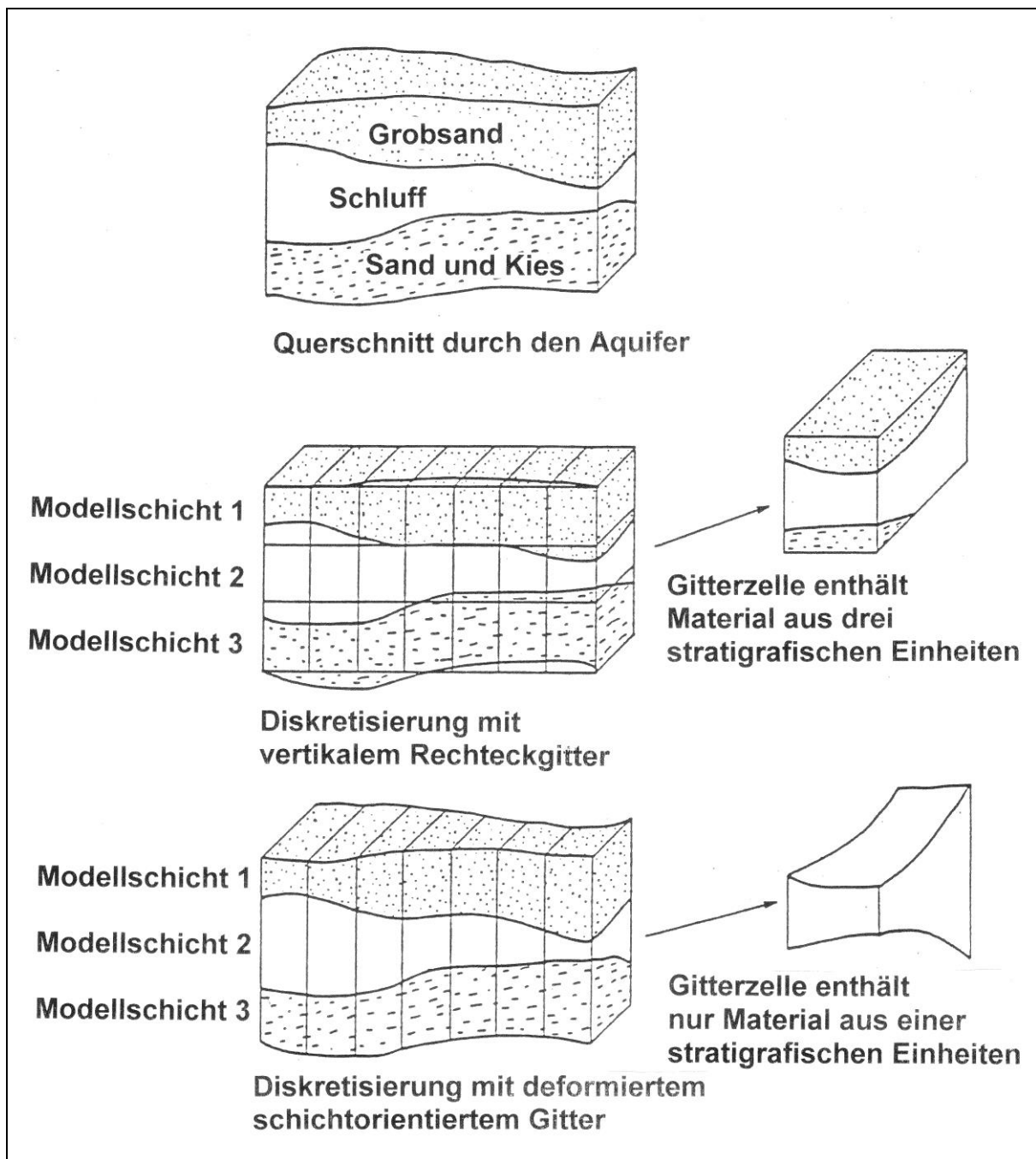
Im zweiten Fall orientiert sich die vertikale Modellgeometrie an den hydrostratigrafischen Einheiten (z.B. Layer 1 entspricht dem Oberen Grundwasserleiter, Layer 2 dem Oberen Zwischenhorizont usw.). Die Werte der Ober- und Unterkanten einer Modellschicht können dann von Zelle zu Zelle variieren (**schichtorientiertes Modell**).

Der Vorteil des ersten Verfahrens liegt darin, dass ein solches Gitter genau den Anforderungen des Finite-Differenzen-Verfahren entspricht, die Zuordnung von Parameter-Werten zu Modellzellen und die Ergebnis-Darstellung kann jedoch relativ aufwändig sein (für jede Modellzelle muss eine Verknüpfung zu den berücksichtigten hydrostratigrafischen Einheiten erstellt werden).

Im zweiten Verfahren ist die Zuordnung einfach, denn jede Modellschicht repräsentiert ja genau eine hydrostratigrafische Einheit. Außerdem wird das Modellgitter im Falle stark geneigter Schichten meist deutlich kleiner als im ersten Fall. Der Nachteil ist, dass hier ein deformiertes Gitter entsteht, welches zu numerischen Genauigkeitsproblemen führen kann.

Zwischen den beiden zuvor genannten Ansätzen sind auch Übergangsformen möglich. Beispielsweise kann bei der Anwendung eines schichtorientierten Ansatzes eine hydrostratigrafische Einheit nicht nur durch eine, sondern durch mehrere Modellschichten repräsentiert werden.

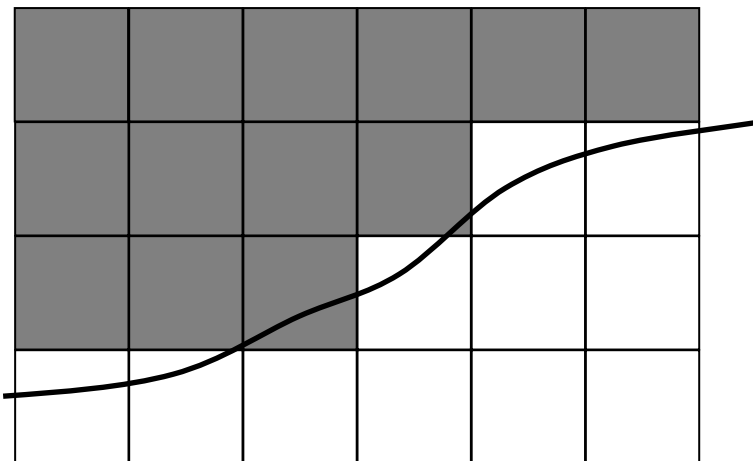
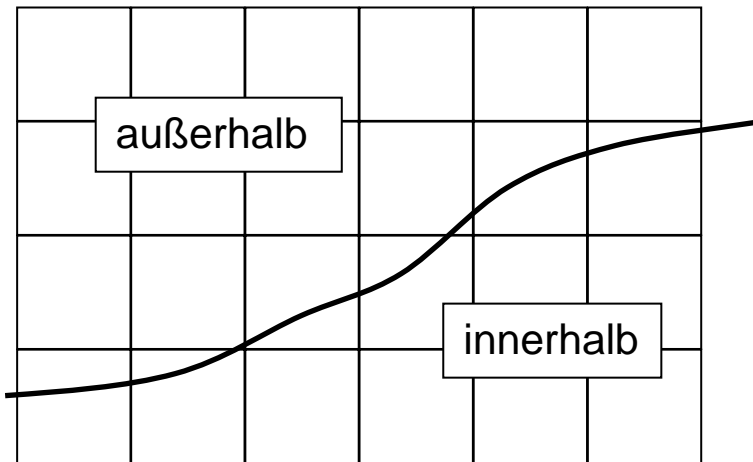
Die beiden unterschiedlichen Strategien zum Modellaufbau sind in der folgenden Abbildung nochmals grafisch erläutert.





11.2 Aquifergeometrie und Rechteckgitter

In der horizontalen Dimension sind alle Modellzellen und damit das Finite-Differenzen-Gitter insgesamt immer rechteckig. Um eine beliebige horizontale Aquifergeometrie nachzubilden zu können, müssen Modellzellen inaktiv gesetzt werden. Dies geschieht mithilfe der Knotenkennung (Node-ID) im Untermenü *Grid - Cell Status - IBOUND (MODFLOW)*.

Die Knotenkennung 0 sagt dem Gleichungslöser, dass die entsprechende Zelle nicht zum Modellgebiet gehört und daher bei der Berechnung nicht zu berücksichtigen ist. Die Modellzelle ist damit für die Strömung undurchlässig. Die Vorgehensweise ist in den nächsten Abbildungen veranschaulicht.



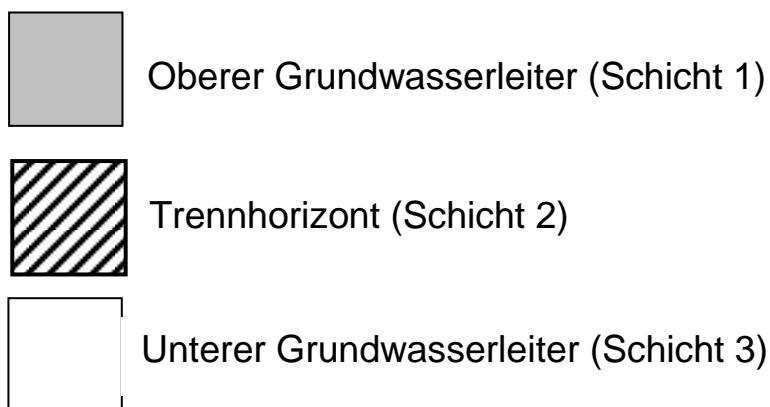
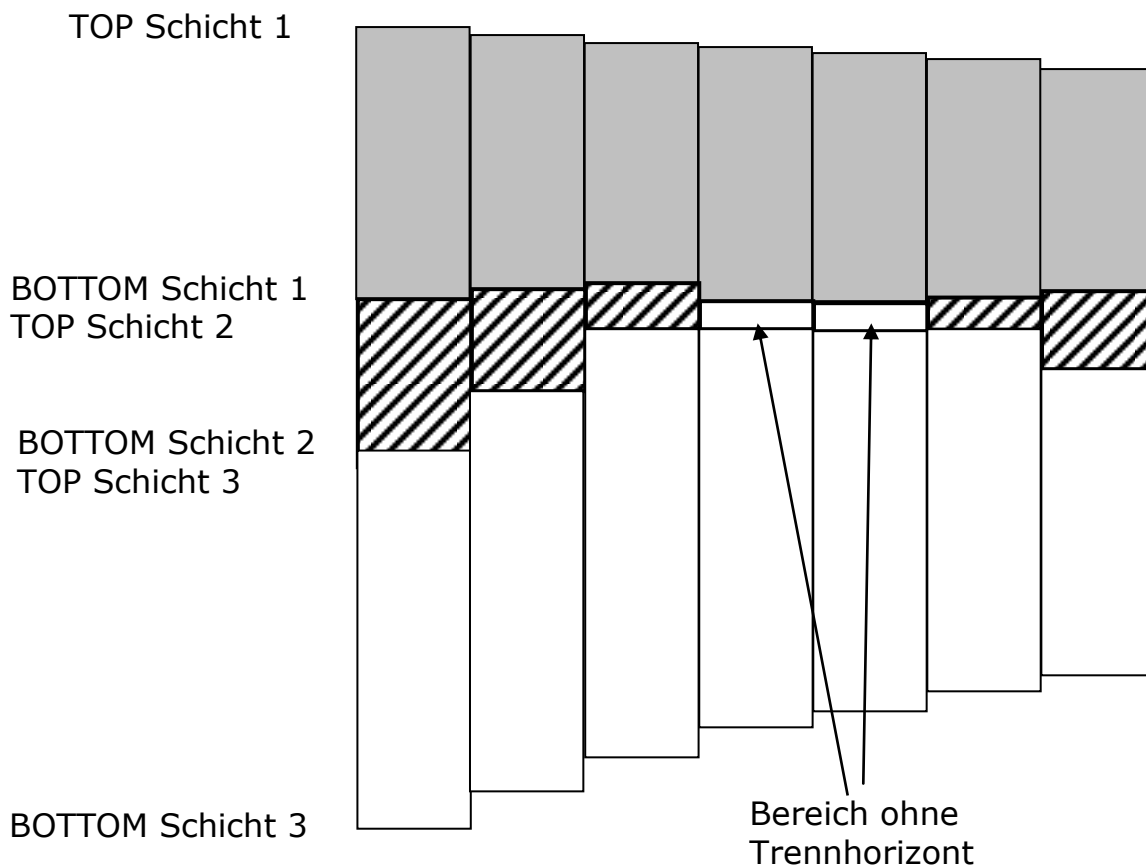
 Inaktive Zelle
(Node-ID = 0)

 Aktive Zelle
(Node-ID = 1)

11.3 Behandlung von Schichtlücken

Im Finite-Differenzen-Gitter muss jeder Layer die gleiche Gesamt-Ausdehnung aufweisen. D.h. wenn eine stratigrafische Einheit nicht über das gesamte Modellgebiet ausgedehnt ist oder Lücken aufweist, muss die Modellschicht (Layer), die diese Einheit repräsentiert, dennoch durchgängig sein. An den Fehlstellen und Lücken ist die entsprechende Schicht durch Parameterwerte der hangenden oder liegenden Schichten aufzufüllen. Dies wird in der folgenden Abbildung für eine Schichtlücke in einem Trennhorizont (hydraulische Fenster) verdeutlicht:

Vertikaler Schnitt durch den Untergrund:



12 Inverse Modellierung und automatische Kalibrierung

Bei der **Standard-Modellierung** werden die Aquiferparameter wie Transmissivität oder Grundwasserneubildung und die Randbedingungen als bekannt vorausgesetzt und die zugehörige Piezometerhöhenverteilung berechnet

Die Kenntnis der Aquiferparameter ist jedoch immer lückenhaft, da die Erkundung punktuell oder lokal erfolgt und teuer ist. Es verbleibt also immer eine Unsicherheit hinsichtlich der Verteilung der Aquiferparameter.

In den meisten Fällen ist sogar mehr Information über die Piezometerhöhen (die „Unbekannten“ im Standard-Modell) als über die Aquiferparameter (also die „bekannten“ Größen im Modell) vorhanden.

Bei der **inversen Modellierung** wird dies ausgenutzt. Die Variablen sind dann ein oder mehrere Aquiferparameter, die so lange systematisch variiert werden, bis die Differenz zwischen simulierten und gemessenen Höhen an den Messstellen minimal ist.

Die Variation der Aquiferparameter zur Anpassung der simulierten an die gemessenen Höhen entspricht der Modelleichung. Die inverse Modellierung kann, in Analogie zur manuellen Eichung (trial-and-error), zur **automatischen Kalibrierung** eines Strömungsmodells verwendet werden.

12.1 Prinzip der inversen Modellierung

Die Differenz zwischen simulierten und gemessenen Höhen im Modellgebiet kann durch die sogenannte χ^2 -Funktion ausgedrückt werden:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{h_i^g - h_i^b}{\sigma_i} \right)^2$$

mit N = Anzahl der vorhandenen Messstellen

h_i^g = gemessene Piezometerhöhe an der Messstelle i [L]

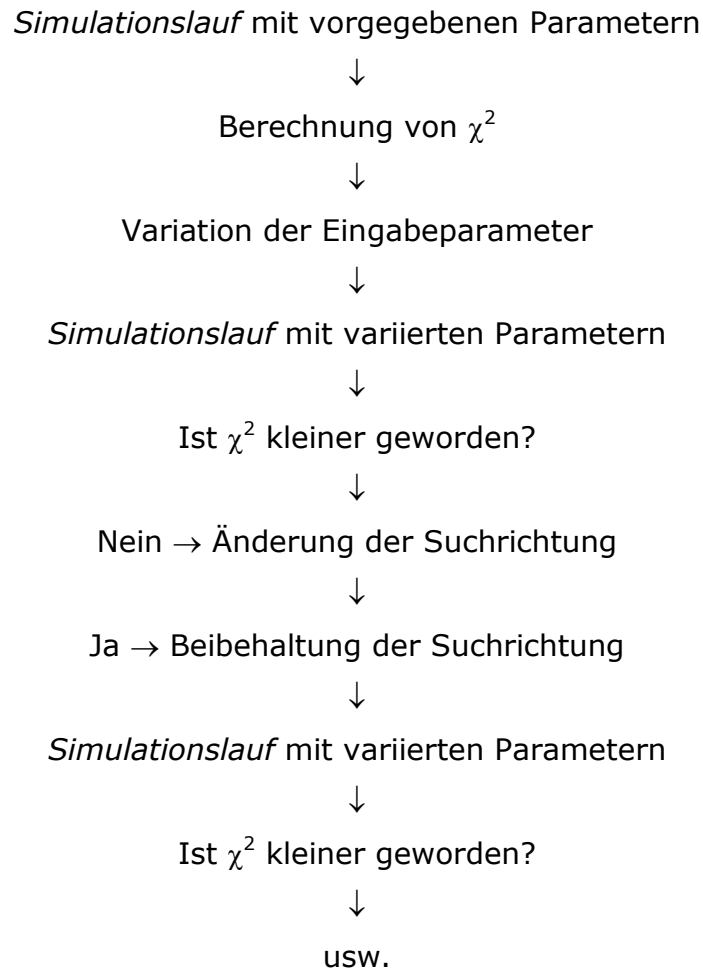
h_i^b = berechnete Piezometerhöhe an der Messstelle i [L]

σ_i = Standardabweichung der Messung in Messstelle i (Messfehler) [L]

Die berechnete Piezometerhöhe h_i^b ist eine Funktion der Aquiferparameter (z. B. der Transmissivität).

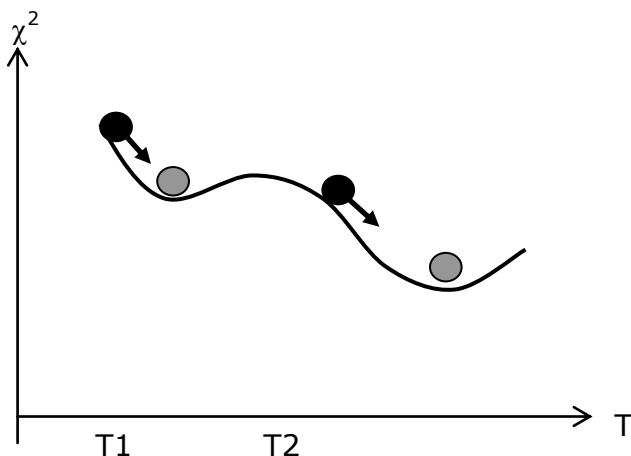
Die Eichung ist dann optimal, wenn χ^2 minimal ist. Die automatische Eichung mit Hilfe der inversen Modellierung ist daher ein Minimierungsproblem.

Im MODFLOW wird ein spezielles Verfahren zur Minimierung von χ^2 verwendet. Man muss dabei für die zu variierenden Parameter einen Startwert vorgeben, von dem aus die Parameter mit Hilfe eines Algorithmus so lange variiert werden, bis ein Minimum im n-dimensionalen Parameterraum gefunden ist. Die inverse Modellierung läuft nach folgendem Schema ab:



Die Optimierung ist abgeschlossen, wenn χ^2 nicht mehr verringert werden kann

Ein großes Problem bei allen Suchverfahren ist, dass das gefundene Minimum nicht unbedingt das gewünschte globale Minimum darstellt, sondern möglicherweise nur ein lokales Minimum. Dies bedeutet, dass das gefundene Minimum von den Startwerten der Parameter abhängen kann. Im Zweifelsfall muss man daher die inverse Modellierung mit unterschiedlichen Startwerten wiederholen, um das globale Minimum zu finden. Mit Hilfe der folgenden Skizze soll dies verdeutlicht werden:



Angepasst werden können folgende Aquiferparameter:

- Transmissivitäten bzw. Durchlässigkeitsbeiwerte
- Randzuflüsse
- Grundwasserneubildung
- Leakage-Flüsse

Wie im Kapitel über die Nichteindeutigkeit der Eichung noch erklärt werden wird, ist es nicht sinnvoll, gleichzeitig die Transmissivitäten bzw. k_f -Werte **und** die Flüsse anzupassen.

Bei der inversen Modellierung werden die anzupassenden Parameter in Zonen zusammengefasst, innerhalb derer die Parameter den gleichen Wert haben. Will man z. B. die Durchlässigkeit anpassen, muss man im Menü *Parameters - Hydraulic Conductivity* die Zonen mithilfe der *Parameter Number* festlegen (Alle Zellen mit derselben *Parameter Number* gehören zu einer Zone). Die Anzahl der Zonen sollte 10 nicht überschreiten, da sonst der Rechenaufwand für die inverse Modellierung zu groß wird.

12.2 Nichteindeutigkeit der Strömungskalibrierung

Wenn in einem Modellgebiet sowohl die Transmissivitäten als auch die Flüsse durch Grundwasserneubildung oder durch Randzuflüsse unbekannt oder mit großen Unsicherheiten behaftet sind, ist keine eindeutige Interpretation der gemessenen Piezometerhöhen möglich. Dies bedeutet, dass es z. B. unterschiedliche Kombinationen von Transmissivitäten und Randzuflüssen gibt, die zur gleichen Piezometerhöhenverteilung führen. Das folgende eindimensionale Beispiel soll dies verdeutlichen.

Im gespannten eindimensionalen Aquifer ergibt sich eine einfache Strömungsgleichung:

$$q = -k_f \frac{\Delta h}{\Delta x} = -k_f \frac{h_2 - h_1}{x_2 - x_1} = -k_f I$$

Der Piezometerhöhen h_1 und h_2 an den Stellen x_1 und x_2 und damit I seien bekannt. Obige Gleichung kann dann umgeformt werden zu:

$$I = -\frac{q}{k_f}$$

Das gleiche bekannte Gefälle I kann z. B. mit einem kleinen Fluss q und einer kleinen Durchlässigkeit k_f oder mit großem q und großem k_f erreicht werden. Während die Piezometerhöhenverteilung in beiden Fällen gleich ist, ändern sich der Fluss und damit die Strömungsgeschwindigkeit erheblich.

Ein Reduzierung der Vieldeutigkeit einer Modelleichung ist möglich wenn:

- die Durchlässigkeiten bzw. Transmissivitäten sehr genau bekannt sind
- zuverlässige Daten zur Grundwasserneubildung vorhanden sind
- im Modellgebiet starke Entnahmen vorhanden sind, die die Flüsse festlegen

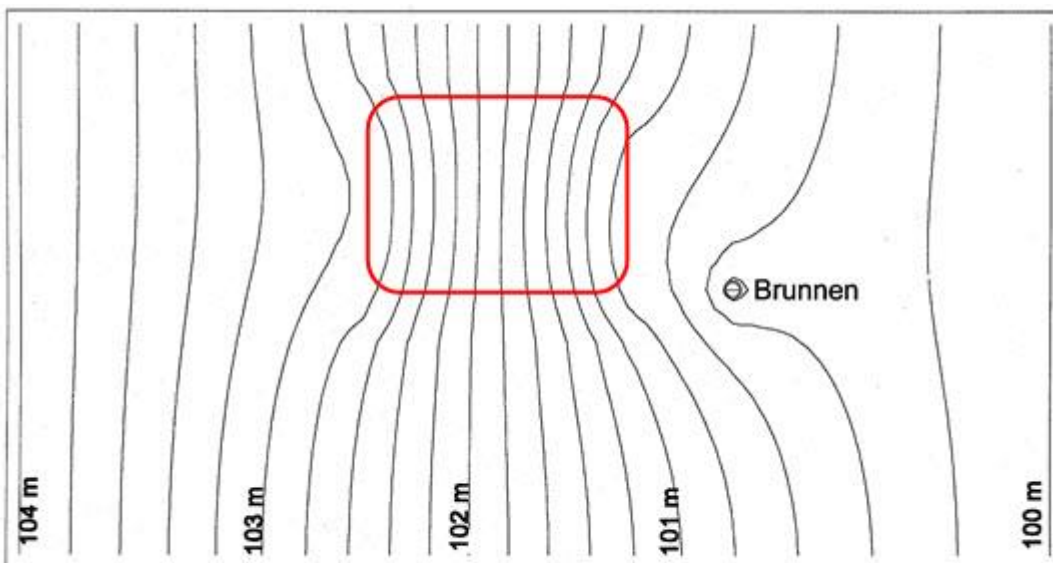
Da sowohl eine Variation der Flüsse als auch der Transmissivitäten zu der gleichen Piezometerhöhenverteilung führen kann ist es nicht sinnvoll, bei der inversen Modellierung beide Parameter gleichzeitig zu variieren.

Übungsaufgabe 1 zur Strömungsmodellierung im Grundwasser

Berechnen Sie die stationäre zweidimensionale Grundwasserströmung für folgende Aquiferparameter:

- Gespannte Grundwasseroberfläche
- Isotrope Durchlässigkeitsverteilung
- Ausdehnung des Modellgebiets in x-Richtung: 400 m
- Ausdehnung des Modellgebiets in y-Richtung: 210 m
- Oberkante des Modellgebiets: 110 mNN
- Unterkante des Modellgebiets: 80 mNN
- Ein Entnahmebrunnen mit $Q = -0.03 \text{ m}^3/\text{s}$
- Eine Zone (rotes Rechteck) mit reduzierter Durchlässigkeit
- Festpotential am linken und rechten Rand des Gebiets mit $h_1=104 \text{ m}$, $h_2=100 \text{ m}$ (Gefälle $I = 0.001$)
- Effektive Porosität: 0,25
- Keine Grundwasserneubildung

1. Bestimmen Sie die Durchlässigkeiten der beiden Aquiferbereiche durch ausprobieren so, dass sich folgende Verteilung der Piezometerhöhen ergibt:



Datei: AUFGABE1.1 Stationäre Piezometerhöhenverteilung
h-Min = 100 m, h-Max = 104 m, Delta-h = .2 m, M 1 : 16666

2. Stellen Sie das Einzugsgebiet des Brunnens graphisch mit Hilfe von Bahnlinien dar. Beschreiben Sie qualitativ den Einfluss der geringer durchlässigen Zone auf das Einzugsgebiet

Übungsaufgabe 2 zur Strömungsmodellierung im Grundwasser

Für den unten abgebildeten Ausschnitt aus einem Aquifer soll ein Strömungsmodell aufgebaut werden.

Die Grundwasseroberfläche ist frei, die Höhenangaben sind in Meter ü. NN. Die Durchlässigkeit beträgt einheitlich 10^{-3} m/s. Die Grundwasser-Neubildungsrate ist mit 200 mm/a bzw. 6.3×10^{-9} m/s anzusetzen. Die Aquiferbasis liegt bei 0 m ü. NN, die Geländeoberfläche bei 22 mNN. Der Fluss ist 50 m breit, sein Wasserspiegel beträgt überall 18 m ü. NN, und die Flusssohle liegt bei 15 m ü. NN.

- Der Leakage-Koeffizient für den Fluss ist so anzupassen, dass der dargestellte Verlauf der Piezometerhöhen nachgebildet werden kann.
- Stellen Sie die Wasserbilanz für das Modellgebiet dar.
- Alles Wasser, was den Bereich der Altablagerung durchströmt, ist schadstoffbelastet. Wird belastetes Wasser in den Fluss gelangen?
- Zur Sicherung der Altablagerung soll ein hydraulisches Sanierungsschema so installiert werden, dass kein Wasser aus dem belasteten Bereich mehr abströmen kann. Es soll keine Netto-Wasserentnahme stattfinden, d.h. alles entnommene Wasser muss auch wieder infiltriert werden. Platzieren Sie die Brunnen so, dass die Entnahmerate möglichst gering ist.

