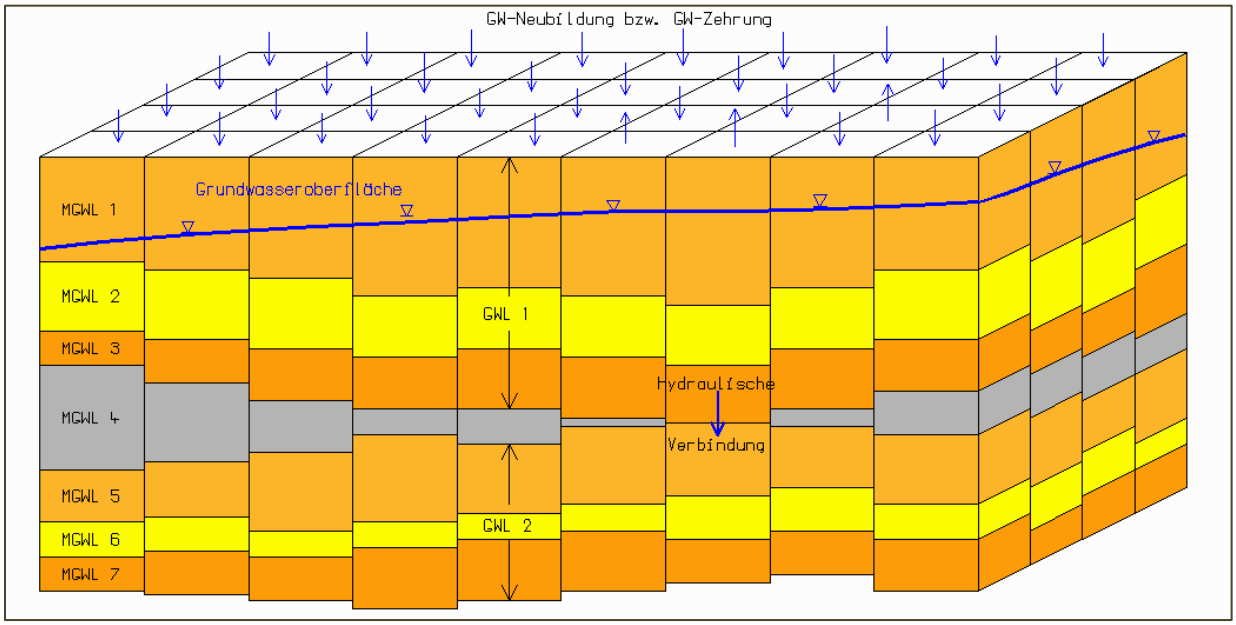
PCGEOFIM-Anwenderdokumentation

Geofim-Datenbasis

Version 2023

Letzte Änderung: 13.05.2026

D. Sames, R. Blankenburg, F. Brückner, M. Müller



Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 5

2 Geofim-Steuerdatei 8

2.1 Allgemeine Vorgaben zur Lösung des Strömungsproblems 12
2.2 Allgemeine Vorgaben zur Lösung des Transportproblems 15
2.3 Allgemeine Vorgaben für die Parameteridentifikation 16

3 Das Parametermodell 17

3.1 Die Parameterdatei 17
3.2 Parameterdatei in der erweiterten Struktur 21
3.3 Zeitabhängige Parameter und Störungen 25
3.4 Lupen 27
3.5 Konvertierung Modell mit maximal 31 Lupen in Modell mit maximal 99 Lupen 30
3.6 Konvertierung Modell mit maximal 99 Lupen in das erweiterte Parametermodell 33
3.7 Lokale Netzverfeinerung 34
3.8 Felddatensätze 36

4 Das Signalmodell 39

4.1 Kodierung von Randstamm- und Randbewegungsdaten 39
4.2 Ungekoppelte Randbedingungen 45
4.3 Gekoppelte Randbedingungen 3. Art 48
4.3.1 Vertikal- und Horizontalfilterbrunnen, Brunnenriegel 48
4.3.2 Standgewässer 49
4.3.3 Fließgewässer 51
4.4 Vorgabe von Füllkurven der Standgewässer 53
4.5 Vorgabe der Abflusskurven für Fließgewässer 55
4.6 Vorgabe von Kopplungen zwischen Gewässern 56
4.7 Definition von Brunnen- und Randbedingungsgruppen 60
4.8 Kopplung Randbedingungsgruppe an Fließgewässerabschnitt 61
4.9 Vorgabe von Kopplungen zwischen Entnahme- und Infiltrationsbrunnen 62
4.10 Vorgabe der Grundwasserneubildung 63
4.10.1 Flurabstandsabhängige Grundwasserneubildung 63
4.10.2 Zeit- und flurabstandsabhängige Neubildung 68
4.10.3 Vorgabe von Klimadaten 72

5 Vorgabe von Transportparametern 75

5.1 Diffusion 76
5.2 Dispersivität 76
5.3 Retardationsfaktor 77
5.4 Abbaukoeffizient 77
5.5 Isotherme 80
5.6 Gebietsbegrenzung für die Transportmodellierung 83
5.7 Vorgabe von Anfangsdichteverteilungen 85

6 Vorgabe von Schutzzonen und Stromlinien 86
6.1 Schutzzonen 86
6.2 Strom- und Bahnlinien 86
7 Spezielle Daten zur Visualisierung 88
7.1 Brunnenstandorte 88
7.2 Messstellendaten 89
7.2.1 Vorgabe von Messstellen 89
7.2.2 Vorgabe von Messwerten 92
8 Daten zur Parameteridentifikation 94
8.1 Vorgabe der Startwerte und der Grenzen für die Parameter 94
8.2 Definition der Zonen 95
8.3 Berechnung der Parameteridentifikation 95
8.4 Beispiel zur Parameteridentifikation 96
9 Ausgabesteuerung 99
9.1 Zeitschrittsteuerung 99
9.2 Sicherung von Berechnungsergebnissen für Restart und für das Postprocessing 100
9.2.1 Optionen in der Datei smas.dbf 102
9.2.2 Ausgabe der Gewässerdaten 103
9.3 Ausgabe von Ergebnissen im Shapefile- oder dbf-Format 104
9.3.1 Ausgabe lupenbasierter Informationen 104
9.3.2 Vereinfachte Ausgabe von Randbedingungsinformationen 109
9.3.3 Erweiterte Ausgabe von Randbedingungsinformationen 110
9.3.4 Projektionsinformation für die Shapefile-Ausgabe 116
9.4 Ausweisen von Bilanzen im Programmsystem PCGEOFIM 117
9.4.1 Bilanzklassen 117
9.4.2 Ausgabe von Massenbilanzen 120
9.5 Ausgabe von Isolinien während der Geofim-Berechnung 122
9.6 Ausgabe von Randbedingungsganglinien im PCGEOFIM-Grafik-Format während der Geofim-Simulation 126
9.7 Ausgabe von Messstellen- und Gruppenganglinien im PCGEOFIM-Grafik-Format während der Geofim-Simulation 127
9.8 Ausgabe von Messwerten am Ende der Berechnung in die Dateien {proj}mess.dbf, {proj}rand.dbf, {proj}brun.dbf und {proj}gewa.dbf 128
9.9 Ausgabe von ASCII-Ganglinien am Ende der Berechnung 130
11 Berechnung der Modellgüte 131
11.1 Version 1 der Messstellengüteberechnung 131
11.2 Version 2 der Messstellengüteberechnung 131
11.2.1 Normalisierter RMSE 131
11.2.2 Bestimmtheitsmaß 132
11.3 Zeitabhängige Messstellengüte 133
12 Erreichen vorgegebener Entwässerungsziele mit minimaler Wasserhebung 136

13 Verweise **139**

1 Einleitung

Das Programmsystem PCGEOFIM besteht im Wesentlichen aus den beiden Komponenten pcgeofim.exe und geofim.exe. Das Programm pcgeofim.exe enthält alle Routinen, die zum Aufbau und zur Auswertung eines Projekts benötigt werden. Das Programm geofim.exe führt die Grundwasserströmungsberechnung und die Transportmodellierung aus.

In diesem Teil der Dokumentation wird die Datenbasis des Simulators Geofim beschrieben. Geofim verwendet dBASE-kompatible Strukturen, die mit allen gängigen Datenbanksystemen, Microsoft Excel® oder einem GIS verarbeitet werden können.

Vom Programm pcgeofim.exe werden beim Anlegen des Projektes {projekt} (siehe auch Teil: Pcgsetup) das Verzeichnis {verzeichnis}:\pcgeofim\{projekt}, neun Unterverzeichnisse, die Datei filname und zwei Links erstellt (siehe Abbildung 1-1).

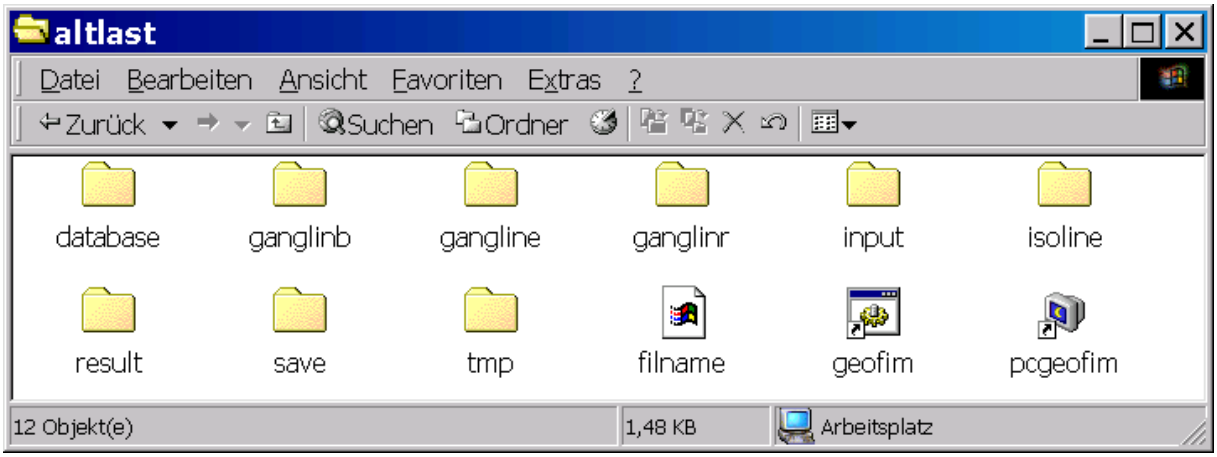


Abbildung 1-1: Verzeichnis {verzeichnis}\pcgeofim\{projekt}

Die Datenbasis für ein Projekt wird immer in home\database abgelegt. Dabei bezeichnet **home** die Zeichenkette **{verzeichnis}\pcgeofim\{projekt}**, ein Beispiel: c:\pcgeofim\altlast.

Das Programmsystem PCGEOFIM wurde erweitert. Die Begrenzung der Lupenanzahl wurde von 31 auf 99 Lupen angehoben. Für diese Erweiterung mussten einige Datenformate und einige Dateibezeichnungen geändert werden. Die Programme pcgeofim.exe und geofim.exe verarbeiten sowohl 31 als auch 99 Lupen. Das gilt auch für die 64-Bit-Versionen der Programme, die sich durch ein „64“ im Namen unterscheiden. Diese Versionen sind nur auf 64-Bit-Plattformen lauffähig.

Seit Version 2008 werden die dBASE-Dateien direkt, feldbezogen und formatfrei eingelesen, d. h. der Anwender kann die Struktur der dbf-Datei verändern (sowohl die Anordnung der Felder als auch die Feldlänge und die Anzahl der Nachkommastellen). Es muss nur gewährleistet werden, dass alle Pflichtfelder in der dbf-Datei enthalten sind. Wahlfreie Felder sind grau unterlegt.

Im {verzeichnis}\pcgeofim\database sind alle möglichen PCGEOFIM-Strukturen (maximal 31 Lupen) zusammengestellt. Die erweiterten PCGEOFIM-Strukturen für 99 Lupen erhält man, indem man die obigen Strukturen nutzt und die Länge des Feldes *LUPE* von 1 auf 2 erhöht.

Tabelle 1-1: PCGEOFIM-Strukturen

Datenbasis	Erläuterung	Struktur
geofim.dbf	Geofim-Steuerdatei	Tabelle 2-1
geoanfa.dbf	Anfangsbedingungen	Tabelle 5-11
geoamas.dbf	Am Ende: Ausgabe Ganglinien ausgewählter RB als ASCII-Tabelle	Tabelle 9-29
geoauss.dbf	Ausschnitt bei Migration	Tabelle 5-10
geobila.dbf	Ausweis von Volumenstrom und Partialdichte zwischen Klassen	Tabelle 9-14
geobrun.dbf	Brunnenstandorte	Tabelle 7-1
geodatum.dbf	Zeitvorgabe[1]	Tabelle 6-3
geodiff.dbf	Diffusionskonstanten	Tabelle 5-1
geodisp.dbf	Dispersivitäten	Tabelle 5-2
geoevap.dbf	Vorgabe Verdunstung von der freien Wasserfläche	Tabelle 4-33
geofeld.dbf	Felddatensatz[2]	Tabelle 3-11
geogmas.dbf	Ausgabesteuerung Ganglinienausgabe	Tabelle 9-25
geogruf.dbf	Kopplung Randbedingungsgruppe an Fließgewässerabschnitt	Tabelle 4-19
geogrup.dbf	Definition von Gruppen zur Summation von Volumenströmen	Tabelle 4-17
geogewa.dbf	Gewässerkopplungen	Tabelle 4-14
geogwf.dbf	Flurabstandsabhängige Grundwasserneubildung (elementspezifische GWN)	Tabelle 4-22
geogwfi.dbf	Flurabstandsabhängige Grundwasserneubildung (klassenspezifische GWN)	Tabelle 4-23
geogwfu.dbf	Flurabstands- und zeitabhängige GWN	Tabelle 4-28
geogwfu10.dbf	Flurabstands- und zeitabhängige GWN mit maximal 10 Klassen	Tabelle 4-29
geogwfz.dbf	Zeitabhängigkeit der GWN	Tabelle 4-24
geoimas.dbf	Ausgabesteuerung Isolinien-Dateien	Tabelle 9-18
geoinfi.dbf	Kopplung von Entnahme- und Infiltrationsbrunnen beim Transport	Tabelle 4-20
geoisot.dbf	Isothermendefinition	Tabelle 5-8
geoklim.dbf	Vorgabe korrigierter Niederschlag und potenzielle Verdunstung	Tabelle 4-31
geolamb.dbf	Abbauraten	Tabelle 5-3
geolup2d.dbf	Lupendefinition	Tabelle 3-7
geolup3d.dbf[3]	3D-Lupendefinition	Tabelle 3-8
geolysi.dbf	Vorgabe von Lysimeterdaten	Tabelle 4-32
geomigr.dbf	Vorgabe Anzahl Partialdichten und Modellminerale (PHREEQC)	Tabelle 9-27
geommas.dbf	Ausgabesteuerung Messstellen- und Gruppenganglinien	Tabelle 9-27
geoopti.dbf	Schutzzielsicherung: Definition der Maßnahmen	Tabelle 12-1
geopara.dbf	Parameterdatei	Tabelle 3-1
geopa00.dbf	Parameterdatei in neuer (erweiterter) Struktur	Tabelle 3-2
geoparz.dbf	Parameterdatei (zeitabhängig) und Störungen (zeitabhängig)	Tabelle 3-5
geopa0z.dbf	Parameterdatei (zeitabhängig) und Störungen (zeitabhängig) in neuer Struktur	Tabelle 3-6
geopebe.dbf	Pegelbewegungsdaten	Tabelle 7-6

geopest.dbf	Pegelstammdaten	Tabelle 7-2 | Tabelle 7-3
georabe.dbf	Randbewegungsdaten	Tabelle 4-2
georand.dbf	Berechnungsergebnisse an den Randbedingungen	Tabelle 9-7
georast.dbf	Randstammdaten	Tabelle 4-1
georeaf.dbf	Realfeld für Zeitvorgaben als Zahl	Tabelle 6-4
georesu.dbf	Berechnungsergebnisse für jedes aktive Finite Volumen	Tabelle 9-6
georest.dbf	Füllkurven der Standgewässer	Tabelle 4-10
geormas.dbf	Ausgabesteuerung Ergebnisse im dbf-Format speichern	Tabelle 9-4
geoschl.dbf	Abflusskurve Fließgewässer	Tabelle 4-13
geoschu.dbf	Startpunkte Schutzzone	Tabelle 6-1
geosmas.dbf	Save-Steuerung	Tabelle 9-3
geostx.dbf	Störungen in x-Richtung	Tabelle 3-11
geosty.dbf	Störungen in y-Richtung	Tabelle 3-11
geostz.dbf	Störungen in z-Richtung	Tabelle 3-11
geostro.dbf	Stromlinien/Bahnlinien	Tabelle 6-2
geoterr.dbf	Gelände und GWN-Klasse	Tabelle 4-26
geotsta.dbf	Zeiträume für Statistik extreme Grundwasserstände	Tabelle 11-1 | Tabelle 11-2
geoxx-i.dbf	Vorgabe Faktor und Grenzen für Identifikation	Tabelle 8-1
geozone.dbf	Vorgabe von Zonen, in denen Parameter identifiziert werden sollen	Tabelle 8-2

[1] Die Datensätze {proj}isoc.dbf, {proj}zeit.dbf haben die Struktur geodatum.dbf

[2] Die Datensätze {proj}ne.dbf, {proj}ns.dbf, {proj}s0.dbf (und weitere) haben die Struktur geofeld.dbf

[3] Diese Datensätze werden nur bei entsprechender Lizenzierung der Option 3D-Lupe verarbeitet

2 Geofim-Steuerdatei

Mit ausgeliefert wird die Geofim-Steuerdatei {verzeichnis}\pcgeofim\database\geofim.dbf. Im Projekt trägt sie den Namen {verzeichnis}\pcgeofim\{projekt}\database\{projekt}.dbf, wobei der Projektname (= Projektordner) maximal 8 Zeichen haben darf.

Tabelle 2-1: Geofim-Steuerdatei

KEYWORD	JNR	DATUM	UNIT	INTE-GER	REAL	EXP	COM
#KEYWORD	n	01.01.2000	Einheit	0	0.000	0	Muster
#RUN	n			0	0.000	0	Batch-Mode
#DIMENSION				0	0.000	0	M, N, L automatisch
#LUPE	n			0	0.000	0	→ {proj}lupe.dbf
#LOKALE-NETZV.	n			3	0.000	0	Lokale Netzverfeine-rung
#RANDOM-WALK	n			10	0.000	0	nrw = 10000, pmass = 0 kg
#MIGRATION	n			1	0.000	0	ein Migrant
#AUSSCHNITT	n			0	0.000	0	→ {proj}auss.dbf
#ADVANCE	n			0	0.000	0	Leakage → Glei-chungssystem
#ZEITEINHEIT			k	0	0.000	0	Eingabe Kalender
#Q-MASS			m3/min	0	0.000	0	Maßeinheit Q
#RHO-MASS			kg/m3	0	0.000	0	Maßeinheit RHO
#STATIONAER	n			0	0.000	0	Berechnung stationär
#PBCG				0	0.000	0	Lösungsverfahren PBCG
#LDLT-FAKT.	n			0	0.000		Direkte Lösung
#EPSM				0	1.000	-7	EPSM = 1.E-7 m
#EPSV				0	1.000	-4	EPSV = 0.1 mm
#EPSST				0	1.000	0	EPSST = 1%
#EPSG	n			0	1.000	-3	EPSG = 1.E-3 m
#EPSP	n			0	5.000	-4	EPSP = 5.E-4
#ITERATION				1000	0.000	0	1000 Iterationen max.
#DHMAX				0	1.000	0	DHMAX = 1 m
#DHOPT	n			0	0.500	0	DHOPT = 0.5 m
#DTMAX				0	91.000	0	DTMAX = 91 Tage
#DTIMAX				0	10.000	0	DTIMAX = 10 Tage
#DTPATH	n			0	31.000	0	max. Schritt GEOPATH
#DTIMIG	n			0	1.000	0	max. Schritt Transport
#TSTOPP[4]	n			0	0	0	Unterbrechungszeit-punkt
#BEGINN		01.01.2005		0	0.000	0	Beginn Berechnung
#ENDE		01.01.2010		0	0.000	0	Ende Berechnung
#RESTART	n			0	0.000	0	Re-Start
#PHREEQC	n			0	0.000	0	reaktiver Stofftransport
#COURANT-FAKTOR				0	0.250	0	(V*DT/DX)max< COU-RANT
#TRACER[1]				0	0.000	0	TRACER-Fall
#ISOTHERME	n			0	0.000	0	→ {proj}isot.dbf
#DIFFUSION	n			0	0.000	0	→ {proj}diff.dbf

KEYWORD	JNR	DATUM	UNIT	INTE-GER	REAL	EXP	COM
#LDISP	n			0	0.000	0	→ {proj}ldis.dbf
#DISPERSIVI-TAET	n			0	0.000	0	→ {proj}disp.dbf
#RETARDATION	n			0	1.000	0	→ {proj}reta.dbf
#LAMBDA	n			0	0.000	0	→ {proj}lamb.dbf
#MONODKINE-TIK[2]	n			0	0.000	0	→ {proj}momo.dbf
#NTRANS	n			0	0	0	→ transportwirksame Porosität
#ZEIT	n			0	0.000	0	→ {proj}zeit.dbf
#GANGLINE	n		q	0	0.000	0	Save Gangline: d|w|m|q|h|a|save|s_all
#AMASKE	n			0	0.000	0	→ {proj}amas.dbf
#GMASKE	n			0	0.000	0	→ {proj}gmas.dbf
#IMASKE	n			0	0.000	0	→ {proj}imas.dbf
#MMASKE	n			0	0.000	0	→ {proj}mmas.dbf
#RMASKE	n			0	0.000	0	→ {proj}rmas.dbf
#SMASKE	r			0	0.000	0	→ {proj}smas.dbf
#TSTA	r			0	0.000	0	→ {proj}tsta.dbf
#HEXTR	r						→ {proj}hext.dbf
#ISOCHRONE	n			0	0.000	0	→ {proj}isoc.dbf
#KFMIN	n			0	1.000	-15	für kf < kfmin → kfmin = 1e-15
#KFMAX				0	0.100	0	für kf > kfmax → ne = 1.
#NEMIN				0	0.005	0	nemin = 0.005
#ANISOTROPIE	n			0	0.100	0	kf-vert = 0,1*kf-hori
#PARAMETER	r			0	0.000	0	→ {proj}para.dbf
#NE	n			0	0.000	0	→ {proj}ne.sdf
#NS	n			0	0.000	0	→ {proj}ns.dbf
#S0	n			0	0.000	0	→ {proj}s0.dbf
#LEAKAGE	n			0	0.000	0	→ {proj}leak.dbf
#STOERUNGEN	n			0	0.000	0	→ {proj}st{x|y|z}.dbf
#BILANZ	n			0	0.000	0	→ {proj}bila.dbf
#ANFANGSDA-TEN	n			0	0.000	0	→ {proj}anfa.dbf
#TERRAIN	n			0	0.000	0	→ {proj}terr.dbf
#GWFUNCTION	n			0	0.000	0	→ {proj}gwfu.dbf
#KLIMA	n			0	0.000	0	→ {proj}klim.dbf
#EVAPORATION	n			0	0.000	0	→ {proj}evap.dbf
#LYSIMETER	n			0	0.000	0	→ {proj}lysi.dbf
#GWF	n			0	0.000	0	→ {proj}gwf.dbf
#GWFI	n			0	0.000	0	→ {proj}gwfi.dbf
#GWFZEIT	n			0	0.000	0	→ {proj}gwfz.dbf
#ARCEGMO	n			6	0.000	0	Kopplung mit ARCEG-MO
#WASIM	n		d	0	0.000	0	Kopplung mit WaSiM-ETH
#RAST-DATEN	r			0	0.000	0	→ {proj}rast.dbf

KEYWORD	JNR	DATUM	UNIT	INTE-GER	REAL	EXP	COM
#RABE-DATEN	r			0	0.000	0	→ {proj}rabe.dbf
#INFILTRATION	n			0	0.000	0	→ {proj}infi.dbf
#GRUPPE[2]	n			0	0.000	0	→ {proj}grup.dbf
#SCHLUESSELK.	n			0	0.000	0	→ {proj}schl.dbf
#BRUNNEN	n			0	0.000	0	→ {proj}brun.dbf
#RESTLOCH	n			0	0.000	0	→ {proj}rest.dbf
#RL_LANDABFLUSS	n			25	0.000	0	RL_Landabfluss (25 %)
#GEWAESSER	n			0	0.000	0	→ {proj}gewa.dbf
#PEST-DATEN	n			0	0.000	0	→ {proj}pest.dbf
#PEBE-DATEN	n			0	0.000	0	→ {proj}pebe.dbf
#SCHUTZZONE	n			0	0.000	0	→ {proj}schu.dbf
#STROMLINIE	n			0	0.000	0	→ {proj}stro.dbf
#ZONE	n			0	0.000	0	→ {proj}zone.dbf
#KF-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}kf-i.dbf
#LK-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}lk-i.dbf
#GW-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}gw-i.dbf
#NE-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}ne-i.dbf
#S0-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}s0-i.dbf
#RA-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}ra-i.dbf
#DI-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}di-i.dbf
#RE-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}re-i.dbf
#RM-IDENTIFIK.	n		do	0	0.000	0	→ {proj}rm-i.dbf
#OPTIMIERUNG	n			0	0.000	0	→ {proj}opti.dbf
#EPSGIS[3]	j			3398			EPSG-Code für PRJ-Datei bei Shape-Ausgabe
#ALT_TB	n						Stauer bei Deaktivierung von TGB-RB irrelevant
#OLDSTA	n						Ausgabe Modellgüte < Version 17.3
#GRUFLU	n						→ {proj}gruf.dbf
#NOPCHK	n						→ Parameterdateien werden nicht geprüft
#ALT-HA	j		HAN2				Alternativfeld für HAN
#ALT-IT	j		ISOTH2				Alternativfeld für ISOTH

[1] #TRACER = **n** ist nur auf Anlagen der GWL Grundwasser Leipzig GmbH, der LEAG AG und der MIBRAG mbH zulässig

[2] Die Monodkinetik kann nur auf Anlagen der GWL Grundwasser Leipzig GmbH und der Umweltbüro GmbH Vogtland berechnet werden.

[3] Der Wert wird für die Zuordnung des EPSG-Codes bei der Ausgabe von Shape-Ausgabe verwendet (z.B. für die erweiterte Ergebnisausgabe mittel RMAS, siehe auch Abschnitt 9.3.4)

[4] Dieses Steuerwort wird ab Version 17.1.0 von Geofim unterstützt und dient dazu, die Berechnung zu einem beliebigen Zeitpunkt zu unterbrechen (entspricht dem Drücken der Escape-Taste)

Allgemeine Erläuterungen zum prinzipiellen Aufbau Steuerdatei:

- Zeile 1: Um die korrekte Formatvorgabe zu unterstützen, kann in allen dBASE-Dateien eine Musterzeile vorgegeben werden. Die Musterzeile ist gekennzeichnet durch den Kommentar „muster“ im Feld *COM*. Alle Felder der Musterzeile sollten Zahlen, Datum oder Text enthalten. So ermöglicht die Musterzeile das korrekte Speichern einer Excel-Tabelle im dbf-Format.
- Spalte 1: *KEYWORD*
  Die Steuerung der Dateneingabe, die Steuerung des Programmablaufes und die Steuerung der Datenausgabe erfolgt über Schlüsselworte. Zur korrekten Steuerung müssen die Schlüsselwörter in einer bestimmten Reihenfolge vorgegeben werden. Aus diesem Grunde sollten diese Einträge nicht verändert werden.
- Spalte 2: *JNR* (Schalterfunktion)
  Schalter auf **j** oder leer: Schlüsselwort „in Betrieb“ → Eingabe eines Festwertes in Spalte 3-7 (wenn erforderlich)

  Schalter auf **n**: Schlüsselwort „nicht in Betrieb“

  Schalter auf **r**: Es wird eine dBASE-Datei {proj}{nnnn}.dbf eingelesen (nnnn s. Spalte *COM*).
- Spalte 3: *DATUM*

  Vorgabe Beginn - Ende Simulation, Restartzeitpunkt.
- Spalte 4: *UNIT*

  Vorgabe Maßeinheit für entsprechende Eingabewerte.
- Spalte 5: Spalte 5: *INTEGER*

  Vorgabe einer Integerzahl im Falle *JNR* = **j.**
- Spalte 6: *REAL*
- Spalte 7: *EXP*

  Vorgabe einer Realzahl der Form $REAL \cdot 10^{EXP}$ im Falle *JNR* = **j**.
- Spalte 8: *COM*

  Erläuterungen.

Es sollten nur die Einträge *JNR, DATUM, UNIT, INTEGER, REAL* und *EXP* dem speziellen Problem angepasst werden. Im Folgenden werden die verschiedenen Schlüsselworte näher vorgestellt, ihre Bedeutung erklärt und die Vorgabemöglichkeiten inklusive der Standardsetzung (fett) angezeigt.

2.1 Allgemeine Vorgaben zur Lösung des Strömungsproblems

#RUN	Wenn *JNR* auf **n** gestellt ist: Abarbeitung von Geofim im Dialog-Mode (im Dialog nach Eingabeaufforderung weitere Ausgaben möglich), wenn *JNR* nicht auf **n** gestellt ist: Abarbeitung von Geofim im Run-Mode (mit Escape ist ein Unterbrechen des Run-Mode möglich)
#DIMENSION	Beim Lesen der Parameterdatei {proj}para.dbf wird an dieser Stelle die Problemdimension übernommen.
#LUPE	Lupendefinition: Das horizontale Gitter kann mit Hilfe von Lupen verfeinert werden (maximal 99).
#LOKALE-NETZV.	Einzelne finite Volumina können horizontal in 3x3 Elemente unterteilt werden
#ZEITEINHEIT	s, m, h, d, a oder k (Kalender = Datum)
#Q-MASS	Maßeinheit für Ein- oder Ausspeisung m^3/s, **m^3/min**, m^3/h, m^3/d
#STATIONAER	stationäre Berechnung der Grundwasserströmung: • alle Vorgaben, die Zeitangaben beinhalten, müssen auf den Endzeitpunkt gesetzt sein (z.B. {proj}smas) • DTMAX muss größer als die Berechnungszeit (#ENDE - #BEGINN) sein
#PBCG	Lösung der linearen Gleichungssysteme nach dem präkonditionierten bikonjugierten Gradientenverfahren, **Standard** [Press 1986]
#LDLT-FAKT.	Lösung des Gleichungssystems mit Hilfe der LDLT-Faktorisierung [Häfner 1992]
#EPSM	Genauigkeit Restkorrektur in m für das PBCG-Verfahren: **10^{-7}m**
#EPSV	zulässige Verletzung Strömungszustand in m (für die Übergänge gespannt - ungespannt oder ungespannt-leer): **10^{-4} m**
#EPSST	zulässige Abweichung Zu- und Abflüsse bei stationärer Berechnung (für höhere Genauigkeit 0.1%): **1%**
#ITERATION	maximale Anzahl Iterationen zur Berechnung eines Zeitschrittes: **1000**
#DHMAX	maximale h-Änderung pro Teilzeitschritt in m: **1 m** Bei Verletzung der Schranke wird der folgende Teilzeitschritt verringert.
#DHOPT	H-Step bei der Brunnenoptimierung: **0.5** m
#DTMAX	maximaler Zeitschritt in der für #ZEITEINHEIT vorgegebenen Maßeinheit, Standard: **91 Tage**
#DTIMAX	maximaler Teilzeitschritt in der für #ZEITEINHEIT vorgegebenen Maßeinheit, Standard: **10 Tage**. Eine weitere Unterteilung des Zeitschritts sichert die Dominanz der Hauptdiagonalen im zu lösenden Gleichungssystem für die Spiegelhöhe.
#DTPATH	maximaler Teilzeitschritt, wenn Stromlinien oder Schutzzonen berechnet werden, Standard: **31 Tage.**
#BEGINN	Beginn Berechnung (Maßeinheit s. #ZEITEINHEIT)
#ENDE	Ende Berechnung
#RESTART	Fortsetzung der Berechnung ab einem Zeitpunkt, für den Ergebnisse gesichert wurden: • alter Endzeitpunkt oder beliebiger Zwischenzeitpunkt, der in {proj}smas.dbf vorgegeben wurde, in #RESTART eintragen (im ersten Fall einen neuen Endzeitpunkt setzen) • für #RESTART in Spalte *JNR* ein **j** eingeben • Simulation erneut starten Vor dem Restart können Parameter verändert werden.
#ZEIT	vorgegebene Berechnungszeitpunkte: Außer der programminternen Δt-Berechnung können vom Nutzer Zeitpunkte vorgegeben werden, für die eine Spiegelhöhen- bzw. Dichteverteilung berechnet werden soll. Sie ergeben Stützstellen in den Ganglinien, ein SAVE erfolgt nicht.
#GANGLINE	Ganglinien können täglich (d), wöchentlich (w), monatlich (m), quartalsweise (q), halbjährlich (h) oder jährlich (a) gespeichert werden. Durch die Vorgabe von #GANGLINE können zusätzliche Zeitstützstellen entstehen, z. B. bei Vorgabe von „w“. Dazwischenliegende Berechnungszeitpunkte werden nicht gespeichert. Eine Beschreibung der Optionen „save“ und „s_all“ finden Sie im Abschnitt 9.8.
#AMASKE	Am Ende der Berechnung: Ausgabe ausgewählter Ganglinien als ASCII-Tabelle
#GMASKE	Ausgabesteuerung Ganglinienausgabe
#IMASKE	Ausgabesteuerung Isolinienausgabe
#MMASKE	Ausgabesteuerung Messstellen- und Gruppen-Ganglinien

#PMASKE	Druckersteuerung
#RMASKE	Steuerung Resultatausgabe im shp-/dbf-Format
#SMASKE	Sicherungssteuerung
#TSTA	Ausgabe der zeitabhängigen Statistiken gemäß der in der Datei {proj}tsta.dbf definierten Zeiträume
#HEXTR	Ausgabe von Grundwasserextremwerten entsprechend der inn {proj}hext.dbf definierten Zeiträume. Ausgegeben werden Maximum, Minimum und Durchschnitt des Grundwasserstands jeder Zelle. Zusätzlich wird die mittlere GW-Neubildung für diese Zeiträume ausgegeben.
#ISOCHRONE	Vorgegebene Zeitpunkte für die Schutzzonen- und Stromlinienberechnung (Standard im Falle Schutzzone: **50** und **100 Tage**, **1**, **2**, **10** und **30 Jahre**)
#KFMIN	Minimaler k_f-Wert: Für k_f < kfmin wird k_f = kfmin gesetzt (kfmin = $\mathbf{10^{-15}}$ m/s)
#KFMAX	Vorgabe der maximal möglichen Durchlässigkeit: **0.1** Treten in den Vorgabewerten Durchlässigkeiten k_f >= kfmax auf, so wird k_f = kfmax gesetzt und die entwässerbare Porosität n_e = 1 angenommen (d.h. eventuell dafür vorgegebene oder berechnete Werte $n_e(k_f)$ werden ignoriert).
#NEMIN	Minimaler n_e-Wert: Wenn die Funktion $n_e(k_f)$ < nemin ist, wird n_e = nemin gesetzt (nemin = **0.005**) (siehe Tabelle 3-13)
#ANISOTROPIE	Vorgabe des Unterschiedes zwischen horizontaler und vertikaler Leitfähigkeit **→ z- Störungen überschreiben diesen Faktor**
#PARAMETER	Vorgabe der Geometrie, k_f-Werte, Grundwasserneubildung, Anfangsspiegelhöhe, Bilanzklassen, Isotherme **→ Für dieses Steuerwort muss in der Spalte *JNR* immer r vorgegeben werden, da hiermit die eigentliche Definition des Modells erfolgt!**
#NE	entwässerbare Porosität (siehe Tabelle 3-13)
#NS	Porosität der stagnierenden Phase (siehe Tabelle 3-13)
#S0	Speicherkoeffizient S_0: $\mathbf{10^{-4}}$ als Eingabegröße dimensionslos, lt. Langguth, Hölting, Busch/Luckner/Tiemer: „S“
#LEAKAGE	Durchlässigkeit zwischen nicht verbundenen Grundwasserleitern als Ersatz für einen Stauer, ohne dass dieser im Modell mitgeführt werden muss
#STOERUNGEN	Vorgabe von Störungen: In x-, y- und z-Richtung können Faktoren vorgegeben werden, mit denen der Volumenstrom zwischen zwei benachbarten finiten Volumina multipliziert wird (positive x-, y- und z-Richtung, kartesische Koordinaten). Es kann so der Tensorcharakter des k_f-Wertes berücksichtigt und auch für bestimmte Elemente eine Verringerung bzw. Erhöhung des Volumenstromes richtungsabhängig beeinflusst werden.
#BILANZ	Ausweis von Mengen- und Stoffströmen, die zwischen zwei Bilanzklassen fließen
#TERRAIN	Vorgabe des Geländes und der Klasse der Grundwasserneubildungsfunktion
#GWFUNCTION	Zeit- und flurabstandsabhängige Grundwasserneubildung für jede vorgegebene Klasse
#KLIMA	Vorgabe korrigierter Niederschlag und potenzielle Verdunstung
#EVAPORATION	Vorgabe Seeverdunstung
#LYSIMETER	klassenweise Vorgabe der Perkolation
#GWF	Vorgabe einer flurabstandsabhängigen Grundwasserneubildung
#GWFI	klassenweise Vorgabe einer flurabstandsabhängigen Grundwasserneubildung
#GWFZEIT	Vorgabe von Faktoren zur Nachbildung der Zeitabhängigkeit der GWN
#ARCEGMO	Kopplung mit dem Bodenwasserhaushaltsmodell ArcEGMO
#WASIM	Kopplung mit dem Bodenwasserhaushaltsmodell WaSiM-ETH
#RAST-DATEN	Vorgabe der Stammdaten für obere Berandung, Pegel, RB 1., 2. und 3. Art, Tagebau, Brunnen, Gewässer sowie RB für den Transport
#RABE-DATEN	Vorgabe der Bewegungsdaten für RB 1., 2. und 3. Art, Tagebau, Brunnen, Gewässer, Migration **Bei Vorgabe von Randbedingungen müssen immer beide Datenbanken ({proj}rast.dbf und {proj}rabe.dbf) aufgebaut werden. Ausnahme: RB für Pegel und obere Berandung**
#GRUPPE	Definition von Randbedingungs- und Brunnengruppen zur Summation der Volumenströme
#SCHLUESSELK.	Schlüsselkurven (Abflusskurven) beschreiben den Zusammenhang zwischen dem Abfluss und dem Wasserstand im Fluss für ausgewählte Flussabschnitte (siehe Abschnitt 4.5).
#BRUNNEN	Vorgabe Brunnenstandort und Bezeichnung (nur für graphische Ausgabe erforderlich - siehe

	Abschnitt 7.1)
#RESTLOCH	Vorgabe der Wasserfläche und der Zehrung als Funktion der Spiegelhöhe (der Anwender wird vom Tool ISOHYPSE bei der Aufstellung dieser Funktionen unterstützt)
#GEWAESSER	Die Kopplung zwischen Standgewässern und Fließgewässern wird in der Datei {projgewa}.dbf definiert.
#SCHUTZZONE	Im Falle stationärer Strömung werden die **Endpunkte** von Stromlinien vorgegeben. Die Fluidteilchen werden von diesen Endpunkten aus mit der negativen Geschwindigkeit durch den Aquifer transportiert. Es ist so feststellbar von woher die Fluidteilchen kommen. Die Verbindung vieler Punkte zu einem festen Zeitpunkt ergibt den Einzugsbereich.
#PEST-DATEN	Vorgabe der Koordinaten und Ausbau von Messstellen
#PEBE-DATEN	Vorgabe gemessener Spiegelhöhen und/oder Partialdichten und/oder Schutzzielen. Die Verbindung zwischen den beiden Datenbanken ist über Pegelnamen gegeben.
#OPTIMIERUNG	Im Falle der Sicherung von Schutzzielen: Vorgabe der Maßnahmen
#GRUFLU	Einlesen der Datei {proj}gruf.dbf für die Kopplung Randbedingungsgruppe an ein Fließgewässerelement

2.2 Allgemeine Vorgaben zur Lösung des Transportproblems

#RANDOM-WALK	Lösung des Transportproblems mit Hilfe des RANDOM-WALK-Verfahrens (siehe Teil THEORIE). Vorgegeben wird die maximale Partikelanzahl (Wert·1000), Standard: **10** = 10000 Partikel und die Masse eines Partikels, Standard **0** g (die Partikelmasse wird problembezogen bestimmt).
#MIGRATION	Lösung des Transportproblems mittels Flux-Limiter-Algorithmus (siehe Teil THEORIE). Vorgegeben wird die Anzahl der Migranten (maximal 15), Standard: **1**.
#AUSSCHNITT	Für die Berechnung des Stofftransportes ist es aus Rechenzeitgründen sinnvoll nur den Bereich zu betrachten, in dem der Stofftransport erfolgt.
#RHO-MASS	Maßeinheit für die Partialdichte **kg/m^3**, g/m^3, g/l, mg/l, µg/l, mmol/l, mol/l
#PHREEQC	Reaktiver Stofftransport (siehe Teil PHREEQC)
#COURANT-FAKTOR	Courant-Faktor: **0.25**. Mittels Courant-Faktor wird eine Unterteilung der Transportzeitschritte vorgenommen. Der Faktor gibt an, welchen Teil des finiten Volumens ein Partikel pro Teilzeitschritt maximal durchwandern darf.
#DTIMIG	Maximale Zeitschrittweite für die Lösung der Transportgleichung
#TRACER	Tracerfall
#ISOTHERME	Festlegung von Wechselwirkungsprozessen zwischen Fluid- und Feststoffphase durch Vorgabe bestimmter Modelle, die orts- und stoffabhängig definiert werden können (siehe Abschnitt 5.5)
#DIFFUSION	Vorgabe von Diffusionskonstanten für die einzelnen Migranten
#LDISP	Vorgabe der longitudinalen Dispersivität (gebietsabhängig)
#DISPERSIVITÄT	Vorgabe der longitudinalen Dispersivität (global) und der Faktoren Flongv und Ftrans. Standard: **10 m**, **0.1**, **0.1**. Ist #LDISP mit Schalter **r** gesetzt, so ist die in dieser Datenbank vorgegebene longitudinale Dispersivität ohne Bedeutung.
#RETARDATION	Vorgabe eines Retardationskoeffizienten gebietsabhängig, Standard: **1**.
#LAMBDA	Vorgabe eines Abbaukoeffizienten für jeden Migranten: Standard: **0 s^{-1}**.
#LAMC	Vorgabe einer konzentrationsabhängigen Abbaurate für jeden Migranten in 1/s
#MONODKINETIK	Vorgabe der Koeffizienten zur Berechnung des Abbaus organischer Stoffe in Abhängigkeit von der am Ort angetroffenen Sulfatkonzentration
#NTRANS	Aktivierung einer transportwirksamen Porosität, Angabe erfolgt über die Parameterdateien (j/n zulässig)
#ANFANGSDATEN	Vorgabe der Anfangsdichte für die einzelnen Migranten.
#STROMLINIE	Vorgabe der Anfangskoordinaten von Stromlinien. Die Wanderung der Fluidteilchen durch den Aquifer gemäß Strömungsgeschwindigkeit $v_{Dar}/((n_e+n_s)R)$ wird am Bildschirm angezeigt und auf Plotter und Drucker ausgegeben.

2.3 Allgemeine Vorgaben für die Parameteridentifikation

#PEST-DATEN	Vorgabe der Koordinaten für die Pegel und eventuell zu koppelnde Nachbarpegel
#PEBE-DATEN	Vorgabe gemessener Spiegelhöhen und/oder Teildichten. Die Verbindung zwischen den beiden Datenbanken ist über Pegelnamen gegeben.
#ZONE	Für jede zu identifizierende Parametergruppe kann ein Gebiet festgelegt werden (in x- und y-Richtung und für den jeweiligen Grundwasserleiter). Innerhalb dieses Gebietes wird der entsprechende Parameter so variiert, das berechnete und gemessene Spiegelhöhen bzw. Teildichten bestmöglich übereinstimmen.
#KF-IDENTIFIK. #LK-IDENTIFIK. #GW-IDENTIFIK. #NE-IDENTIFIK. #S0-IDENTIFIK. #RA-IDENTIFIK. #DI-IDENTIFIK. #RE-IDENTIFIK. #RM-IDENTIFIK.	Die linksstehenden Parametergruppen können angepasst werden. Dabei werden für alle einheitlichen Datenbanken aufgebaut, die einen Startwert und Grenzen (MIN, MAX) für diesen Multiplikator enthalten. Eine Verbindung zwischen den festgelegten Zonen und den entsprechenden Parametergruppen wird wieder über Namen hergestellt. Zu beachten ist, dass bei Wahl der zu identifizierenden Parametergruppen außer durch Eintrag von *JNR* = **r** in der Spalte *UNIT* noch **do** eingetragen sein muss. (KF: Durchlässigkeit, LK: Leakagefaktor, GW: Grundwasserneubildung, NE: entwässerbare Porosität, S0: Speicherkoeffizient [-], RA: Randbedingung 2./3. Art, LD: longitudinale Dispersivität, RE: Retardationsfaktor; RM: Teildichte bei Eintrag über Randbedingungen)
#EPSG	Für Parameteridentifikation: Bei Änderung des Modellfehlers um einen Betrag < EPSG bei Ausführung eines neuen Iterationsschrittes (neue Parameterkombination) wird der Suchalgorithmus abgebrochen und der ausgewiesene Modellfehler als Minimum betrachtet.
#EPSP	Für Parameteridentifikation: Bei Änderung aller Parameter um einen Betrag < EPSP wird der Suchalgorithmus abgebrochen und die ermittelten Parameter und der sich daraus berechnete Modellfehler als optimal betrachtet.

3 Das Parametermodell

Der Aquifer wird mit Hilfe finiter Volumina beschrieben. In der Abbildung 3-1 ist eine solche Diskretisierung schematisch dargestellt. Für jedes finite Volumenelement müssen die Geometrie des Aquifers und die im Untergrund angetroffenen hydrogeologischen Verhältnisse vorgegeben werden. Die Vorgabe dieser Daten erfolgt in Parameterdateien.

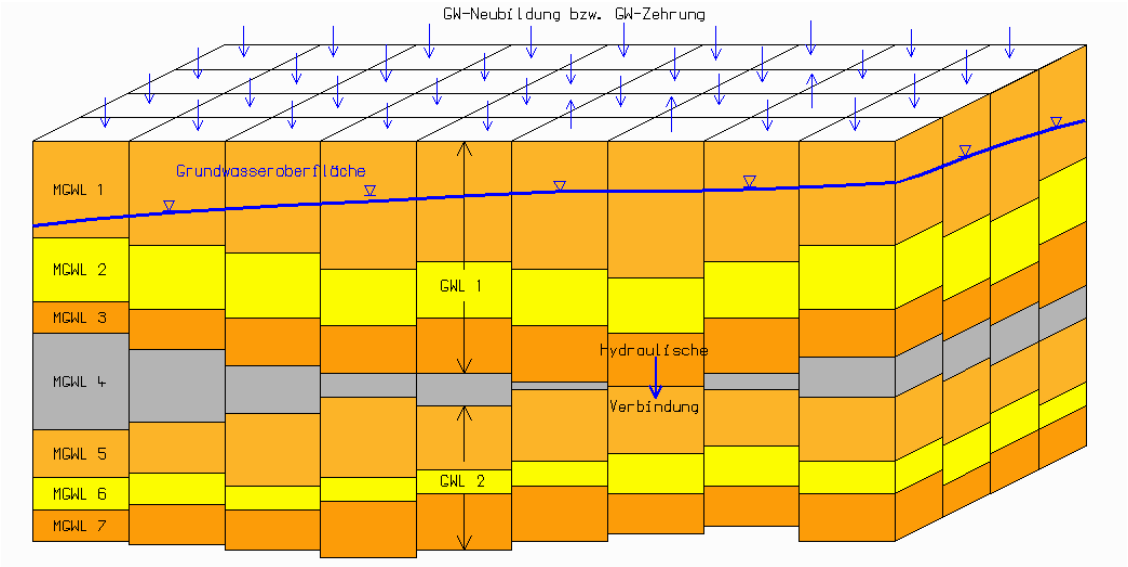


Abbildung 3-1: Unterteilung des Aquifers in finite Volumina

3.1 Die Parameterdatei

Die finiten Volumina werden wie folgt nummeriert:

- in x-Richtung: *IS* = 1, 2, ..., M,
- in y-Richtung: *JZ* = 1, 2, ..., N,
- in z-Richtung: *MG* = 1, 2, ..., L (vom Gelände zur Sohle).

Es muss eine Diskretisierung sowohl horizontal als auch vertikal vorgegeben werden. Das geschieht nach den in Abbildung 3-2 und Abbildung 3-3 dargestellten Schemen. In der globalen Parameterdatei {proj}para.dbf wird das Grundraster definiert.

Die Grundwasserströmung erfolgt im Geofim nur über die Kanten, eine Strömung über Eck ist nicht möglich (siehe Abbildungen). Eine horizontale Strömung wird nur innerhalb der Modellgrundwasserleiter (*MG*) realisiert. Innerhalb der Modellgrundwasserleiter wird eine Strömung unabhängig von möglichen Sprunghöhen der MG-Unterkante (*ZU*) realisiert.

Um einen korrekten Aufbau zu gewährleisten, sollte die Initialisierung (Neuaufbau) mit dem Tool Geopara erfolgen. Wenn keine globale Parameterdatei existiert, kann im Dialog mit dem Nutzer eine Parameterdatei initialisiert werden (siehe Teil Geopara). Parameterdateien für Lupen sollten durch Teilung des Grundrasters erzeugt werden. Dazu muss in der Geofim-Steuerdatei der Dialog-Mode (#RUN n) gewählt und die Lupen definiert (#LUPE r) werden.

Wenn nun Geofim gestartet wird, kann der Anwender durch Beantwortung der Frage „Update Parameter files (j/N)?“ mit ja Parameterdateien für Lupen erstellen.

In der Tabelle 3-1 ist die Struktur dargestellt. Die Tabelle 3-4 und die Abbildung 3-4 zeigen Ausschnitte aus der Parameterdatei altlpara.dbf.

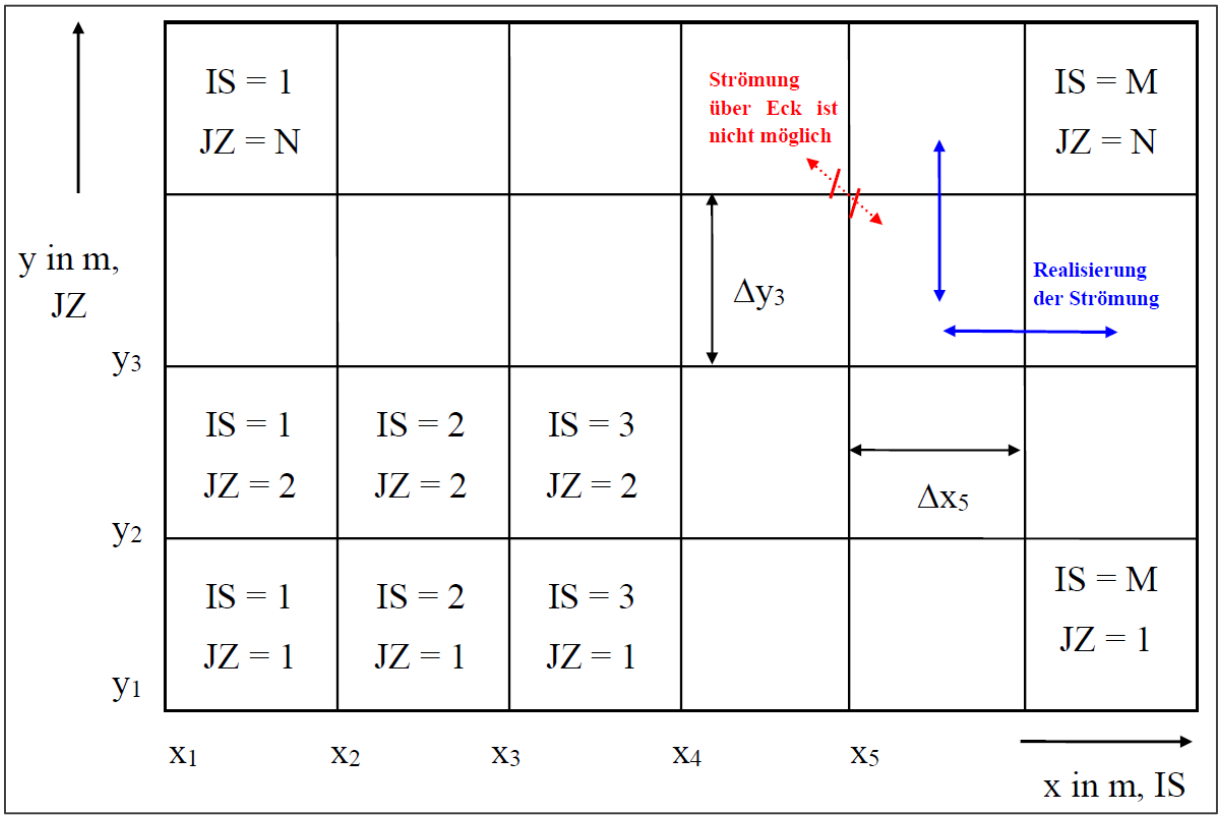


Abbildung 3-2: Horizontale Diskretisierung des Modellgebiets

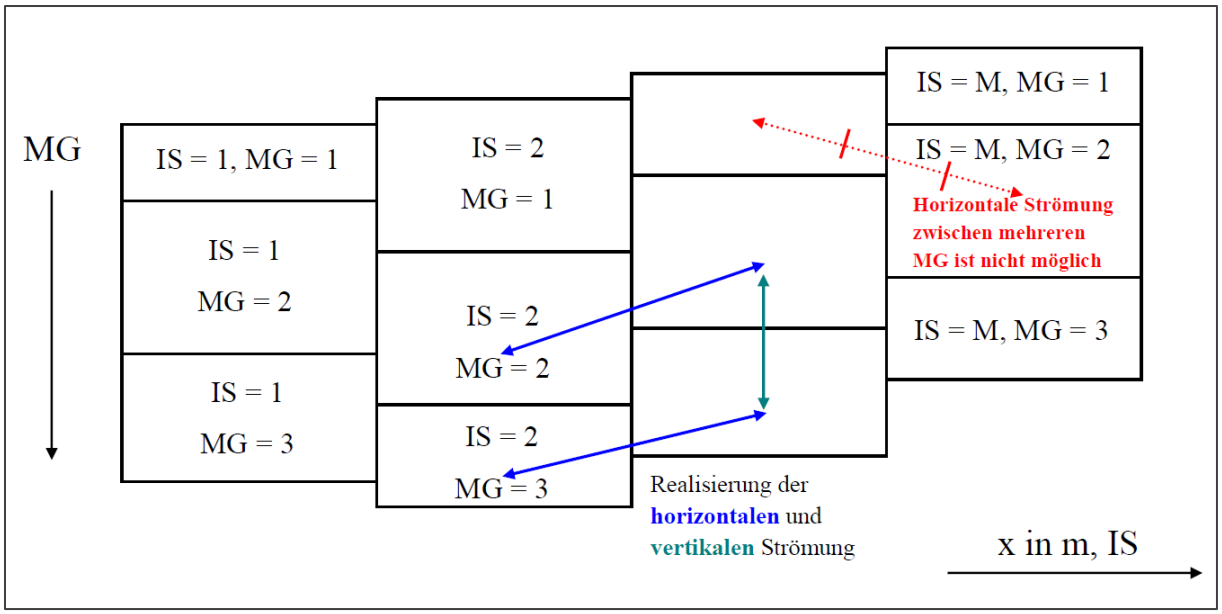


Abbildung 3-3: Vertikale Diskretisierung (im Beispiel drei Modellgrundwasserleiter)

Tabelle 3-1: Struktur der Parameterdatei geopara.dbf →
home/database/{proj}par{l}.dbf | home/database/{proj}para.[dbf | d{ll}]

Feldname	Typ	Länge[1]	Erläuterung
X	N	7	Rechtswert (linke untere Ecke)
Y	N	7	Hochwert (linke untere Ecke)
LUPE	Z	1 | 2	Finites Volumenelement in der Lupe *LUPE* (1, 2, ..., a, b, …, v) | (1,2,…,99)
IS	N	3	Nummerierung in x-Richtung
JZ	N	3	Nummerierung in y-Richtung
MG	N	2	Nummerierung in z-Richtung vom Gelände zur Sohle
ZU	N	6.1	Elementunterkante in m NHN
M1	N	5.1	Mächtigkeit in m
M2	N	5.1	*M2* und *M3* sollten Null gesetzt werden[2]
M3	N	5.1	
KF1	N	3.1	K_f-Wert *KF1* · 10^{KE1} in m/s
KE1	N	3	
KF2	N	3.1	*KF2*, *KE2*, *KF3* und *KE3* sollten Null gesetzt werden[2]
KE2	N	3	
KF3	N	3.1	
KE3	N	3	
GWR	N	4.1	Grundwasserneubildung oder Zehrung[3] in l/(s*km^2) bzw. 10^{-9} m/s
HAN	N	6.2	Anfangsspiegelhöhe in m
BIL1	Z	4	Bilanzklassen
BIL2	Z	4	
BIL3	Z	4	
ISOT	N	2	Isotherme (nur Stofftransport)
LAMBCN[8]	N	2	Zuordnung für konzentrationsabhängige Abbaukoeffizienten (lamc.dbf)
KOP	N	2	Kopplung MGWL[4] (wird beim Para-Datei-Update[5] von Geofim gesetzt: 0: nein, 1: nach oben, -1: nach unten, 2: nach oben und unten)
R	Z	1	aktuelle Lupe (wird beim Para-Datei-Update[5] von Geofim gesetzt, nur wenn *R* = *LUPE* gehört Element zum Strömungsraum | a: aktiv, i: inaktiv, manuelle Vorgabe ist nicht notwendig); Vorgabe lokaler Netzverfeinerung mit R=x (siehe Abschnitt 3.7)
W	N	7.3	*W*, *WEXP*, *COLB*, *COLA* und *ASCI* sind spezielle Felder für das Preprocessing
WEXP	N	3	
COLB	N	2	
COLA	N	2	
ASCI	Z	32	
GWL	Z	4	Grundwasserleiterbezeichnung
BODEN	Z	4	Bodenart nach KA 5, S. 142[6] (siehe Tabelle 3-3)
ISOTH	N	2	Isolinienthema (Festlegung von Themen für das Tool Geoisol)
GEL	N	6.2	Gelände in m NHN[7]
NE[9]	N	5.3	Entwässerbare Porosität
NS[9]	N	5.3	Porosität der stagnierenden Phase
S0[9]	N	3.1	Speicherkoeffizient [-] *S0* · 10^{S0EXP}
S0EXP[9]	N	2	
COM	Z	20	Kommentar

[1]Länge bedeutet: Gesamtlänge des Feldes (inkl. Dezimalpunkte), Anzahl der Dezimalstellen (z. B. 7.3: zzz.ddd).

[2]Die Aufteilung in drei Schichten wurde eingeführt, um die Gleichungsanzahl zu verringern. Der PBCG-Algorithmus enthält aber solche Beschränkung nicht, so dass beim Neuaufbau von Modellen immer *M2* und *M3 bzw. KF2, KE2, KF3 und KE3* Null gesetzt werden sollten und dafür weitere Modellgrundwasserleiter mit einer Mächtigkeit M1 hinzugefügt werden sollten.

[3]Bei Vorgabe einer zeitkonstanten und flurabstandsunabhängigen Grundwasserneubildung oder Zehrung werden die Werte der flurabstandsabhängigen GWN ({proj}gwf.dbf) bzw. der flurabstands-, bodenart-, bodennutzungsabhängigen GWN ({proj}terr.dbf und {proj}lysi.dbf) nicht berücksichtigt. Vorgabe im Normalfall im obersten Modellgrundwasserleiter, Realisierung in Geofim als zeitkonstante Randbedingung 2. Art.

[4]Kopplung MGWL wird beim Update der Parameterdateien gesetzt und vom Tool Geopara ausgewertet

[5]Nur wenn Geofim im Dialog-Modus (Einzelschritt) gestartet wird, kann ein Update der Parameterdateien erfolgen

[6]Bodenkundliche Kartieranleitung, 5. Auflage, Hannover 2005

[7]Die Parameterdateien enthalten das Feld *GEL* nur zur Information. Vorgegeben wird das Gelände in der Datei {proj}terr.dbf oder in der Datei {proj}gwf.dbf, wenn keine dieser Dateien vorhanden ist, wird das Gelände programmintern aus ZU+M1+M2+M3 berechnet.

[8] Ist das Feld nicht vorhanden oder der Eintrag leer, wird als Zuordnung der Wert 1 übernommen

[9]Die Vorgabe von n_e, n_s und S_0 in der Parameterdatei ist optional. Wenn sie jedoch in den Parameterdateien vorgegeben werden (Wert ungleich Null), so werden diese durch Feldvorgaben **nicht überschrieben**.

3.2 Parameterdatei in der erweiterten Struktur

Ab Version 14 kann PCGEOFIM drei verschiedene Typen von Parameterdateien verarbeiten:

- Parameterdateien {proj}par0.dbf, {proj}par{l}.dbf und {proj}parz.dbf
  mit {proj} – erste vier Zeichen des Projektnamens und
  {l} – Lupenbezeichnung (1, 2, …,9, a, b, …, v) (maximal 31 Lupen).
  Zur vollständigen Beschreibung des Strömungsraumes gehören noch die Felddatensätze für die Felder n_e, n_s, S_0, stx, sty, stz und leak jeweils für das Grundraster und die Lupen.
- Parameterdateien {proj}para.dbf, {proj}para.d{ll} und {proj}parz.dbf
  mit {proj} – erste vier Zeichen des Projektnamens und
  {ll} – Lupenbezeichnung (01, 02, …, 99) (maximal 99 Lupen).
  Auch in diesem Falle gehören zur vollständigen Beschreibung des Strömungsraumes die Felddatensätze für die Felder n_e, n_s, S_0, stx, sty, stz und leak jeweils für das Grundraster und die Lupen. Die Verwendung dieser Struktur wird für den Aufbau neuer Modelle **nicht mehr empfohlen** und gilt als veraltet. Die Unterstützung der Struktur kann in einer zukünftigen Programmversion entfernt werden. Stattdessen sollte die Verwendung der nachfolgend aufgeführten Parameterdateistruktur Vorzug finden.
- Parameterdateien {proj}pa00.dbf, {proj}pa{ll}.dbf und {proj}pa0z.dbf
  mit {proj} – erste vier Zeichen des Projektnamens und
  {ll} – Lupenbezeichnung (01, 02, …, 99) (maximal 99 Lupen).
  Der Strömungsraum ist durch diese Parameterdatei vollständig beschrieben, da die Parameter n_e, n_s, S_0, stx, sty, stz und leak in den Parameterdateien vorgegeben werden. Die Felddatensätze für die Felder n_e, n_s, S_0, stx, sty, stz und leak werden nicht verarbeitet.

Die Tabelle 3-2 zeigt die erweiterte Struktur der Parameterdateien. Die Pflichtfelder sind fett gedruckt, d.h. die dbf-Datei braucht nur die Felder *LUPE*, *IS*, *JZ*, *MG*, *ZU*, *M1*, *KF1*, *KE1* und *HAN* zu enthalten. Dann gibt es aber keine Störungen, keinen Leakage und für n_e, n_s sowie S_0 werden die Standards (z.B. Gleichung (1), nach (Hennig, 1966)) angewendet. In den Abschnitten 3.5 sowie 3.6 wird gezeigt, auf welche Art und Weise der Anwender ein bestehendes Modell in die neue Parameterstruktur überführen kann. Die Struktur zur Vorgabe zeitabhängiger Parameter wird in Abschnitt 3.3 erläutert.

Tabelle 3-2: Struktur der Parameterdatei geopa00.dbf → home/database/{proj}pa{ll}.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
X	**N**	**11.3**	**Rechtswert (linke untere Ecke)**
Y	**N**	**11.3**	**Hochwert (linke untere Ecke)**
LUPE	**N**	**2**	**Finites Volumenelement in der Lupe *LUPE* (1,2,…,99)**
IS	**N**	**3**	**Nummerierung in x-Richtung**
JZ	**N**	**3**	**Nummerierung in y-Richtung**
MG	**N**	**2**	**Nummerierung in z-Richtung vom Gelände zur Sohle**
IDX	N	10	IDX =100000000 * *LUPE* + 100000 * *IS* + 100 * *JZ* + *MG*
ZU	**N**	**6.2**	**Elementunterkante in m NHN**
M1	**N**	**6.2**	**Mächtigkeit in m**
ZO	N	6.2	Elementoberkante in m NHN
GEL	N	6.2	Gelände in m NHN
KF1	**N**	**3.1**	**K_f-Wert *KF1* · 10^{KE1} in m/s**

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
KE1	**N**	**3**	
STX	N	3.1	Störung[1] in x-Richtung $STX \cdot 10^{STXE}$
STXE	N	3	
STY	N	3.1	Störung[1] in y-Richtung $STY \cdot 10^{STYE}$
STYE	N	3	
STZ	N	3.1	Störung[1] in z-Richtung $STZ \cdot 10^{STZE}$ (von *MG* nach *MG*-1)
STZE	N	3	
LEAK	N	3.1	Leakage-Faktor $LEAK \cdot 10^{LEAKE}$ (von *MG* nach *MG*+1)
LEAKE	N	3	
NE	N	5.3	Entwässerbare Porosität
NS	N	5.3	Porosität der stagnierenden Phase
NT[2]	N	5.3	Transportwirksame Porosität
S0	N	5.3	Speicherkoeffizient [-] $S0 \cdot 10^{S0E}$
S0E	N	3	
GWR	N	5.1|5	Grundwasserneubildung oder Zehrung[3] in l/(s*km^2) bzw. 10^{-9} m/s
HAN	**N**	**6.2**	**Anfangsstandrohrspiegelhöhe in m**
MIG1AN	N	5.3	Anfangspartialdichte 1 $MIG1 \cdot 10^{MIG1E}$ in RHO-MASS (**kg/m^3**, g/m^3, g/l, mg/l, µg/l, mmol/l, mol/l)
MIG1EAN	N	3	
BIL1	Z	4	Bilanzklassen
BIL2	Z	4	
BIL3	Z	4	
ISOT	N	2	Isotherme (nur Stofftransport)
LAMBCN[3]	N	2	Zuordnung für konzentrationsabhängige Abbaukoeffizienten (lamc.dbf)
ISOTH	N	2	Isolinienthema (Festlegung von Themen für das Tool Geoisol)
KOP	N	2	Kopplung MGWL (wird beim Para-Datei-Update von Geofim gesetzt): 0: nein, 1: nach oben, -1: nach unten, 2: nach oben und unten
LNVF	Z	1	Lokale Netzverfeinerung (Aktivierung durch Zeichen: x)
R	N	2	aktuelle Lupe (wird beim Para-Datei-Update von Geofim gesetzt, nur, wenn *R* = *LUPE* gehört Element zum Strömungsraum, manuelle Vorgabe ist nicht notwendig)
GWL	Z	4	Grundwasserleiterbezeichnung
BODEN	Z	4	Bodenart nach KA 5, S. 142
W	N	7.3	*W*, *WEXP*, *COLB*, *COLA* und *ASCI* sind spezielle Felder für das Preprocessing
WEXP	N	3	
COLB	N	2	
COLA	N	2	
ASCI	Z	32	
COM	Z	20	Kommentar

[1] Eine Störung von 1.0 wird wie ein leerer Eintrag behandelt und wird daher nicht wirksam

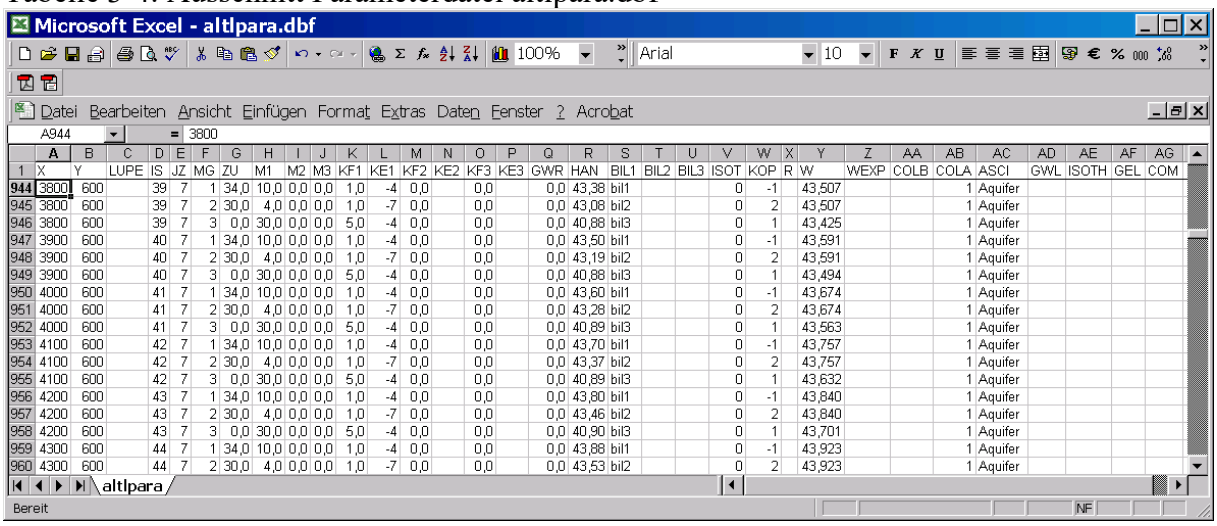
[2] Ist Pflicht, falls in der Steuerdatei #NTRANS = j gesetzt wurde

[3] Ist das Feld nicht vorhanden oder der Eintrag leer, wird als Zuordnung der Wert 1 übernommen

Tabelle 3-3: Bodenarten nach KA 5

Bodenart	Erläuterung	Bodenart	Erläuterung	Bodenart	Erläuterung
Ss	reiner Sand	Uu	Schluff	T	Ton
fS	Feinsand	Us	sandiger Schluff	Ts	sandiger Ton
fSms	mittelsandiger Feinsand	Ul	lehmiger Schluff	Ts2	schwach sandiger Ton
fSgs	grobsandiger Feinsand	Uls	sandig-lehmiger Schluff	Ts3	mittel sandiger Ton
mS	Mittelsand	Ul2	schwach lehmiger Schluff	Ts4	stark sandiger Ton
mSfs	feinsandiger Mittelsand	Ul3	mittel lehmiger Schluff	Tt	schluffiger Ton
mSgs	grobsandiger Mittels-and	Ul4	stark lehmiger Schluff	Tu2	schwach schluffiger Ton
gS	Grobsand	Ut	toniger Schluff	Tu3	mittel schluffiger Ton
gSfs	feinsandiger Grobsand	Ut2	schwach toniger Schluff	Tu4	stark schluffiger Ton
gSms	mittelsandiger Grob-sand	Ut3	mittel toniger Schluff	Tl	lehmiger Ton
Su	schluffiger Sand	Ut4	stark toniger Schluff		
Su2	schwach schluffiger Sand				
Su3	mittel schluffiger Sand	L	Lehm		
Su4	stark schluffiger Sand	Ls	sandiger Lehm		
Sl	lehmiger Sand	Ls2	schwach sandiger Lehm		
Slu	schluffig lehmiger Sand	Ls3	mittel sandiger Lehm		
Sl2	schwach lehmiger Sand	Ls4	stark sandiger Lehm		
Sl3	mittel lehmiger Sand	Lu	schluffiger Lehm		
Sl4	stark lehmiger Sand	Lt	toniger Lehm		
St	toniger Sand	Lt2	schwach toniger Lehm		
St2	schwach toniger Sand	Lt3	mittel toniger Lehm		
St3	mittel toniger Sand	Ltu	schluffig-toniger Lehm		
IB	Industrieboden	Lts	sandig-toniger Lehm		

Tabelle 3-4: Ausschnitt Parameterdatei altlpara.dbf



Microsoft Excel - altlpara.dbf

Datei Bearbeiten Ansicht Einfügen Format Extras Daten Fenster ? Acrobat

A944 = 3800

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W	X	Y	Z	AA	AB	AC	AD	AE	AF	AG
1	X	Y	LUPE	IS	JZ	MG	ZU	M1	M2	M3	KF1	KE1	KF2	KE2	KF3	KE3	GWR	HAN	BIL1	BIL2	BIL3	ISOT	KOP	R	W	WEXP	COLB	COLA	ASCI	GWL	ISOTH	GEL	COM
944	3800	600		39	7	1	34,0	10,0	0,0	0,0	1,0	-4	0,0		0,0		0,0	43,38	bil1			0	-1		43,507			1	Aquifer				
945	3800	600		39	7	2	30,0	4,0	0,0	0,0	1,0	-7	0,0		0,0		0,0	43,08	bil2			0	2		43,507			1	Aquifer				
946	3800	600		39	7	3	0,0	30,0	0,0	0,0	5,0	-4	0,0		0,0		0,0	40,88	bil3			0	1		43,425			1	Aquifer				
947	3900	600		40	7	1	34,0	10,0	0,0	0,0	1,0	-4	0,0		0,0		0,0	43,50	bil1			0	-1		43,591			1	Aquifer				
948	3900	600		40	7	2	30,0	4,0	0,0	0,0	1,0	-7	0,0		0,0		0,0	43,19	bil2			0	2		43,591			1	Aquifer				
949	3900	600		40	7	3	0,0	30,0	0,0	0,0	5,0	-4	0,0		0,0		0,0	40,88	bil3			0	1		43,494			1	Aquifer				
950	4000	600		41	7	1	34,0	10,0	0,0	0,0	1,0	-4	0,0		0,0		0,0	43,60	bil1			0	-1		43,674			1	Aquifer				
951	4000	600		41	7	2	30,0	4,0	0,0	0,0	1,0	-7	0,0		0,0		0,0	43,28	bil2			0	2		43,674			1	Aquifer				
952	4000	600		41	7	3	0,0	30,0	0,0	0,0	5,0	-4	0,0		0,0		0,0	40,89	bil3			0	1		43,563			1	Aquifer				
953	4100	600		42	7	1	34,0	10,0	0,0	0,0	1,0	-4	0,0		0,0		0,0	43,70	bil1			0	-1		43,757			1	Aquifer				
954	4100	600		42	7	2	30,0	4,0	0,0	0,0	1,0	-7	0,0		0,0		0,0	43,37	bil2			0	2		43,757			1	Aquifer				
955	4100	600		42	7	3	0,0	30,0	0,0	0,0	5,0	-4	0,0		0,0		0,0	40,89	bil3			0	1		43,632			1	Aquifer				
956	4200	600		43	7	1	34,0	10,0	0,0	0,0	1,0	-4	0,0		0,0		0,0	43,80	bil1			0	-1		43,840			1	Aquifer				
957	4200	600		43	7	2	30,0	4,0	0,0	0,0	1,0	-7	0,0		0,0		0,0	43,46	bil2			0	2		43,840			1	Aquifer				
958	4200	600		43	7	3	0,0	30,0	0,0	0,0	5,0	-4	0,0		0,0		0,0	40,90	bil3			0	1		43,701			1	Aquifer				
959	4300	600		44	7	1	34,0	10,0	0,0	0,0	1,0	-4	0,0		0,0		0,0	43,88	bil1			0	-1		43,923			1	Aquifer				
960	4300	600		44	7	2	30,0	4,0	0,0	0,0	1,0	-7	0,0		0,0		0,0	43,53	bil2			0	2		43,923			1	Aquifer				

altlpara

Bereit

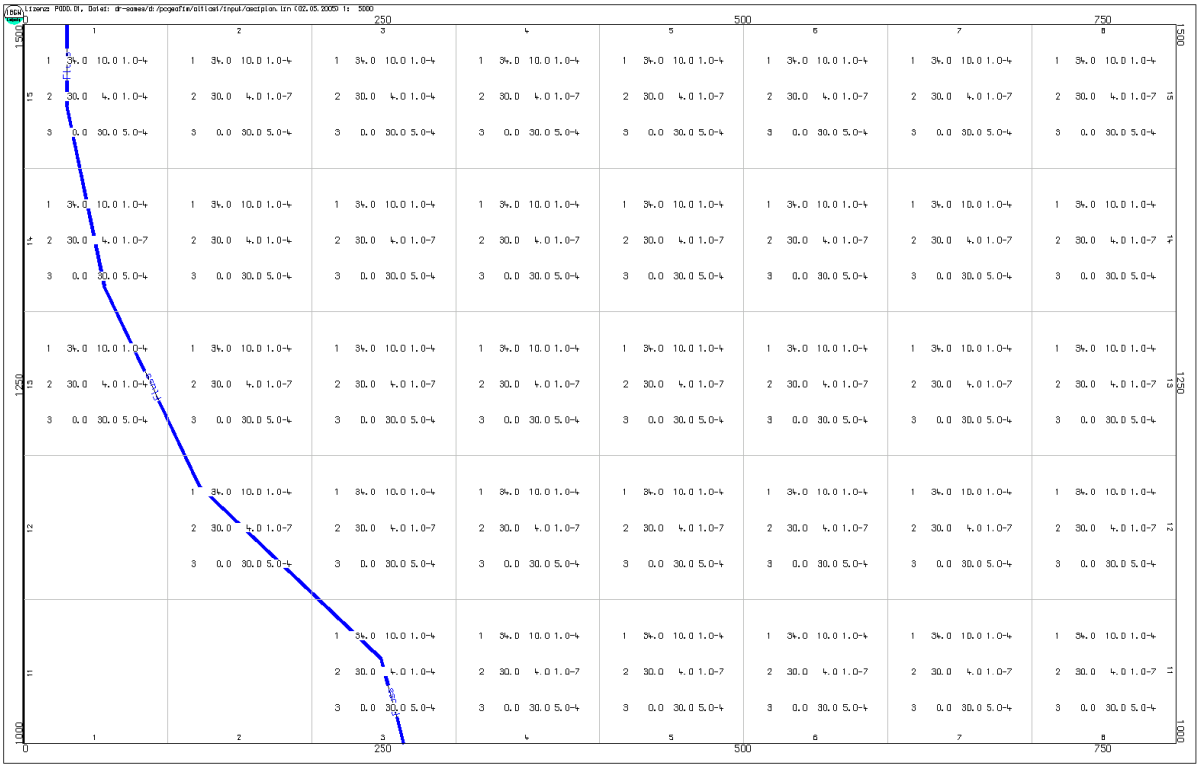


Abbildung 3-4: ASCII-Plan zur grafischen Darstellung der Parameterdatei (erstellt mit dem Tool Geopara)

3.3 Zeitabhängige Parameter und Störungen

Benötigt werden zeitabhängige Parameter und Störungen, wenn die Entwicklung von Tagebauen, das Schütten von Kippen, die Kiesgewinnung oder anderes zeitabhängig modelliert werden soll.

Es ist möglich, die Parameter ZU, M1, den k_f-Wert und die GW-Neubildung GWR zeitabhängig zu verändern. Entsprechend des Tagebaufortschritts können Modellgrundwasserleiter zeitvariabel vollständig entfernt werden bzw. als Kippen-Modellgrundwasserleiter neu aufgebaut werden.

Es muss eine zusammenfassende Datei {proj}parz.dbf für alle Lupen aufgebaut werden.

Tabelle 3-5: Zeitabh. Parameter/Störungen geoparz.dbf → home/database/{proj}parz.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*X*	N	7	Rechtswert (linke untere Ecke)
2	*Y*	N	7	Hochwert (linke untere Ecke)
3	*LUPE*	Z	1 | 2	finites Volumenelement in der Lupe *LUPE*
4	*IS*	N	3	Nummerierung in x-Richtung
5	*JZ*	N	3	Nummerierung in y-Richtung
6	*MG*	N	2	Nummerierung in z-Richtung vom Gelände zur Sohle
7	*ZU*	N	6.1	Elementunterkante in m NHN
8	*M1*	N	6.1	Mächtigkeit in m
9	*KF1*	N	6.1	K_f-Wert $KF1 \cdot 10^{KE1}$ in m/s
10	*KE1*	N	3	
11	*STOX*	N	7.5	zeitabhängige Störung in x-Richtung
12	*STOY*	N	7.5	zeitabhängige Störung in y-Richtung
13	*STOZ*	N	7.5	zeitabhängige Störung in z-Richtung (von *MG* zum nächsten darüberliegenden MGWL)
14	*GWR/IGWF*	N	4.1 | 4	Grundwasserneubildung oder Zehrung in l/(s*km^2) bzw. 10^{-9} m/s | Grundwasserneubildungsklasse
15	*HAN*	N	6.2	Spiegelhöhe in m NHN
16	*ISOT*	N	2	Isotherme
17	*ISOTH*	N	2	Isolinienthema
18	*GEL*	N	6.2	Gelände in m NHN
19	*NE*	N	5.3	Entwässerbare Porosität
20	*NS*	N	5.3	Porosität der stagnierenden Phase
21	*S0*	N	3.1	Speicherkoeffizient [-] $S0 \cdot 10^{S0EXP}$
22	*S0EXP*	N	2	
23	*MIG1*	N	5.3	Anfangskonzentration $MIG1 \cdot 10^{MIG1E}$ in RHO-MASS (**kg/m^3**, g/m^3, g/l, mg/l, µg/l, mmol/l, mol/l)
24	*MIG1E*	N	3	
25	*DATUM*	Datum	8	Zeitpunkt, ab dem die Änderung wirksam wird
	ZEIT	Zeit	8.1	
26	*GWL*	Z	4	Grundwasserleiterbezeichnung
26	*BODEN*	Z	4	Bodenart nach KA4, S. 142
27	*COM*	Z	20	Kommentar

Tabelle 3-6: Zeitabh. Parameter/Störungen geopa0z.dbf → home/database/{proj}pa0z.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	***DATUM***	**Datum**	**8**	**Zeitpunkt, ab dem die Änderung wirksam wird**
	ZEIT	**N**	**8.1**	
2	*X*	N	11.3	Rechtswert (linke untere Ecke)
3	*Y*	N	11.3	Hochwert (linke untere Ecke)
4	***LUPE***	**N**	**2**	**finites Volumenelement in der Lupe *LUPE***
5	***IS***	**N**	**3**	**Nummerierung in x-Richtung**
6	***JZ***	**N**	**3**	**Nummerierung in y-Richtung**
7	***MG***	**N**	**2**	**Nummerierung in z-Richtung vom Gelände zur Sohle**
8	*IDX*	N	10	IDX =100.000.000 · *LUPE* + 100.000 · *IS* + 100 · *JZ* + *MG*
9	***ZU***	**N**	**6.2**	**Elementunterkante in m NHN**
10	***M1***	**N**	**6.2**	**Mächtigkeit in m**
11	*GEL*	N	6.2	Geländeoberkante in m NHN
12	*ZO*	N	6.2	Elementoberkante in m NHN
13	***KF1***	**N**	**3.1**	**K_f-Wert *KF1* · 10^{KE1} in m/s**
14	***KE1***	**N**	**3**	
15	*STX*	N	3.1	Störung in x-Richtung *STX* · 10^{STXE}
16	*STXE*	N	3	
17	*STY*	N	3.1	Störung in y-Richtung *STY* · 10^{STYE}
18	*STYE*	N	3	
19	*STZ*	N	3.1	Störung in z-Richtung *STZ* · 10^{STZE} (von *MG* zum nächsten darüberliegenden MGWL)
20	*STZE*	N	3	
21	*LEAK*	N	3.1	Leakage-Faktor *LEAK* · 10^{LEAKE} (von *MG* zum nächsten darunterliegenden MGWL)
22	*LEAKE*	N	3	
23	*NE*	N	5.3	Entwässerbare Porosität
24	*NS*	N	5.3	Porosität der stagnierenden Phase
25	*S0*	N	5.3	Speicherkoeffizient [-] *S0* · 10^{S0E}
26	*S0E*	N	3	
27	*GWR* **|** *IGWF*	N	5.1 **|** 5	Grundwasserneubildung oder Zehrung^3 in l/(s*km^2) bzw. 10^{-9} m/s **|** Grundwasserneubildungsklasse
28	*HAN*	N	6.2	Anfangsspiegelhöhe in m
29	*MIG1AN*	N	5.3	Partialdichte 1*MIG1* · 10^{MIG1E} in RHO-MASS (**kg/m^3**, g/m^3, g/l, mg/l, µg/l, mmol/l, mol/l)
30	*MIG1EAN*	N	3	
31	*ISOT*	N	2	Isotherme (nur Stofftransport)
32	*ISOTH*	N	2	Isolinienthema (Festlegung von Themen für das Tool Geoisol)
33	*GWL*	Z		Grundwasserleiterbezeichnung
34	*BODEN*	Z		Bodenart nach KA 5, S. 142
35	*COM*	Z	20	Kommentar

Hinweise:

- Das Feld DATUM | Zeit muss gefüllt sein. Bei Vorgabe eines Datums bzw. einer Zeit, welche vor dem Berechnungsbeginn liegt, werden die zeitvariablen Parameter zum Be-

rechnungsbeginn realisiert. Die zeitabhängige Parameterdatei muss nach dem Feld DATUM | Zeit aufsteigend sortiert sein.

- Wenn die Felder ZU **und** M1 leer oder 0 **sowie mindestens ein** Störungsfeld gefüllt sind, werden zeitvariable Störungen realisiert.
- Wenn die Felder ZU **und** M1 leer oder 0 **sowie kein** Störungsfeld gefüllt sind, wird das Element entfernt.
- Wenn das Feld einer Störung leer oder 0 ist, werden die anderweitig vorgegebenen Störungen (Störungen in Felddatensätzen {proj}st_.dbf (Abschnitt 3.8) sowie die z-Störung der Anisotropie in der Steuerdatei) nicht verändert.
- Zeitvariable Änderungen der Parameter **und** der Störungen sind möglich (ZU, STO_#0).
- Wenn die Parameter n_e und n_s nicht explizit vorgegeben werden, erfolgt die Berechnung über den k_f-Wert (Hennig, 1966).
- Wenn die S_0-Vorgabe fehlt, wird $S_0 = 10^{-4}$ gesetzt.
- Die Felder HAN und GWR/IGWF müssen nicht zwangsläufig vorgegeben werden, die Werte werden bei Vorhandensein automatisch aus den Parameterdateien übernommen.
- Wird kein Wert für HAN vorgegeben, wird zunächst die berechnete Höhe des Grundwasserstands für die Zelle ermittelt. Liegt dieser unterhalb ZU, wird HAN = ZU gesetzt.

3.4 Lupen

Im Programmsystem PCGEOFIM kann das Gitternetz (globales Grundraster in Datei {proj}para.dbf mit Hilfe von Lupen horizontal (2D) bzw. horizontal und / oder vertikal (3D) verfeinert werden. In der Abbildung 3-5 ist die Lage einer 2D-Lupe zu sehen, die das Gitternetz in der Nähe eines angenommenen Unfalls verfeinert, um den Transport des Schadstoffes genauer modellieren zu können. Die Abbildung 3-6 zeigt die Lage einer 3D-Lupe unter einer Deponie. Weitere Gründe für die Erstellung von Lupen sind:

- Eine genauere Lokalisierung von Brunnen im Aquifer ermöglicht eine exaktere Berechnung der Standrohrspiegelhöhe im Brunnen bzw. der Förderrate des Brunnens.
- Eine exaktere Vorgabe der Randkontur ermöglicht eine den praktischen Gegebenheiten adäquatere Vorgabe von Randbedingungen.
- Die Strömung im Aquifer wird ganz wesentlich von der Randkontur der Standgewässer geprägt, so dass eine genaue Abbildung dieser Kontur unbedingt erforderlich ist.
- Eine dem Stofftransport angemessene vertikale Diskretisierung gewährleistet die korrekte Berechnung.

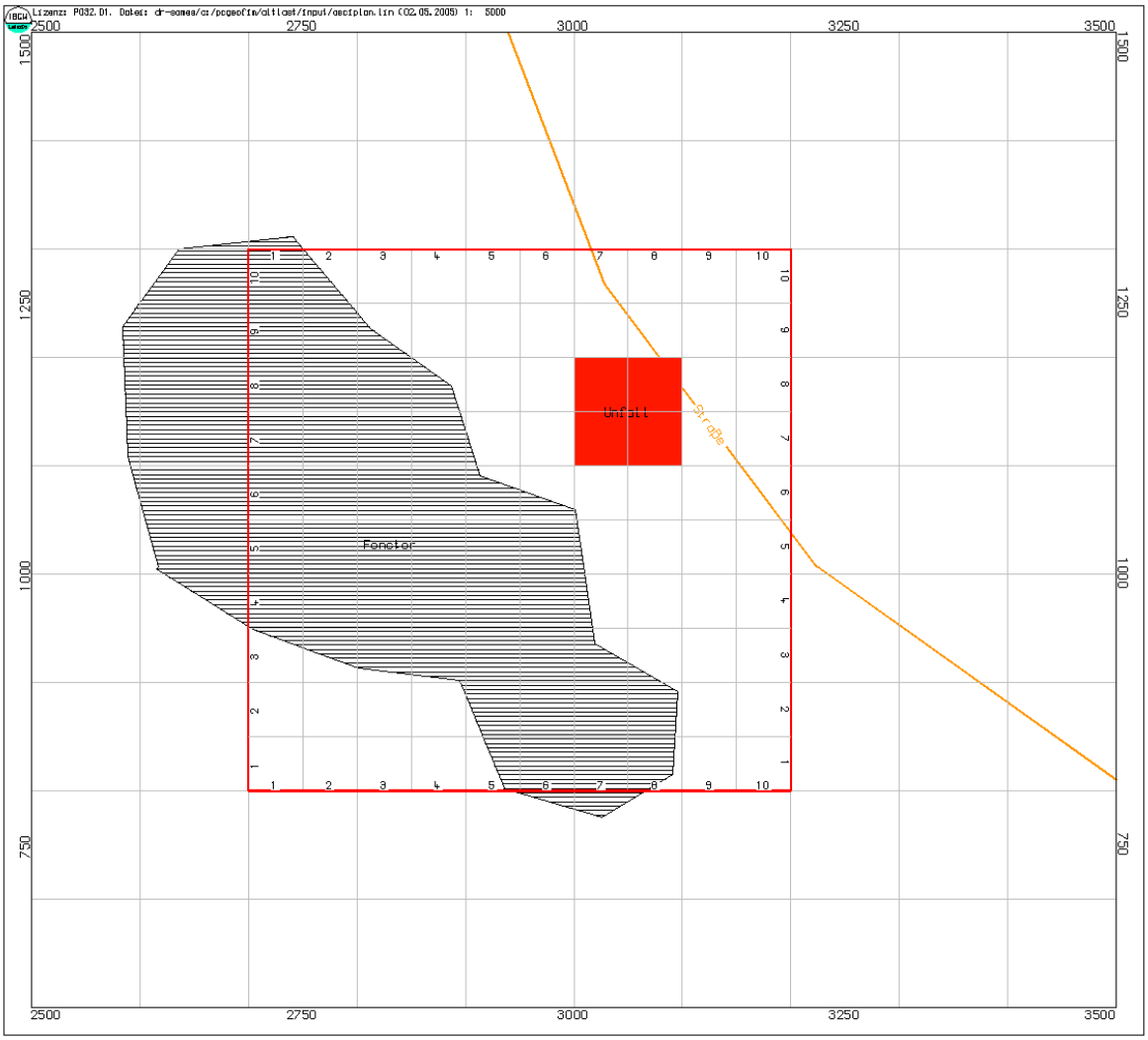


Abbildung 3-5: Lage der Lupe "Unfall" im Testbeispiel Altlast

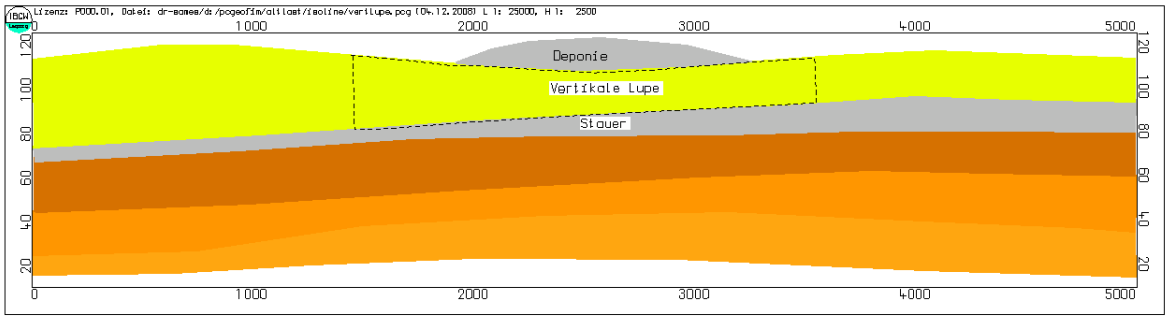


Abbildung 3-6: Vertikale Lupe unter einer Deponie

Tabelle 3-7: 2D-Lupendefinition geolup2d.dbf → home/database/{proj}lupe.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*KZ*	Z	1 | 2	Lupenkennzeichen[1]
2	*NAME*	Z	8	Lupenname
3	*ITEIL*	N	2	Teilung in x-Richtung[2]
4	*JTEIL*	N	2	Teilung in y-Richtung[2]
5	*I1*	N	3	von *IS* = *I1*
6	*D1*	Z	1	**:**
7	*I2*	N	3	bis *IS* = *I2*
8	*J1*	N	3	von *JZ* = *J1*
9	*D2*	Z	1	**:**
10	*J2*	N	3	bis *JZ* = *J2*
11	*COM*	Z	20	Kommentar

[1]Zulässig sind die Zeichen 1, 2, ..., 9, a, b, ..., v für die Länge 1 und 1, 2, 3, ..., 99 für die Länge 2.

[2]Zulässige Teilung: 1, 2, ..., 32

Tabelle 3-8: 3D-Lupendefinition geolup3d.dbf[1] → home/database/{proj}lupe.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*KZ*	Z	1 | 2	Lupenkennzeichen[2]
2	*NAME*	Z	8	Lupenname
3	*ITEIL*	N	2	Teilung in x-Richtung[3]
4	*JTEIL*	N	2	Teilung in y-Richtung[3]
5	*KTEIL*	N	2	Teilung in z-Richtung[3]
6	*I1*	N	3	von *IS* = *I1*
7	*D1*	Z	1	:
8	*I2*	N	3	bis *IS* = *I2*
9	*J1*	N	3	von *JZ* = *J1*
10	*D2*	Z	1	:
11	*J2*	N	3	bis *JZ* = *J2*
12	*K1*	N	2	von *K* = *K1*
13	*D3*	Z	1	:
14	*K2*	N	2	bis *K* = *K2*
15	*COM*	Z	20	Kommentar

[1] Die 3D-Lupe ist eine kostenpflichtige Option und nicht in der Standardlizenz verfügbar

[2] Zulässig sind die Zeichen 1, 2, ..., 9, a, b, ..., v für die Länge 1 und 1, 2, 3, ..., 99 für die Länge 2.

[3] Zulässige Teilung: 1, 2, ..., 32

Hinweise:

- Aus der Definition geht hervor, dass sich Lupen mit den Lupengrenzen immer am globalen Raster orientieren. Verschiedene Lupen dürfen sich aber überschneiden.
- Die Sortierung der Lupen erfolgt nach dem Schema 1, 2, ..., 9, a, b, ..., v | 1, 2, ..., 99, daraus ergibt sich auch die Reihenfolge der Lupen bei Überschneidungen.
- Beim Zusammentreffen von zwei Lupen muss die Unterteilung passen:

  $ITEIL_m = (1 \mid 2 \mid 3 \ldots) * ITEIL_n$

  $JTEIL_m = (1 \mid 2 \mid 3 \ldots) * JTEIL_n$

  $KTEIL_m = (1 \mid 2 \mid 3 \ldots) * KTEIL_n$
- Die Namen der Parameterdateien der Lupen werden nach folgendem Schema vergeben:
  {proj}par0.dbf | {proj}para.dbf → Grundraster
  {proj}par1.dbf …{proj}parv.dbf | {proj}para.d01 ...{proj}para.d99 → Lupen

3.5 Konvertierung Modell mit maximal 31 Lupen in Modell mit maximal 99 Lupen

Eine solche Konvertierung ist notwendig, wenn durch Einführung neuer Lupen die Maximalzahl 31 überschritten wird oder wenn zum neuen Parametermodell übergegangen werden soll.

Mit Hilfe des Tools Co31to99 ist diese Konvertierung sehr leicht durchzuführen. Das gesamte Modell muss sich im Verzeichnis home\{projekt}\database befinden („path“ gesetzte Dateien werden nicht konvertiert). Alle dbf-Dateien des Projekts werden in das Verzeichnis home\{projekt}\database.99 kopiert und alle Lupenfelder von Einzeichen- auf Zweizeichenlänge erweitert und die Parameterdateien umbenannt:

{proj}par0.dbf in {proj}para.dbf, {proj}par1.dbf in {proj}para.d01, …,
{proj}para.dbf in {proj}para.d10, … {proj}parv.dbf in {proj}para.d31

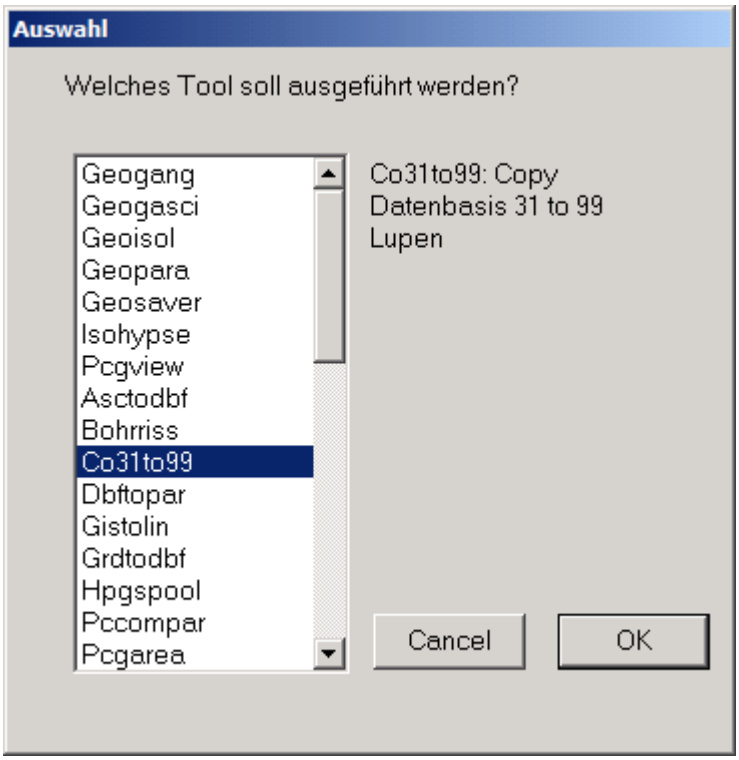


Abbildung 1: Aktivierung des Tools Co31to99

Tabelle 3-9: Vergleich Parameterdatei mit maximal 31 bzw. 99 Lupen

home\hgmnsa12\database	**home\hgmnsa12\database.99**
6.121 hgmn2012.dbf	6.121 hgmn2012.dbf
44.190 hgmnbrun.dbf	44.450 hgmnbrun.dbf
1.263.475 hgmnevap.dbf	1.263.616 hgmnevap.dbf
32.017 hgmngewa.dbf	32.314 hgmngewa.dbf
20.879 hgmngrup.dbf	21.216 hgmngrup.dbf
4.784.116 hgmngwf.dbf	4.832.925 hgmngwf.dbf
5.410 hgmnimas.dbf	5.410 hgmnimas.dbf
906.622 hgmnklim.dbf	907.264 hgmnklim.dbf
3.210 hgmnlea0.dbf	3.210 hgmnleak.dbf
1.461 hgmnlupe.dbf	1.490 hgmnlupe.dbf
703.677 hgmnlysi.dbf	704.512 hgmnlysi.dbf
14.422 hgmnmmas.dbf	14.422 hgmnmmas.dbf
32.832.186 hgmnpar0.dbf	5.823.218 hgmnpara.d01
5.804.318 hgmnpar1.dbf	32.118.486 hgmnpara.d02
32.013.186 hgmnpar2.dbf	97.084.998 hgmnpara.d03
96.793.458 hgmnpar3.dbf	12.096.102 hgmnpara.d04
12.055.922 hgmnpar4.dbf	20.828.914 hgmnpara.d05
20.761.294 hgmnpar5.dbf	34.827.622 hgmnpara.d06
34.711.922 hgmnpar6.dbf	8.231.014 hgmnpara.d07
8.204.554 hgmnpar7.dbf	3.379.142 hgmnpara.d08
3.367.922 hgmnpar8.dbf	6.557.702 hgmnpara.d09
6.535.922 hgmnpar9.dbf	2.334.454 hgmnpara.d10
2.326.954 hgmnpara.dbf	706.262 hgmnpara.d11
703.922 hgmnparb.dbf	10.189.150 hgmnpara.d12
10.156.810 hgmnparc.dbf	11.852.414 hgmnpara.d13
11.814.794 hgmnpard.dbf	1.741.702 hgmnpara.d14
1.735.922 hgmnpare.dbf	3.379.142 hgmnpara.d15
3.367.922 hgmnparf.dbf	5.064.742 hgmnpara.d16
5.047.922 hgmnparg.dbf	2.656.742 hgmnpara.d17
2.647.922 hgmnparh.dbf	23.195.286 hgmnpara.d18
23.121.186 hgmnpari.dbf	19.560.902 hgmnpara.d20
19.495.922 hgmnpark.dbf	9.736.262 hgmnpara.d21
9.703.922 hgmnparl.dbf	9.182.422 hgmnpara.d22
9.151.922 hgmnparm.dbf	19.175.622 hgmnpara.d23
19.111.922 hgmnparn.dbf	10.189.214 hgmnpara.d24
10.156.874 hgmnparo.dbf	14.936.174 hgmnpara.d25
14.888.154 hgmnparp.dbf	10.236.432 hgmnpara.d26
10.203.942 hgmnparq.dbf	4.901.464 hgmnpara.d27
4.885.294 hgmnparr.dbf	8.189.562 hgmnpara.d28
8.163.570 hgmnpars.dbf	3.921.562 hgmnpara.d29
3.908.626 hgmnpart.dbf	32.939.826 hgmnpara.dbf
76.834 hgmnparz.dbf	77.308 hgmnparz.dbf
93.216.082 hgmnpebe.dbf	93.216.768 hgmnpebe.dbf
3.126.428 hgmnpest.dbf	3.144.232 hgmnpest.dbf
5.044.759 hgmnrabe.dbf	5.077.726 hgmnrabe.dbf
3.923.602 hgmnrast.dbf	3.934.496 hgmnrast.dbf
535.390 hgmnrest.dbf	535.552 hgmnrest.dbf
310 hgmnrmas.dbf	310 hgmnrmas.dbf
6.050 hgmnsa12.dbf	6.050 hgmnsa12.dbf
357.817 hgmnschl.dbf	360.846 hgmnschl.dbf
2.675 hgmnsmas.dbf	2.675 hgmnsmas.dbf
612 hgmnstx0.dbf	2.862 hgmnstx.d04
2.862 hgmnstx4.dbf	1.074 hgmnstx.d06
1.074 hgmnstx6.dbf	612 hgmnstx.dbf
612 hgmnsty0.dbf	2.862 hgmnsty.d04
2.862 hgmnsty4.dbf	1.074 hgmnsty.d06
1.074 hgmnsty6.dbf	612 hgmnsty.dbf
743 hgmnstz0.dbf	743 hgmnstz.dbf
1.318.165 hgmnterr.dbf	1.366.974 hgmnterr.dbf
16.675 hgmnzeit.dbf	16.675 hgmnzeit.dbf

3.6 Konvertierung Modell mit maximal 99 Lupen in das erweiterte Parametermodell

Wenn der Anwender ein Modell mit 99 Lupen im Einzelschrittmodus (*RUN* = „n“ in der Steuerdatei) startet, für alle Lupen Parameterdateien existieren und bei zeitabhängigen Parametern der Berechnungszeitraum die gesamte Zeitspanne der zeitabhängigen Parameter umfasst, wird der Anwender gefragt:

„Wollen Sie vom alten zum neuen Parametermodell wechseln (j/N)?“

Wenn der Anwender die Frage mit „ja“ beantwortet, werden alle Parameterdateien, optionale Felddatensätze sowie die zeitabhängigen Parameter konvertiert (siehe Tabelle 3-10). Wenn der Anwender das nächste Mal den Simulator Geofim startet, werden die erweiterten Parameterdateien eingelesen. Das Parametermodell mit maximal 99 Lupen wird nicht mehr benötigt und die Dateien sollten aus dem Database-Ordner entfernt werden.

S0 wird immer 1e-3 gesetzt, falls keine Vorgabe durch den Anwender in den Eingabedateien erfolgt. Die Steuerworte #LEAKAGE, #S0 und #NE in der Steuerdatei werden bei Verwendung des erweiterten Parametermodells nicht berücksichtigt und können deaktiviert werden.

Tabelle 3-10: Vergleich Parametermodell mit 99 Lupen mit erweitertem Parametermodell

Parametermodell mit max. 99 Lupen	Erweitertes Parametermodell
32.939.826 hgmnpara.dbf	24.651.034 hgmnpa00.dbf
5.823.218 hgmnpara.d01	4.329.574 hgmnpa01.dbf
32.118.486 hgmnpara.d02	24.115.174 hgmnpa02.dbf
97.084.998 hgmnpara.d03	66.764.134 hgmnpa03.dbf
12.096.102 hgmnpara.d04	9.202.694 hgmnpa04.dbf
20.828.914 hgmnpara.d05	15.486.454 hgmnpa05.dbf
34.827.622 hgmnpara.d06	26.496.774 hgmnpa06.dbf
8.231.014 hgmnpara.d07	6.060.814 hgmnpa07.dbf
3.379.142 hgmnpara.d08	2.570.854 hgmnpa08.dbf
6.557.702 hgmnpara.d09	4.989.094 hgmnpa09.dbf
2.334.454 hgmnpara.d10	1.718.974 hgmnpa10.dbf
706.262 hgmnpara.d11	537.334 hgmnpa11.dbf
10.189.150 hgmnpara.d12	7.407.334 hgmnpa12.dbf
11.852.414 hgmnpara.d13	8.616.454 hgmnpa13.dbf
1.741.702 hgmnpara.d14	1.325.094 hgmnpa14.dbf
3.379.142 hgmnpara.d15	2.570.854 hgmnpa15.dbf
5.064.742 hgmnpara.d16	3.853.254 hgmnpa16.dbf
2.656.742 hgmnpara.d17	2.021.254 hgmnpa17.dbf
23.195.286 hgmnpara.d18	16.970.374 hgmnpa18.dbf
19.560.902 hgmnpara.d20	14.881.894 hgmnpa20.dbf
9.736.262 hgmnpara.d21	7.407.334 hgmnpa21.dbf
9.182.422 hgmnpara.d22	6.985.974 hgmnpa22.dbf
19.175.622 hgmnpara.d23	14.588.774 hgmnpa23.dbf
10.189.214 hgmnpara.d24	7.407.334 hgmnpa24.dbf
14.936.174 hgmnpara.d25	10.998.054 hgmnpa25.dbf
10.236.432 hgmnpara.d26	7.441.684 hgmnpa26.dbf
4.901.464 hgmnpara.d27	3.704.404 hgmnpa27.dbf
8.189.562 hgmnpara.d28	5.953.642 hgmnpa28.dbf
3.921.562 hgmnpara.d29	2.963.818 hgmnpa29.dbf
77.308 hgmnparz.dbf	73.138 hgmnpa0z.dbf

3.7 Lokale Netzverfeinerung

Mit Hilfe der lokalen Netzverfeinerung werden ausgewählte finite Volumenelemente horizontal in 9, 25, 49 oder 81 finite Volumina unterteilt. Auf diese Art und Weise können die Spiegelhöhen in der unmittelbaren Umgebung von Vertikalfilterbrunnen und an Messstellen genauer berechnet werden. Die Implementierung erfolgt analog zur 2D-Lupe aber mit dem Unterschied, dass nur ausgewählte finite Volumina verfeinert werden.

In der globalen Parameterdatei {proj}par0.dbf | {proj}para.dbf bzw. in den Parameterdateien für die Lupen {proj}par{l}.dbf | {proj}para.d{ll} werden die ausgewählten finiten Volumenelemente durch das **Zeichen „x"** im **Feld *R*** gekennzeichnet. Bei Verwendung der erweiterten Parameterstruktur mit der Bezeichnung {proj}pa00.dbf für das Grundraster sowie {proj}pa{ll}.dbf für die Lupen erfolgt die Vorgabe im Feld ***LNVF***, ebenfalls durch Eintragen des Zeichens „**x**“. Wirksam wird die lokale Netzverfeinerung jedoch erst, wenn in der Geofim-Steuerdatei {projekt}.dbf die Zeile **#Lokale-Netzverf**. aktiviert ist und im **Feld *INTEGER*** eine **3**, **5, 7** oder **9** (identische Teilung in x- und in y-Richtung) eingetragen ist. Dies sind alle Änderungen in der Datenbasis, um die lokale Netzverfeinerung einzusetzen.

Hinweis: Die lokale Netzverfeinerung hat nicht den Zweck eine 2D-Lupe zu ersetzen. Insbesondere, wenn flächenhaft oder mehrere übereinanderliegende MGWL feiner diskretisiert werden sollen, ist die Verwendung einer Lupe angezeigt.

C:\WINNT\System32\cmd.exe

Datensätze Verwaltung Felder Suchen Ende

KEYWORD	JNR	DATUM	UNIT	INTEGER	REAL	EXP	COM
#RUN	n	. .		0	0.000	0	Batch-Mode
#DIMENSION		. .		0	0.000	0	M, N, L automatisch
#LUPE	n	. .		0	0.000	0	-->{proj}lupe.dbf
#LOKALE-NETZV.		. .		3	0.000	0	lokale Netzverfeiner
#RANDOM-WALK	n	. .		1	0.000	0	nrw=10000,pmass=0 kg
#MIGRATION	n	. .		1	0.000	0	ein Migrant
#AUSSCHNITT	n	. .		0	0.000	0	-->{proj}auss.dbf
#ZEITEINHEIT		. .	k	0	0.000	0	Eingabe Kalender

Abbildung 3-7: Lokale Netzverfeinerung

Für das Testbeispiel Altlast wurde eine lokale Netzverfeinerung für alle finiten Volumina vorgenommen, die entweder einen Vertikalfilterbrunnen oder eine Messstelle enthalten. Die folgende Abbildung zeigt das Ergebnis.

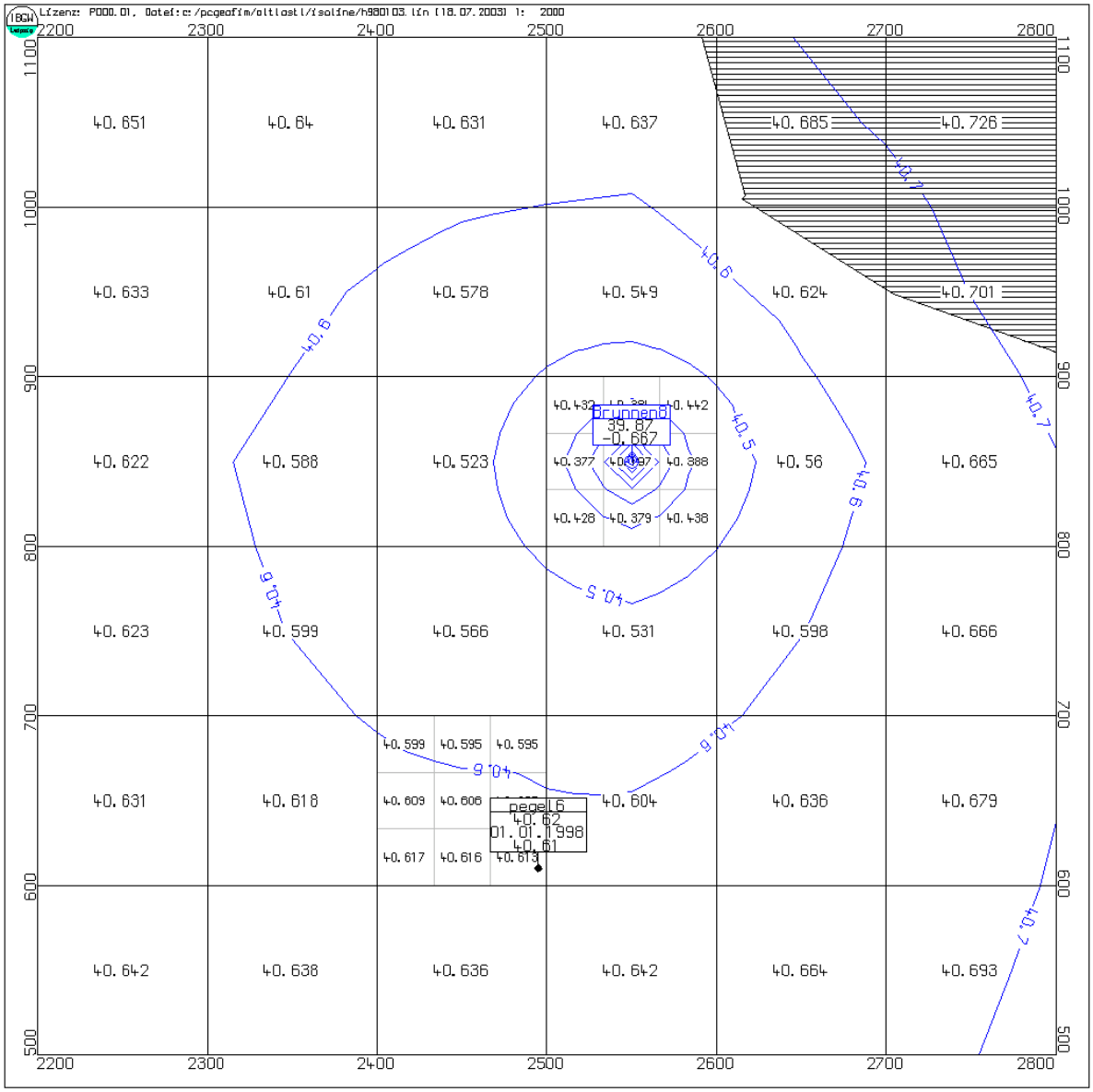


Abbildung 3-8: Einsatz der lokalen Netzverfeinerung im Testbeispiel Altlast

3.8 Felddatensätze

Im Programmsystem PCGEOFIM besteht die Möglichkeit, die Parameter n_e, n_s, S_0, den Leakage-Faktor, die Störungen in x-, y- und z-Richtung (als Faktoren der KF-Werte), die Anfangsbedingungen für die Transportberechnung und die longitudinale Dispersivität als Felddatensatz (Eingabe der Parameter in Feldern W und WEXP) vorzugeben.

Tabelle 3-11: Struktur Felddatensatz geofeld.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*KLO*	Z	1	**(**
2	*I1*	N	3	von *IS* = *I1*
3	*DP1*	Z	1	**:**
4	*I2*	N	3	bis *IS* = *I2*
5	*KO1*	Z	1	**,**
6	*J1*	N	3	von *JZ* = *J1*
7	*DP2*	Z	1	:
8	*J2*	N	3	bis *JZ* = *J2*
9	*KO2*	Z	1	**,**
10	*K1*	N	2	von *MG* = *K1*
11	*DP3*	Z	1	**:**
12	*K2*	N	2	bis *MG* = *K2*
13	*KLC*	Z	1	**)**
14	*W*[1]	N	7.3	Feld(*IS,JZ,MG*) = $W \cdot 10^{WEXP}$ für die finiten Volumina
15	*WEXP*[1]	N	3	*I1<=IS<=I2, J1<=JZ<=J2, K1<=MG<=K2*
16	*COM*	Z	20	Kommentar

[1] Die Feldnamen *WERT* und *EXP* sind ebenfalls zulässig.

Vorgehensweise

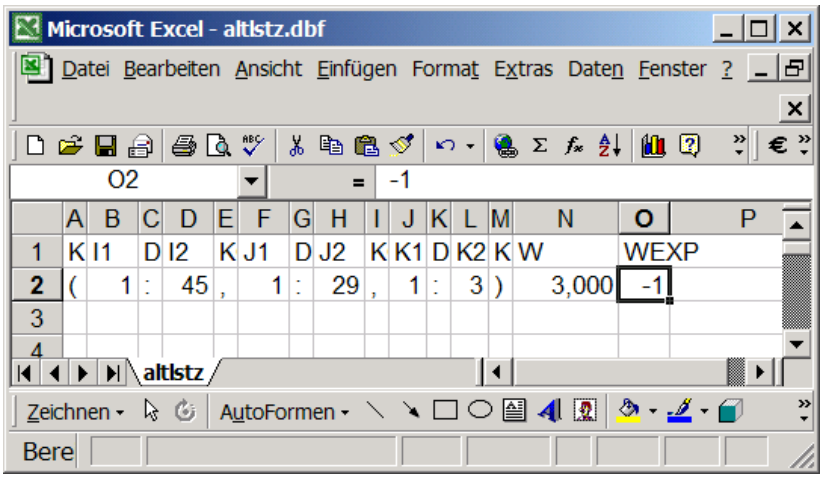
- In jeder Zeile wird ein Bereich festgelegt durch Vorgabe von
  - *I1 - I2* : Bereichsanfang und -ende in x-Richtung,
  - *J1 - J2* : Bereichsanfang und -ende in y-Richtung,
  - *K1 - K2* : Grundwasserleiter K1 bis Grundwasserleiter K2.
- Die letzten Spalten enthalten den entsprechenden Wert (Mantisse und Exponent).
- Die übrigen Spalten müssen analog der ersten Zeile ausgefüllt werden (*KLO* = öffnende Klammer, *DPi* = Doppelpunkt, *KOi* = Komma, *KLC* = schließende Klammer; i=1, 2, 3).
- Die Bereiche dürfen überlappend vorgegeben werden, der zuletzt eingegebene Parameter überschreibt den vorhergehenden.
- Wenn eine Vorgabe für ein nichtexistierendes finites Volumen erfolgt, wird die Vorgabe ignoriert.
- Wenn Lupen existieren und für die Parameter nur global Vorgaben existieren, werden diese auch in die Lupenfelder übernommen.

Mit Hilfe der Faktoren für die Störungen können der Tensor-Charakter der Durchlässigkeit, Barrieren, bevorzugte Fließrichtungen usw. modelliert werden. Dabei beschreiben die Datenbanken

{proj}stx.dbf den Übergang von Element (is,js,mg) → (is+**1**,jz,mg)
{proj}sty.dbf den Übergang von Element (is,jz,mg) → (is,jz+**1**,mg)
{proj}stz.dbf den Übergang von Element (is,jz,mg) → (is,jz,mg-**1**)

mit mg = 1: oberster GWL.

Tabelle 3-12: Felddatensatz altlstz.dbf



Hinweise:

- Jeder nachfolgende Datensatz überschreibt den zuvor eingegebenen
- Beim Vorhandensein der Datei {proj}stz.dbf wird die Vorgabe der Anisotropie (in der Steuerdatei) in den vorgegebenen Bereichen von den z-Störungen überschrieben
- **Nullwerte für Störungen** führen dazu, dass Elemente nicht mehr gekoppelt sind (im Unterschied zur Vorgabe in den Parameterdateien!)
- Felddatensätze für 31 Lupen haben die Bezeichnung {proj}{fff}{l}.dbf mit proj gleich maximal vier Zeichen Projekt, fff maximal drei Zeichen Feldname und l gleich Lupenbezeichnung,

  z. B. Vorgabe von n_e: altlne.dbf (globales Raster) und altlne1.dbf (Lupe 1)
- Felddatensätze für 99 Lupen haben die Bezeichnung {proj}{ffff}.dbf global und {proj}{ffff}.d{ll} für Lupen mit proj gleich maximal vier Zeichen Projekt, ffff maximal vier Zeichen Feldname und ll gleich Lupenbezeichnung,

  z. B. Vorgabe von n_e: altlne.dbf (globales Raster) und altlne.d01 (Lupe 1)
- Wenn die Felder n_e und n_s nicht vorgegeben werden oder wenn nicht alle n_e-Werte bzw. alle n_s-Werte eingegeben wurden, werden n_e und n_s mit Hilfe des k_f-Wertes ermittelt (Hennig, 1966):

$$n_e = \begin{cases} n_{e\,min} & k_f < 1{,}26\ 10^{-8} \\ 0{,}4 + 0{,}05\ \lg(k_f) & k_f \geq 1{,}26\ 10^{-8} \end{cases} \qquad (1)$$

$$n_s = \begin{cases} n_{s\,max} & k_f < 1{,}26\ 10^{-8} \\ -0{,}16 - 0{,}08\ \lg(k_f) & k_f \geq 1{,}26\ 10^{-8}\ (\text{falls } n_s < 0 \rightarrow n_s = 0) \end{cases} \qquad (2)$$

Tabelle 3-13: Zahlenwerte für die entwässerbare, die stagnierende und die Gesamtporosität

k_f in m/s	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}	10^{-9}
n_e	0,300	0,250	0,200	0,150	0,100	0,050	0,005	0,005
n_s	0,000	0,080	0,160	0,240	0,320	0,400	0,460	0,460
n_w	0,300	0,330	0,360	0,390	0,420	0,450	0,465	0,465

Bei Vorgabe eines Leakage-Faktors ist zu beachten, dass die Vorgabe immer von mg→mg+1 erfolgt. Die folgende Abbildung soll noch einmal die Wirkungsweise verdeutlichen.

Modell: 2 Grundwasserleiter durch Fenster verbunden, ansonsten durch Stauer getrennt

GWL 1	GWL 1
GWL 2	GWL 2
→ ohne Leakagefaktor Modell mit 3 Schichten, für Stauer kleinen k_f-Wert (m*n*3 Elemente)	→ mit Leakagefaktor Stauer wird durch Leakagefaktor von GWL 1 nach GWL 2 ersetzt (z.B. $L_k=10^{-9}$) (m*n*Anzahl Fensterelemente)

Die Berechnung des Volumenstroms wird mit Leakage-Faktor wie folgt durchgeführt:

$$q_{1\rightarrow 3} = L_k \cdot A \frac{h_1 - h_3}{\Delta z}$$

4 Das Signalmodell

Das Signalmodell beschreibt alle inneren und äußeren Randbedingungen entweder zeitkonstant oder zeitabhängig. Auch die Grundwasserneubildung gehört zum Signalmodell. Im Programmsystem PCGEOFIM implementiert sind Randbedingungen 1., 2. und 3. Art mit Beschränkungen, Randbedingung Tagebau, obere Berandung, Überflutung, Pegel, Vertikal- und Horizontalfilterbrunnen, Brunnenriegel, Fließ- und Standgewässer.

4.1 Kodierung von Randstamm- und Randbewegungsdaten

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie Randstamm- und Randbewegungsdaten vorgegeben werden. Im Anschluss werden einige Randbedingungen des Testbeispiels Altlast vorgestellt und einige Hinweise gegeben, die bei der Kodierung beachtet werden sollten.

Tabelle 4-1: Struktur der Randstammdaten georast.dbf → home/database/{proj}rast.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
NAME	Z	3	Name der Randbedingung[1]
LUPE	Z	1 | 2	Lupe
IS	N	3	Nummerierung in x-Richtung
JZ	N	3	Nummerierung in y-Richtung
MG	N	2	Nummerierung in z-Richtung
ART	Z	1	Randbedingungsart b-Brunnen; h-Horizontalfilterbrunnen; f-Fluss; m-Migrations-RB; o-obere Berandung; p-Modellpegel; r-Brunnenriegel; s-Standgewässer.; t-Tagebau; u-Überflutung; 1, 2, 3-1. bis 3. Art
STEU	Z	1	Vorgabe der Steuerung oder Bilanzklasse oder leer - bei Brunnen: q oder h, - bei Standgewässern im globalen Datensatz: q oder h, - bei Standgewässern in lokalen Datensätzen: 0...9, a...z (Name der limnologischen Bilanzklasse, wird bei BILG ≠ leer ignoriert) - bei Fließgewässern im globalen Datensatz: q oder leer
ZEIT	Z	1	Zeitabhängigkeit der Randwerte (k - zeitkonstant, p - Polygon, s - Stufe)
QMIN	N	6.3	$Q_{min} \cdot 10^{QMINE}$ - Schranke für Ein- und Ausspeisung bei RB 1. und 3. Art, Tagebau, Brunnen und Standgewässern in Einheit *Q-MASS* (siehe Steuerdatei); Vorgabe Sonderfall bei Migrations-RB „m“
QMINE	N	2	
QMAX	N	6.3	
QMAXE	N	2	
HMIN	N	6.1	Begrenzung der Spiegelhöhen für RB 2. Art, Brunnen und Standgewässer
HMAX	N	6.1	
LA	N	4	*ART* = b - mittlerer Brunnenabstand; *ART* = f - Länge Flussabschnitt; *ART* = r - Länge Brunnenriegel; *ART* = s - Entfernung Zellenmittelpunkt zum Seeufer bei horizontaler Kopplung, 0 oder leer bei vertikaler Kopplung
*KFK*³	N	3.1	$KFK \cdot 10^{KEK}$ in m/s: *ART* = b, h, r - k_f-Wert im brunnennahen Raum,
KEK	N	3	*ART* = f, s, u, RB 3. Art - Kolmation, *ART* = f im globalen Datensatz: $F_{Exfiltration}$; Rohrrauigkeit im globalen Datensatz bei ART = h
D_R	N	4.2	*ART* = f, s, u, RB 3.Art: Dicke der kolmatierten Schicht in m, *ART* = b, h, r - Brunnenradius in m
FL	N	8.1	*ART* = f, s, u, RB 3. Art - Fläche in m², *ART* = b, h, r - Filterlänge in m
SOHLE	N	6.1	*ART* = f, s, RB 3. Art - Sohle in m NHN, *ART* = b, h, r - Filterunterkante in m NHN
BILG	Z	8	*ART* = s - Name der limnologischen Bilanzklasse
X	N	7	Standort Randbedingung (nur zulässig für *ART*=1, 2, 3, b_{global}, f_{lokal}, o, p, t, u)
Y	N	7	
NAME_EXT	Z	16	Externer Name der Randbedingung
RAND-WERT	N	8.3	Randwert Q in *Q-MASS* oder H in m NHN bei zeitkonstanten Randwerten[2]
COM	Z	20	Kommentar

[1] Es wird empfohlen den Anfangsbuchstaben wie folgt zu wählen: b - Vertikalfilterbrunnen, h - Horizontalfilterbrunnen, f - Fluss, m - Migrationsrandbedingung, o - obere Berandung, p - Modellpegel, r

- Brunnenriegel, s - See, u - Überflutung, sonstige Buchstaben für RB 1., 2. und 3. Art sowie RB Tagebau

[2] Die Randstammdatendatei enthält das Feld *RANDWERT* nur zur Information. Es ermöglicht eine einfache Erstellung der Randbewegungsdaten {proj}rabe.dbf für alle zeitkonstanten Randbedingungen.

[3] Für Horizontalfilterbrunnen gelten folgende Bestimmungen: Im globalen Datensatz wird die Rohrrauigkeit des Brunnenrohres festgelegt. Ein Wert von 10^{-3} entspricht einem Geschwindigkeitsbeiwert von ca. 82 $m^{1/3}/s$ (zur Umrechnung siehe auch Teil Theorie der Dokumentation) und darf $3{,}1 \cdot 10^{-4}$ nicht unterschreiten ($\approx$ 100 $m^{1/3}/s$). Fehlt die Angabe des Wertes oder wird dieser unterschritten, wird dieser Wert durch Geofim gesetzt. Für die Leitwertberechnung (Anbindung an den Aquifer) werden die Angaben in den lokalen Datensätzen verwendet. Fehlt die Angabe des Wertes, wird durch Geofim ein Wert von $5 \cdot 10^{-5}$ gesetzt.

In den Randstammdaten kann der Ort der Wirkung der Randbedingungen vorgegeben werden. Außerdem kann jeder Randbedingung ein bis zu 15 Zeichen langer Name zugeordnet werden. Im Falle der Vorgabe von lokaler Netzverfeinerung bestimmt der Ort die Lage der Randbedingung. In den Isolinienplänen wird die Randbedingung dokumentiert, wenn der externe Name nicht leer ist.

Hinweis: Brunnenstandorte können wie bisher in der Datei {proj}brun.dbf definiert werden. Standorte von Vertikalfilterbrunnen können aber auch in der Datei {proj}rast.dbf vorgegeben werden.

Tabelle 4-2: Struktur der Randbewegungsdaten georabe.dbf → home/database/{proj}rabe.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
NAME	Z	3	Name der Randbedingung
LUPE	Z	1 | 2	Lupe
IS	N	3	Nummerierung in x-Richtung
JZ	N	3	Nummerierung in y-Richtung
MG	N	2	Nummerierung in z-Richtung
DATUM	Datum	8	Zeitstützstelle (leer oder Datum oder Zeitpunkt)
ZEIT	N	8.1	
NB	N	2	Anzahl Brunnen (0 bedeutet: Brunnen außer Betrieb)
HZ	Z	1	a, h, i, q, r, o, z oder leer a: Anfangshöhe bei Stand- und Fließgewässern[1]; Brunnenalterung[2] h: Übernahme von $H(t_0)$ als Randwert bei RB 1. Art und Tagebau oder H-Steuerung bei Brunnen und Standgewässern[3] i: insert Ganglinie aus dem Path gesetzten Projekt mit dem Namen *NAME*, *LUPE*, *IS*, *JZ*, *MG* oder mit dem in der Folgezeile angegebenen Namen, wenn in der Folgezeile *HZ* = **"r"** (read) kodiert wurde[4] q: Q-Steuerung bei Brunnen und Standgewässern[3] o: Gelände (nur bei RB Überflutung zulässig) z: Übernahme Elementunterkante bei RB 1. Art und Tagebau, so dass gilt: *Wasserstandsvorgabe* = *ZU* (das Feld *RANDWERT* kann damit leer bleiben)
RAND-WERT	N	8.3	Vorgabe von H(t) oder Q(t) in *Q-MASS* (Einspeisung: positiv, Entnahme: neg.)
MIG1	N	5.3	Vorgabe von Partialdichten in *RHO-MASS* bei der Transportmodellierung[5]:
MIG1E	N	2	$\rho_1(t) = MIG1 \cdot 10^{MIG1E}$
MIG2	N	5.3	
MIG2E	N	2	
MIG3	N	5.3	
MIG3E	N	2	
MIG4	N	5.3	
MIG4E	N	2	
MIG5	N	5.3	
MIG5E[5]	N	2	
COM	Z	20	Kommentar

[1] Die Kodierung erfolgt vor der Eingabe der Förderrate bzw. des Brunnenwasserstandes und wird im Feld *HZ* durch ein a gekennzeichnet.

[2] Der Faktor der Brunnenalterung kann maximal 50 Stützstellen haben (bis Version 15.4.9 bis zu 5 Stützstellen) und wird als Polygon realisiert. Für Berechnungszeitpunkte, die vor der ersten Vorgabe liegen, wird der erste Alterungsfaktor angenommen. Für Berechnungszeitpunkte, die nach der letzten Vorgabe liegen, wird der letzte Alterungsfaktor angesetzt.

[3] Ein Eintrag bei Brunnen oder Standgewässern ist nur im Falle einer Umschaltung von H-Steuerung auf Q-Steuerung oder umgekehrt notwendig.

[4]Dieses Feature ermöglicht auf einfache Art und Weise die Übernahme von Berechnungsergebnissen des "Path" gesetzten Projektes in das aktuelle Projekt. "Path" gesetzt ist ein Projekt, wenn in der Datei filname die Zeile "geodbs home\database" durch "geodbs home\database path({verzeichnis}\pcgeofim\{pathproj}\database)" ersetzt wird.

[5]Wenn mehr als 5 Stoffe transportiert werden sollen, ist die Struktur auf die entsprechende Anzahl zu erweitern.

In dem nachfolgenden Beispiel werden die Randbedingungen Fließgewässer, Standgewässer, Vertikalfilterbrunnen und die Migrationsrandbedingung vorgestellt. Für den Brunnen wird auch gezeigt, wie die Alterung von Filterbrunnen vorgegeben wird.

Tabelle 4-3: Beispiel für Randstammdaten altlrast.dbf

Microsoft Excel - altlrast.dbf

NAME	LUPE	IS	JZ	MG	ART	STEU	ZEIT	QMIN	QMINE	QMAX	QMAXE	HMIN	HMAX	LA	KFK	KEK	D_R	FL	SOHLE	COM
flu		0	0	0	f	q	k	0,000		0,000				100	1,0	1	0,00	0,0	0,0	globaler Datensatz Fließgewässer flu
flu		9	1	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	300,0	42,0	lokaler Datensatz
flu		9	2	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	300,0	41,9	
flu		8	3	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	300,0	41,9	
...																				
flu		8	29	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	300,0	40,1	
bac		0	0	0	f	q	k	0,000		0,000				0	1,0	1	0,00	0,0	0,0	globaler Datensatz Fließgewässer bac
bac		33	19	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	5000,0	41,5	
bac		32	19	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	100,0	41,5	
...																				
bac		22	18	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	200,0	40,6	
bac		21	19	1	f			0,000		0,000				100	1,0	-4	0,10	200,0	40,6	
see		0	0	0	s	q	k	-1,000	3	0,000		0,0	42,0	0	0,0	0	0,00	0,0	30,0	globaler Datensatz Standgewässer see
see		18	17	1	s	1		0,000		0,000		0,0	0,0	50	0,0	0	0,00	100,0	30,0	horizontale Kopplung an den Aquifer
see		19	17	1	s	1		0,000		0,000		0,0	0,0	50	0,0	0	0,00	100,0	30,0	
...																				
see		18	19	3	s	3		0,000		0,000		0,0	0,0	0	1,0	-6	0,50	10000,0	30,0	vertikale Kopplung an den Aquifer
see		19	19	3	s	3		0,000		0,000		0,0	0,0	0	1,0	-6	0,50	10000,0	30,0	
bru		14	27	0	b	q	k	0,000		0,000		0,0	0,0	0			0,40		10,0	Globaler Datensatz Vertikalfilterbrunnen
bru		14	27	3	b										1,0	-3	0,40	10,0		lokaler Datensatz
ran		45	1	1	1		k													zeitkonstante RB 1. Art
ran		45	2	1	1		k													
ran		45	3	1	1		k													
unf		31	11	1	m		t													zeitabhängige Migrationsrandbedingung 1. Art

Tabelle 4-4: Beispiel Randbewegungsdaten altlrabe.dbf

Microsoft Excel - altlrabe.dbf

T22 = 1120 kg/m3

NAME	LUPE	IS	JZ	MG	DATUM	NB	HZ	RANDWERT	MIG1	MIG1E	MIG2	MIG2E	MIG3	MIG3E	MIG4	MIG4E	MIG5	MIG5E	COM
flu		0	0	0				25,000											Einspeisung 25 m3/min
flu		9	1	1			a	42,000											Anfangswasserstand 42 m NN
flu		9	2	1			a	42,000											
...		7	27	1			a	42,000											
flu		8	28	1			a	42,000											
flu		8	29	1			a	42,000											
bac		0	0	0															kein äußerer Zufluss
bac		33	19	1			a	42,000											Anfangswasserstand 42 m NN
...		22	18	1			a	42,000											
bac		21	19	1			a	42,000											
...																			
bru		14	27		01.01.1990	0	a	1,000											Brunnenalterung
bru		14	27		01.01.1991	0	a	0,750											
bru		14	27		01.01.1993	0	a	0,500											
bru		14	27		01.01.1995	0	a	0,250											
bru		14	27			1		-0,333											Förderrate 0,333 m3/min = 20 m3/h
...						1		-0,333											
see		0	0	0		0	a	42,000											Anfangswasserstand See 42 m NN
see		0	0	0		0		0,000											Q = 0
unf		31	11	1	01.01.1990	0		0,000	1,120	3									Migrationsrandbedingung 1. Art
unf		31	11	1	01.05.1990	0		0,000	1,120	3									1120 kg/m3

4.2 Ungekoppelte Randbedingungen

Ungekoppelte Randbedingungen (RB) sind die RB 1., 2. und 3. Art, die RB Tagebau, der Überflutung, die obere Berandung, Modellpegel und die Migrationsrandbedingung.

Die Auswirkungen von **Randbedingungen 1., 2. und 3. Art** sind allgemein bekannt.

Bezüglich der **Randbedingung 1. Art** gibt es eine Besonderheit: Diese werden auf den Rand des Modellelements gelegt, wenn ein finites Volumen nicht in allen horizontalen Richtungen einen Nachbarn hat (Modellrand oder Verbreitungsgrenze). Dadurch wird erreicht, dass es am Rand des Gebietes zu einer korrekten Berechnung der Randflüsse kommt. Soll hingegen der Randwert im Mittelpunkt wirken, muss die **RB 1. Art** durch eine **RB Tagebau** mit Vorgabe von Q_{min} und Q_{max} ersetzt werden. Die Vorgabe von $Q_{max} > 0$ setzt die Bedingung "nur Entnahme" außer Kraft.

Die **RB Tagebau** (*ART* = „t“) ist ein Sonderfall der **RB 1. Art**, sie unterscheidet sich nur durch die automatische Begrenzung "nur Entnahme". Ort der Realisierung der Wasserstandsvorgabe ist bei der RB Tagebau immer der Elementmittelpunkt.

Die **RB 1. Art** und **Tagebau** können zusätzlich mit der Vorgabe von *HZ = „z“* in der Randbewegungsdatei georabe.dbf modifiziert werden: Damit würde generell eine Wasserstandsvorgabe entsprechend dem Niveau der Elementunterkante *„ZU“* erfolgen.

GEOFIM schaltet bei der Simulation von **RB 1. und 3. Art** auf **RB 2. Art** um, wenn der berechnete Randwert q(t) die Grenzen q_{min} bzw. q_{max} verletzt. Wenn durch Infiltration der GW-Spiegel auf einem bestimmten Niveau gehalten werden soll, wird die dazu benötigte Wassermenge bei der Simulation berechnet. Aus technologischen Gründen ist aber die Einspeiserate beschränkt. Wird diese maximal mögliche Einspeisemenge erreicht, schaltet GEOFIM von der Randbedingung 1. Art in eine Randbedingung 2. Art mit der Menge q_{max} um. Als Ergebnis ergibt sich ein Abfallen des Grundwasserspiegels, wie es Abbildung 4-1 zeigt.

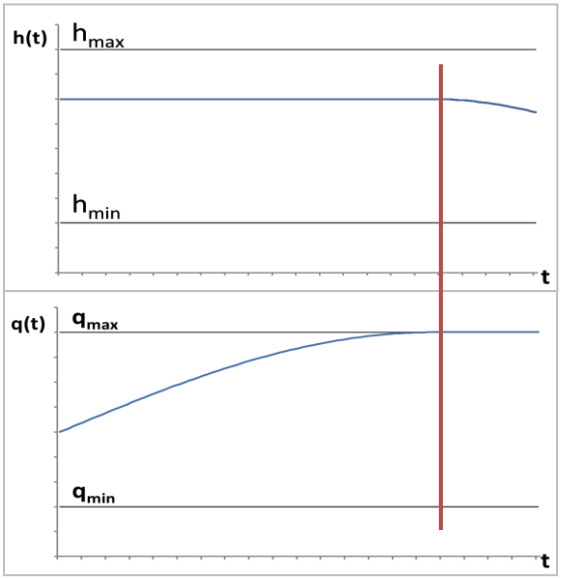


Abbildung 4-1: Übergang von einer Randbedingung 1. Art zu einer 2. Art, wenn zum Zeitpunkt t der berechnete Randwert q(t) die obere Grenze q_{max} erreicht

Ganz analog ist die Vorgehensweise bei Verletzung der Grenzen h_{min} bzw. h_{max} bei **RB 2. Art**.

Die **Randbedingung Überflutung** bildet den Prozess der Versickerung von Wasser adäquat ab. Die RB Überflutung beginnt zu wirken, wenn die Randspiegelhöhe erstmals über dem Gelände liegt. Wenn der Grundwasserstand unter dem Gelände liegt kann maximal

$$v_{rand}(t) = k_f\, \Delta x\, \Delta y\, (h_{rand}(t) - \text{Gelände}) / d_{Kolmation}$$

versickern. Die Sickerströmung vom Gelände zur Grundwasseroberfläche wird mit Hilfe des in der Dissertation von Dr. Glugla beschriebenen Algorithmus berechnet. Nur der die Grundwasseroberfläche erreichende Anteil wird als $v_{rand}(t)$ ausgewiesen. Wenn der Grundwasserstand die Geländeoberfläche erreicht, wird die RB Überflutung als RB 3. Art realisiert:

$$v_{rand}(t) = k_f\, \Delta x\, \Delta y\, (h_{rand}(t) - h_{Grundwasser}(t)) / d_{Kolmation}.$$

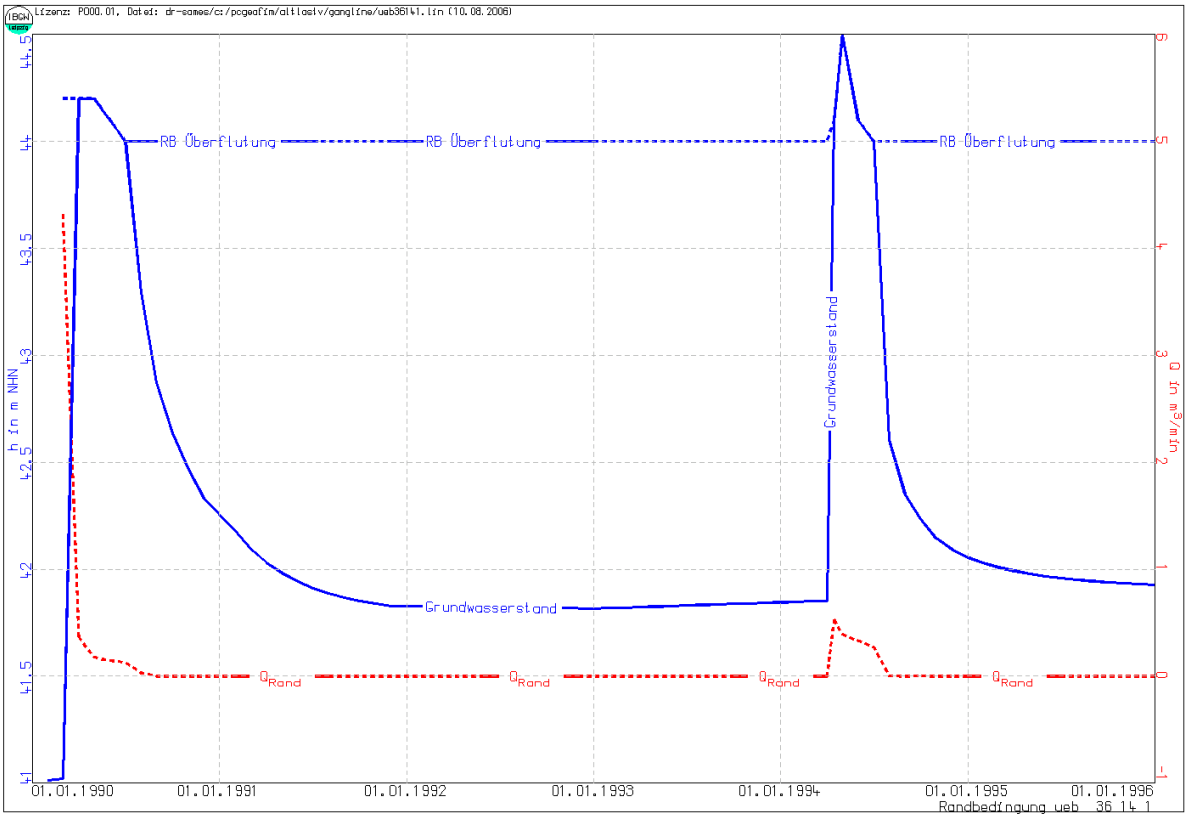


Abbildung 4-2: Randbedingung Überflutung

Bei einer Grundwasserneubildung größer als Null kann im Laufe der Zeit die Spiegelhöhe auf einen Wert h > Geländehöhe steigen. Soll dies unterbunden werden, wird bei Vorgabe einer **oberen Berandung** (*ART* = „o“) für die entsprechenden Elemente

$$h = \max(ZU + M1 + M2 + M3, GEL)$$

ein Wasserstands-Grenzwert *HMAX* realisiert, der im Laufe der Berechnung nicht überschritten wird. Ausgewiesen wird die Wassermenge (als Randabfluss), die dem Reservoir entnommen werden muss, damit die Spiegelhöhe den obigen Grenzwert nicht überschreitet.

Hinweis: Die Randbedingung „obere Berandung“ wird als RB 1. Art realisiert und sollte nicht zu dicht gesetzt werden, da zwischen benachbarten Randbedingungen 1. Art der Leitwert Null gesetzt werden muss. Günstig ist die versetzte Vorgabe, so wie es die folgende Abbildung zeigt (blau: RB "obere Berandung").

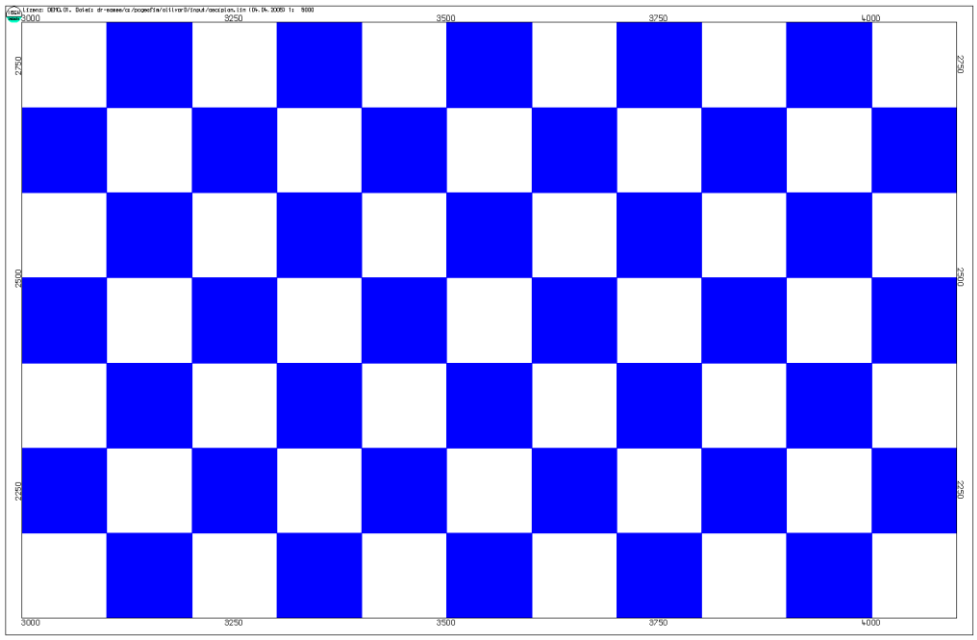


Abbildung 4-3: Vorgabe der RB "obere Berandung"

Die **Randbedingung Modellpegel** wird als RB 2. Art mit Randwert = 0 (keine Ein / Ausspeisung) realisiert und dient nur zum Ausweisen der Wasserstandsentwicklung im Mittelpunkt des finiten Volumenelements *LUPE*, *IS*, *JZ*, *MG*.

Für den Stofftransport wurde mit der **Migrationsrandbedingung** die Möglichkeit geschaffen, in einem finiten Volumenelement das Schadstoffpotenzial vorzugeben. Ausgewiesen wird die Masse Schadstoff, die dem Reservoir entnommen oder hinzugefügt werden muss, um das vorgegebene Potenzial zu realisieren (siehe Abschnitt 5). Bei diesem Standardfall wird im Zuge der Berechnung der vorgegebene Randwert realisiert, es kann somit auch eine Ab-Konzentration des Schadstoffs stattfinden.

Bei der Migrationsrandbedingung kann zusätzlich auch ein **Sonderfall** realisiert werden: In diesem Fall wird Grundwasser, welches durch eine Modellzelle strömt, bis zur angegebenen Konzentration mit Schadstoff beladen, solange es nicht schon zuvor eine höhere Schadstoffkonzentration besaß – in diesem Fall gibt es somit keine Ab-Konzentration. In der Randstammdaten-Datei georast.dbf wird für die Anwendung des Sonderfalls QMIN=0 und QMAX=1 gesetzt:

NAME	LUPE	IS	JZ	MG	ART	STEU	ZEIT	QMIN	QMINE	QMAX	QMAXE	HMIN	HMAX
QT1	q	17	28	12	m		s	0		1			
QT1	q	17	28	13	m		s	0		1			
QT1	q	17	28	14	m		s	0		1			

Abbildung 4-4: Sonderfall Migrationsrandbedingung OHNE Ab-Konzentration

4.3 Gekoppelte Randbedingungen 3. Art

Im Programmsystem PCGEOFIM sind als gekoppelte Randbedingungen 3. Art Vertikalfilterbrunnen, Horizontalfilterbrunnen, Brunnenriegel, Standgewässer und Fließgewässer realisiert.

Eine gekoppelte Randbedingung 3. Art ist mit mehreren finiten Volumina verbunden. Aus diesem Grund muss zwischen globalen und lokalen Randstammdaten unterschieden werden. Der globale Datensatz bezieht sich auf die gekoppelte Randbedingung als Ganzes, die nachfolgend zu kodierenden lokalen Datensätze beschreiben die Kopplung an die verschiedenen finiten Volumina.

Tabelle 4-5: Namensbildung bei gekoppelten Randbedingungen 3. Art

Randbedingung	**Art**	**globaler Name**	**lokaler Name**
Vertikalfilterbrunnen	b	*NAME LUPE IS JZ 0*	*NAME LUPE IS JZ MG*
		NAME 0 0 0 0[1]	
Brunnenriegel	r	*NAME LUPE IS JZ 0*	*NAME LUPE IS JZ MG*
Horizontalfilterbrunnen	h	*NAME 0 0 0 0*	*NAME LUPE IS JZ MG*
Standgewässer	s	*NAME 0 0 0 0*	*NAME LUPE IS JZ MG*
Fließgewässer	f	*NAME 0 0 0 0*	*NAME LUPE IS JZ MG*

[1]Wird der globale Name eines Vertikalbrunnens ausschließlich mit 3 Zeichen definiert, ist es möglich, diesen über den lokalen Namen auch in unterschiedlichen Vertikallupen aufzuschließen. Bedingung hierbei ist jedoch, dass die 3 Zeichen des Namens den Brunnen eindeutig bezeichnen.

Gekoppelte Randbedingungen 3. Art können zeitvariabel in Betrieb oder außer Betrieb gehen, wenn in den globalen Randbewegungsdatensätzen die Randwerte zeitabhängig vorgegeben werden und nicht der gesamte Berechnungszeitraum erfasst wird.

4.3.1 Vertikal- und Horizontalfilterbrunnen, Brunnenriegel

Bei der Berücksichtigung von Brunnen wird die stationäre analytische Lösung für die zylindersymmetrische Strömung benutzt:

$$V_b = 2\pi k_f m \, (h(r_1) - h(r_2)) / \ln(r_2 / r_1)$$

In dieser Formel sind r_1 und r_2 zwei beliebige Radien und $h(r_1)$ und $h(r_2)$ die dort anzutreffenden Standrohrspiegelhöhen.

Tabelle 4-6: Brunnenparameter

Brunnenart	r_1 (*D_R*)	r_2	**m (*FL*)**	k_f
Horizontalfilterbrunnen	Brunnenradius[1]	$\Delta z/2$	Länge im Element	k_f im brunnennahen Raum (Details siehe Tabelle 4-1, Fußnote 3)
Vertikalfilterbrunnen	Brunnenradius[1]	$0{,}1404 \cdot \mathrm{sqrt}(\Delta x^2+\Delta y^2)$	Filterstrecke im Element	k_f im brunnennahen Raum
Brunnenriegel	Brunnenradius[1]	$m/(2\pi n_b)$	Länge Galerie im Element	k_f im brunnennahen Raum

[1]Die obige Formel zeigt, dass der Anwender mit der Wahl des Radius festlegt, an welcher Stelle im Brunnen der Brunnenwasserstand realisiert wird.

Der Volumenstrom $Q_{Brunnen}$ wird implizit berechnet:

$$\sum_{\text{alle Filterstrecken } MG} L_{Brunnen,\,MG}\,(H_{Brunnen} - H_{LUPE,IS,JZ,MG}) = Q_{Brunnen}$$

mit

$$L_{Brunnen} = 2\pi k_f m / \ln(r_2 / r_1).$$

Es muss noch darauf hingewiesen werden, dass obige Formeln Horizontalfilterbrunnen nur korrekt beschreiben, wenn der Filter vollständig von Grundwasser benetzt ist (vollkommene Anströmung). Der zurzeit im Programmsystem PCGEOFIM implementierte Algorithmus realisiert somit keine oberflächennahen Drainagen. Diese sollten mit Hilfe von Randbedingungen 3. Art nachgebildet werden.

Brunnen können sowohl H- als auch Q-gesteuert werden. Hinweise dazu im Abschnitt 4.1.

4.3.1.1 Brunnenalterung

Der Faktor der Brunnenalterung wird in der Randbewegungsdatei {proj}rabe.dbf vorgegeben. Dazu werden vor der eigentlichen Vorgabe der H- oder Q-Bewegungsdaten die Alterungsfaktoren integriert, unter Kennzeichnung mit dem Kürzel „a“ im Feld „HZ“.

Faktoren unter 1 reduzieren die Wechselwirkung zwischen Brunnen und Grundwasserleiter. Damit kann eine Reduzierung der Brunnenleistung (bspw. aufgrund von Verockerung oder Versinterung) im Dauerbetrieb simuliert werden.

Die Alterung kann über maximal 50 Stützstellen definiert werden (bis Version 15.4.9 maximal 5) und wird als Polygon realisiert, d.h., zwischen den Stützstellen wird linear interpoliert. Für Berechnungszeitpunkte, die vor der ersten Vorgabe liegen, wird der erste Alterungsfaktor angenommen. Für Berechnungszeitpunkte, die nach der letzten Vorgabe liegen, wird der letzte Alterungsfaktor angesetzt.

Tabelle 4-7: Brunnenalterung {proj}rabe.dbf

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	NAME	LUPE	IS	JZ	MG	DATUM	NB	HZ	RANDWERT	
2	BRU	f	14	73	0	01.08.2012	1	a	1,000000	→ vor dem 01.08.2012 keine Brunnenalterung
3	BRU	f	14	73	0	01.01.2013	1	a	0,500000	→ zwischen dem 01.08.2012 und 01.01.2013 Rückgang der Leistungsfähigkeit, ab 01.01.2013 konstant niedrige Leistungsfähigkeit
4	BRU	f	14	73	0	01.09.2011	1	h	78,500000	
5	BRU	f	14	73	0	01.01.2012	1	h	78,000000	→ Vorgegebener Wasserstand im Brunnen (= Randwasserstand), auch Q-Vorgabe möglich
6	BRU	f	14	73	0	01.04.2012	1	h	78,200000	
7	BRU	f	14	73	0	01.07.2012	1	h	77,600000	
8	BRU	f	14	73	0	01.09.2012	1	h	78,000000	
9	BRU	f	14	73	0	01.01.2013	1	h	78,500000	
10	BRU	f	14	73	0	01.04.2013	1	h	78,000000	
11										

RABE

4.3.2 Standgewässer

Standgewässer sind Seen und Restlöcher. Eine korrekte Berücksichtigung ihres Einflusses auf den Grundwasserstand ist auf folgende Weise realisiert: Das Fassungsvermögen des Standgewässers wird aus der Seefläche, die als Funktion der Standrohrspiegelhöhe vorzugegeben ist, bestimmt. Ebenso sind alle horizontalen und vertikalen Kopplungen zu den das Standgewässer umgebenden finiten Volumenelementen zu erfassen (siehe Abbildung 4-5). Für jedes Standgewässer kann so eine Bilanzgleichung aufgestellt werden: Summe der Flüsse zwischen

dem Aquifer und dem Standgewässer plus Summe oberirdische Zuflüsse minus Zehrung ist gleich der Änderung des im Standgewässer vorhandenen Wassers.

$$\underbrace{\Sigma L_{See} (H_{See} - H_{LUPE,IS,JZ,MG})}_{\text{alle Kopplungen}} + \underbrace{\Sigma Q_{zu}}_{\text{oberirdische Zuflüsse}} + Z(\text{Fläche}_{See}) = \text{Fläche}_{see}(H_{See})\ \Delta H_{See}/\Delta t$$

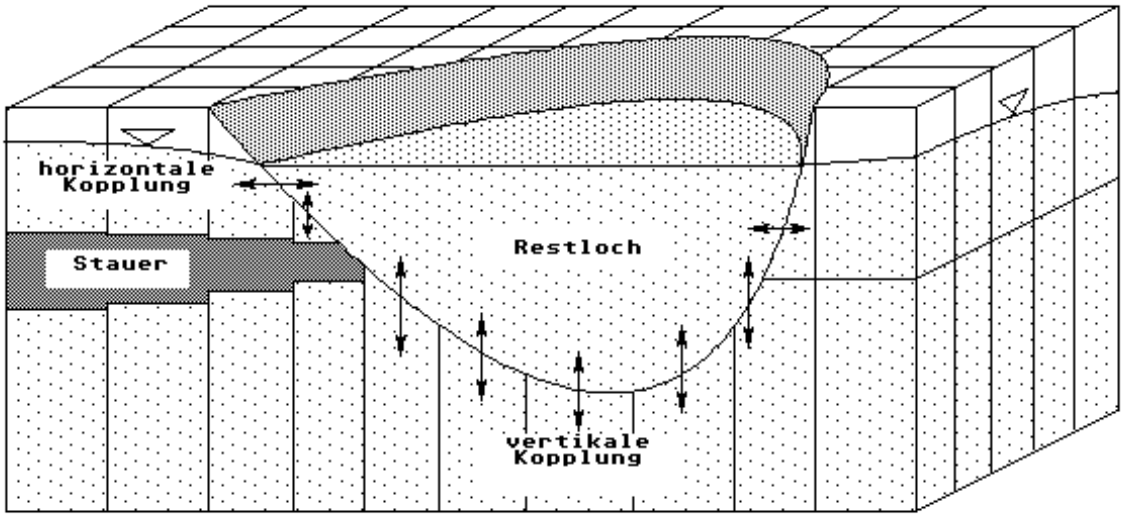


Abbildung 4-5: Anbindung eines Standgewässers an den Aquifer

Hinweis: Ein finites Volumenelement kann horizontal und vertikal gekoppelt sein. Die Leitwerte werden addiert. Da der vertikale Leitwert im Allgemeinen wesentlich größer als der horizontale ist, kann der horizontale Leitwert meistens vernachlässigt werden.

Tabelle 4-8: Leitwertberechnung Standgewässer

Feld	horizontale Kopplung[1]	vertikale Kopplung[2]
LA	Entfernung Zellenmittelpunkt zum Seeufer in Höhe *SOHLE* in m (*LA* > 0)[3]	*LA* = 0
FL	Breite der Uferzone in m	Kontaktfläche des Sees mit dem entsprechenden Volumenelement in m²
SOHLE	Höhe des am Seeufer ausstreichenden Modellgrundwasserleiters (entspricht ca. der Elementunterkante *ZU*) in m NHN	ortsdiskrete Höhe der Gewässersohle in m NHN
D_R	Dicke der kolmatierten Schicht in m	Dicke der kolmatierten Schicht in m
KFK *KEK*	Mantisse und Exponent des k_f-Wertes der kolmatierten Schicht: $k_{f\,kol} = KFK \cdot 10^{KEK}$	Mantisse und Exponent des k_f-Wertes der kolmatierten Schicht: $k_{f\,kol} = KFK \cdot 10^{KEK}$
	$L_{see} = \frac{k_{f,\,zelle} \cdot k_{f,\,kol}}{k_{f,zelle} \cdot D_R + k_{f,kol} \cdot LA} \cdot FL \cdot \Delta h_u$ mit Δh_u - Höhe Verbindung zwischen See und finitem Volumenelement (ergibt sich bei der Berechnung)	$L_{see} = k_{f,\,kol} \cdot \frac{FL}{D_R}$

[1]Berücksichtigung einer Kolmation bei horizontaler Kopplung ab Version 2004

[2]Kennzeichen vertikale Kopplung: *LA* = 0 (ab Version 2004), *KFK* > *0* (bis Version 8.03)

[3]Bei uneindeutiger Vorgabe hat sich ein Richtwert von *LA=DX*/2 (Hälfte der Volumenelementbreite) bewährt.

Hinweis:

Brunnen und Standgewässer können sowohl H- als auch Q-gesteuert werden. Bei Vorgabe der Standrohrspiegelhöhe im Brunnen bzw. des Gewässerspiegels wird die Ein- bzw. Ausspeisemenge berechnet, die notwendig ist, um den Wasserstand zu realisieren. Wenn *QMIN* und *QMAX* vorgegeben wurden, erfolgt eine Kontrolle, ob diese Grenzen eingehalten sind. Bei Verletzung wird nur dann auf Q-Steuerung umgeschaltet, wenn auch *HMIN* und *HMAX* vorgegeben wurden. Ist das nicht der Fall, wird der Brunnen bzw. das Standgewässer mit Q = 0 weiterbetrieben. Bei Vorgabe der Infiltrations- bzw. Förderrate des Brunnens oder einem künstlichen Zu- bzw. Abfluss zum Standgewässer wird der Wasserstand im Brunnen bzw. im Standgewässer berechnet. Auch in diesem Falle wird geprüft, ob vorgegebene Beschränkungen *HMIN* und *HMAX* eingehalten werden. Ist dies nicht der Fall, wird nur dann auf eine H-Steuerung umgeschaltet, wenn auch *QMIN* und *QMAX* eingegeben wurden. Ansonsten wird wieder Q = 0 gesetzt. Schließlich kann es passieren, dass es nach Umschaltung zu Verletzung von Begrenzungen kommt. Auch in diesem Falle wird Q = 0 gesetzt.

4.3.3 Fließgewässer

Zum Unterschied zu den bisher behandelten gekoppelten Randbedingungen 3. Art erfolgt die Berücksichtigung der Kopplung der einzelnen Randbedingungsvorgaben für jedes finite Volumen nicht implizit, sondern iterativ. Die einzelnen Fließgewässerelemente (= Flussabschnit-

te) werden als Randbedingungen 3. Art realisiert. In Auswertung der Ergebnisse werden für die Fließgewässer Fließmengen berechnet und aus den Abflusskurven die Flusswasserspiegelhöhen ermittelt und die Leitwerte korrigiert.

Tabelle 4-9: Fließgewässeriteration

Oberflächenwasser		Grundwasser
Berechnung der Fließmengen, Bestimmung der Flussspiegelhöhen aus den Abflusskurven, Korrektur der Randleitwerte	Iteration bis Genauigkeit erreicht ist ⟷	Berechnung Mengenströmung unter Berücksichtigung von Randbedingungen 3. Art für die Flussabschnitte

Der Leitwert wird für jeden einzelnen Flussabschnitt wie folgt ermittelt:

$df_{quer} = (\Delta x_{IS}\Delta y_{JZ} - FL) / \ln(\Delta x_{IS}\Delta y_{JZ} / FL)$

$L_{Aquifer} = k_{f\,LUPE,IS,JZ,MG}\, df_{quer} / (z_{Fluss} - z_{LUPE,IS,JZ,MG}) * k_{rw}(z_{Fluss} - H_{LUPE,IS,JZ,MG})$,

- Infiltration (Fluss infiltriert in den Grundwasserleiter)

  $L_{Kolmation} = KFK \cdot 10^{KEK}\, FL / D_R$ (im lokalen Datensatz bzw. Flussabschnitt)

  $L_{Fluss} = L_{Kolmation}\, L_{Aquifer} / (L_{Kolmation} + L_{Aquifer})$

  $Q_{Fluss} = L_{Fluss}\, (H_{Fluss} - H_{LUPE,IS,JZ,MG})$

- Exfiltration (Fluss wird vom Grundwasserleiter gespeist)

  $F_{Exfiltration}$ (Faktor Exfiltration) $= KFK \cdot 10^{KEK}$ (im globalen Datensatz)

  $L_{Kolmation} = F_{Exfiltration}\, KFK \cdot 10^{KEK}\, FL / D_R$

  $L_{Fluss} = L_{Kolmation}\, L_{Aquifer} / (L_{Kolmation} + L_{Aquifer})$

  $Q_{Fluss} = L_{Fluss}\, F_{Exfiltration}\, (H_{Fluss} - H_{LUPE,IS,JZ,MG})$

Die Funktion $k_{rw}(\Delta h)$ ist in Abbildung 4-6 grafisch dargestellt. Für $\Delta h \leq 0$ hat k_{rw} den Wert 1. L_{Fluss} ist der harmonische Mittelwert der Leitwerte zwischen Flusssohle und Sohle Grundwasserleiter. Bei Ausuferung wird $FL := FL * AUSUFER$ gesetzt (siehe Abschnitt 4.5).

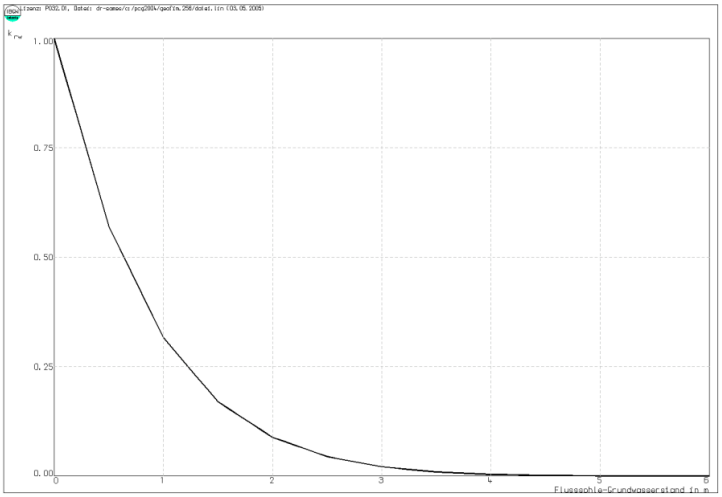


Abbildung 4-6: Verringerung der Infiltration bei abgerissener Strömung

Hinweise

- Die einzelnen Flussabschnitte sind von der Quelle zur Mündung vorzugeben.
- Wenn mehrere Flüsse im Einzugsbereich vorhanden sind, müssen sie in den Randstammdaten hierarchisch geordnet vorgegeben werden, d.h. ein später eingegebener Fluss darf nur in einen zuvor schon eingegebenen Fluss münden.
- Die einzelnen Fließgewässerelemente müssen nicht zwangsläufig aneinandergrenzen. Somit müssen z.B. verrohrte Flussabschnitte nicht eingegeben werden.
- In der Datei der Randbewegungsdaten wird der Anfangswasserstand vorgegeben. Wenn dieser nicht bekannt ist, kann z.B. ein Wert von *SOHLE*+0,1 m vorgegeben werden.
- Eine Zwischeneinspeisung bzw. -entnahme im Fluss ist in den Randstammdaten durch Setzen von *STEU* = q und *ZEIT* = k, p oder s im lokalen Datensatz anzuzeigen und die Rate selbst direkt nach der Kodierung des Anfangswasserstandes im betreffenden finiten Volumen vorzugeben.

Abflusskurven können für jedes Fließgewässerelement mit der Datei {proj}schl.dbf vorgegeben werden (Abschnitt 4.5). Die Kopplung zu einem Fließgewässernetz erfolgt in der Datei {proj}gewa.dbf (Abschnitt 4.6).

4.4 Vorgabe von Füllkurven der Standgewässer

Für jedes Standgewässer werden die Funktion Fläche und Zehrung in Abhängigkeit vom Wasserstand benötigt. Zur Aufstellung dieser Funktion sollte das Tool Isohypse benutzt werden. Wenn eine Vermessung des Standgewässers in der Form x_m, y_m, z_m vorliegt, kann mit Hilfe von Isohypse auf einfache Art und Weise für das Standgewässer die Datei {name}res.dbf erzeugt werden (s. Teil Isohypse).

Der erste Datensatz eines jeden Standgewässers beschreibt die Gesamtfläche F_{gesamt} (Felder *FLAECHE* und *FEXP*) sowie den oberirdischen Direktabfluss von der Landfläche in das Standgewässer (Feld *ZEHR*). Wird für den Direktabfluss ein Wert von 0 vorgegeben, berücksichtigt Geofim keine Klimadaten für das entsprechende Standgewässer. Die nachfolgenden Datensätze beschreiben die Fläche als Funktion des Wasserstandes und die Zehrung von der freien Wasserfläche. Die dem Standgewässer oberirdisch zufließende bzw. gezehrte Wassermenge ergibt sich aus der Beziehung:

$$(F_{gesamt} - \text{Fläche}(HRES)) \bullet \text{Oberirdischer_Abfluss} + \text{Fläche}(HRES) \bullet ZEHR(HRES).$$

Die Tabelle 4-10 zeigt die Struktur und die Tabelle 4-11 ein Beispiel.

Optional kann ein Faktor für den oberirdischen Landabfluss pro Standgewässer vorgegeben werden (jeweils erste Zeile des Gewässers, Feld *RLA*). Dieser wird bei Vorgabe von Klimadaten (siehe Abschnitt 4.10.3) verwendet, um einen gewässerspezifischen Faktor definieren zu können. Ist das Feld *RLA* vorhanden, jedoch kein Wert für das Standgewässer eingetragen, wird die Variable #RL_LANDABFLUSS aus der Steuerdatei ausgewertet. Ist diese nicht ge-

setzt, wird das betreffende Standgewässer ausgewiesen und die Programmausführung abgebrochen.

Ebenfalls optional ist die Vorgabe eines gewässerspezifischen Anpassungsfaktors für die Seeverdunstung über das Feld *FEVAP* möglich. Dafür sind 2 Optionen möglich:

a) in der jeweils ersten Zeile eines Standgewässers als vom Wasserstand unabhängiger Wert
b) ein Wert pro Wasserstand bzw. Flächeneintrag

Bei gleichzeitiger Vorgabe von Option a und b (*FEVAP* <> 1.0) erfolgt die Ausgabe einer Warnung für das betreffende Standgewässer und die weitere Bearbeitung wird abgebrochen. Der Faktor wirkt bei Verwendung der Datei geoevap.dbf (Tabelle 4-33) und darf Werte im Bereich 0 – 10 annehmen. Aus Gründen der Rückwärtskompatibilität wird bei leeren Feldern oder Werten von 0 mit einem Faktor von 1 gerechnet. Bei Vorgabe von negativen Werten wird eine Fehlermeldung ausgegeben und die Berechnung abgebrochen. Anpassungen der Seeverdunstung können erforderlich sein, um bspw. den Einfluss durch Wasserpflanzen abzubilden.

Optional kann über das Feld *IKLIM* jedem Standgewässer eine Klimastation zugewiesen werden, um lokale Klimabedingungen besser abbilden zu können. Der Wert im Feld *IKLIM* bezieht sich auf die Datenreihen, die in den Strukturen geoklim.dbf (Tabelle 4-31) und geoevap.dbf (Tabelle 4-33) definiert sind.

Tabelle 4-10: Struktur der Füllkurvendatei georest.dbf → home/database/{proj}rest.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*NAME*	Z	3	Name des Standgewässers
2	*DUMMY*	Z	9	*LUPE*, *IS*, *JZ* und *MG* oder leer
3	*HRES*	N	7.2	Wasserstand in m NHN
4	*FLAECHE*	N	11.3	Seefläche = *FLAECHE* · 10^{FEXP} erster Datensatz: Gesamtfläche Sonst: *FLAECHE*(*HRES*)
5	*FEXP*	N	3	
6	*ZEHR*[4]	N	4.1	Erster Datensatz: oberirdischer Direktabfluss Sonst: Zehrung in l/(s km^2) bzw. 10^{-9} m/s
7	*RLA*	N	4.1	Direkter oberirdischer Landabfluss in Prozent (Anteil vom korrigierten Niederschlag aus geoklim.dbf)
8	*FEVAP*	N	6.3	Faktor (zulässige Werte zwischen 0 und 10) zur Anpassung der aus den Angaben in der geoevap.dbf (Tabelle 4-33) ermittelten Seeverdunstungsdaten, bspw. für Abbildung der Seeverdunstung bei Schilfbewuchs. Leer und 0 führen aus Kompatibilitätsgründen dazu, dass mit einem Faktor von 1 gerechnet wird.
9	*IKLIM*	N	3	Optional: Nummer der Klimastation mit Bezug auf klim.dbf und evap.dbf
10	*COM*	Z	20	Kommentar

[4] Wird im ersten Datensatz ein Wert ZEHR = 0 definiert (Vorgabe des oberirdischen Landabflusses), ignoriert Geofim die Klimadaten für das Standgewässer während der Simulation

Tabelle 4-11: Beispiel für eine Füllkurve in der Datei altlrest.dbf

	A	B	C	D	E	F	G
1	NAME	DUMMY	HRES	FLAECHE	FEXP	ZEHR	COM
2	see		0,0	161,9	3	4,5	Oberirdischer Abfluss Landfläche: 4,5E-9 m/s
3	see		28,0	708,3	-2	-2,5	Zehrung auf Wasserfläche: -2,5E-9 m/s
4	see		28,1	354,1	-1	-2,5	
5	see		28,2	920,8	-1	-2,5	Fläche: 92,08 m^2
6	see		28,3	177,1	0	-2,5	
7	see		28,4	290,4	0	-2,5	
8	...						
9	see		44,2	154,5	3	-2,5	
10	see		44,4	157,2	3	-2,5	
11	see		44,6	159,9	3	-2,5	
12	see		44,8	161,9	3	-2,5	
13							

altlrest

4.5 Vorgabe der Abflusskurven für Fließgewässer

Eine Abflusskurve (Schlüsselkurve) beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Abfluss in einem bestimmten Flussabschnitt und der Wassertiefe. Die Abbildung 4-7 zeigt eine gemessene Abflusskurve am Pegel Thekla.

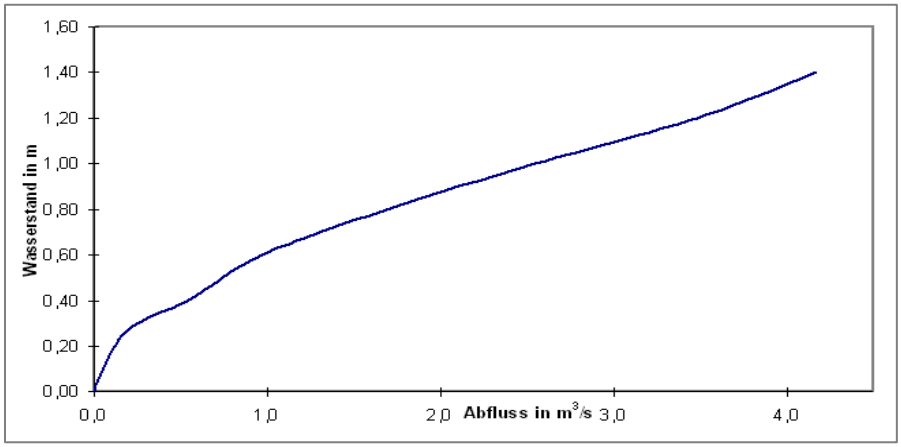


Abbildung 4-7: Gemessene Abflusskurve am Pegel Thekla

Das Potential HF_{Fluss} ist die Summe aus Sohle Fluss plus Wassertiefe. Der Randvolumenstrom zwischen dem Fluss und dem Grundwasser $Q = L_{Fluss}(H_{Fluss}-H_{Gitter})$ hängt, wie man aus der Grafik entnehmen kann, ganz wesentlich von der Wasserführung im Fluss ab.

Zur Berechnung der Randvolumenströme wird für jeden Flussabschnitt eine Schlüsselkurve benötigt. Jedoch werden in der Regel nur für größere Flüsse an ausgewählten Stellen Abflusskurven gemessen. Aus diesem Grunde interpoliert der Simulator Geofim zwischen vorgegebenen Schlüsselkurven entsprechend des Abstandes oder übernimmt die nächstgelegene (sowohl flussauf- als auch flussabwärts), wenn nicht für alle Abschnitte eine Schlüsselkurve verfügbar ist.

Für einen großen Teil der Bäche liegen in der Regel keine Messungen vor. In diesem Fall können die Abflusskurven näherungsweise mathematisch berechnet werden. Die Formel für ein Trapezgerinne ist im Teil Theorie zu finden. In der Tabelle 4-12 ist zu sehen, wie mit Hilfe von Excel auf einfache Art und Weise die Schlüsselkurve für ein Trapezgerinne ermittelt werden kann.

In der Tabelle 4-13 ist die Struktur von geoschl.dbf zu sehen.

Der Faktor *AUSUFER* beschreibt die Vergrößerung des Leitwertes L_{Fluss} bei erhöhtem Flusswasserstand (s. Abschnitt 4.3.3).

Tabelle 4-12: Schlüsselkurvenberechnung für ein Trapezgerinne

	A	B	C	D
1	Schlüsselkurvenberechnung für ein Trapezgerinne			
2				
3	Sohlbreite sb in m	0,5		$Q_s = M\,F\,R^{2/3}\,I^{1/2}$
4	Böschungsneigung bn 1:	2		$F = (s_b + b_n\,w_a)\,w_a,$
5	Rauhigkeitsbeiwert M in m^0,333/s	20		$U = s_b + 2\,(1+b_n^{\,2})^{1/2}\,w_a.$
6	Gefälle 1:	1000		
7				
8	Wasserstand wa in m	F in m^2	U in m	Q in m^3/min
9	0,00	0,00	0,00	0,00
10	0,10	0,07	0,95	0,47
11	0,20	0,18	1,39	1,74
12	0,30	0,33	1,84	3,98
13	0,40	0,52	2,29	7,35
14	0,50	0,75	2,74	12,01
15	0,60	1,02	3,18	18,12
16	0,70	1,33	3,63	25,84
17	0,80	1,68	4,08	35,30
18	0,90	2,07	4,52	46,64
19	1,00	2,50	4,97	59,98
20				

Berechnung

Tabelle 4-13: Struktur der Schlüsselkurvendaten geoschl.dbf → home/database/{proj}schl.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*NAME*	Z	3	Name Fließgewässer
2	*LUPE*	Z	1 | 2	Lupe
3	*IS*	N	3	Nummerierung in x-Richtung
4	*JZ*	N	3	Nummerierung in y-Richtung
5	*MG*	N	2	Nummerierung in z-Richtung
6	*Q*	N	7.3	$Q \cdot 10^{QEXP}$ - Gewässerabfluss in *Q-MASS*
7	*QEXP*	N	2	
8	*W*	N	6.2	Wasserstand im Fluss in m
9	*AUSUFER*	N	5.2	Faktor Ausuferung
10	*COM*	Z	20	Kommentar

4.6 Vorgabe von Kopplungen zwischen Gewässern

Mit Hilfe der Datei {proj}gewa.dbf wird das Strangnetz Fließgewässer beschrieben und die Kopplung von Standgewässern realisiert. Auch eine Kopplung zwischen Standgewässern und den Fließgewässern und umgekehrt ist möglich. Schließlich ist auch eine Kopplung zwischen Brunnen und Fließgewässern möglich. In der Tabelle 4-14 ist die Struktur der Datenbank geogewa.dbf zu sehen.

Tabelle 4-14: Struktur der Kopplungsdatei geogewa.dbf → home/database/{proj}gewa.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*VON*	Z	3	Stand- oder Fließgewässer oder Brunnen *VON*
2	*NAME*	Z	3	mündet in Standgewässer *NAME* oder
3	*LUPE*	Z	1 | 2	Flussabschnitt *NAME*, *LUPE*, *IS*, *JZ*, *MG*
4	*IS*	N	3	(*LUPE*, *IS*, *JZ*, *MG* leer, wenn *NAME* ein
5	*JZ*	N	3	Standgewässer ist)
6	*MG*	N	2	
7	*HUEBER*	N	6.2	Überlaufhöhe der Kopplung VON (nur bei ART = „s“)
8	*QMAX*	N	6.2	Maximale Menge = $QMAX \cdot 10^{QMAXE}$
9	*QMAXE*	N	2	in *Q-MASS*
10	*FAKTDRV*	N	6.2	Faktor Druckverlust der Überleitung
11	*FAKTDRVE*	N	2	$f_{drv} = FAKTDRV \cdot 10^{FAKTDRVE}$ in $(m^3/s)/m$
12	*HEINLAUF*	N	6.2	Einlaufhöhe in m NHN
13	*HAUSLAUF*	N	6.2	Auslaufhöhe in m NHN
14	*DATUMA*	Datum	8	Die Kopplung ist von *DATUMA* bis
15	*DATUME*	Datum	8	*DATUME* in Betrieb.
14	*ZEITA*	N	8.1	Die Kopplung ist von *ZEITA* bis
15	*ZEITE*	N	8.1	*ZEITE* in Betrieb.
16	*COM*	Z	20	Kommentar

Folgende Gewässerkopplungen sind möglich:

Kopplung Brunnen → Fließgewässer

- Im Feld *VON* wird der Brunnenname und in *NAME*, *LUPE*, *IS*, *JZ*, *MG* der Flussabschnitt kodiert, in den die Förderrate des Brunnens eingeleitet werden soll. Die Felder 7 bis 13 müssen leer bzw. Null gesetzt sein. *VON* muss den Brunnen eindeutig beschreiben, d.h. durch das Feld *NAME* in der rast.dbf. Bei Nichtbeachtung wird der erste identische Brunnen verwendet. Es können auch mehrere Brunnen gleichzeitig an einen Flussabschnitt gekoppelt werden. Nur $Q < 0$ (Grundwasserentnahme) wird berücksichtigt, andernfalls erfolgt keine Kopplung und der betreffende Brunnen wird während der Berechnung als Hinweis ausgegeben. Für den gekoppelten Flussabschnitt darf in der rabe.dbf nicht zeitgleichzeitig eine Q-Vorgabe als Randwert erfolgen, andernfalls bricht die Simulation ab.

Kopplung Fließgewässer → Fließgewässer

- Der Fluss *VON* mündet in den Flussabschnitt *NAME*, *LUPE*, *IS*, *JZ*, *MG*. Der Gesamtfluss wird eingeleitet. Die Felder 7 bis 13 müssen leer bzw. Null gesetzt sein. Die Sohle des Flusses *VON* muss größer oder gleich der Sohle des Flusses *NAME* sein.

- Wenn eine indirekte Kopplung Fließgew. → Fließgew. realisiert werden soll (zum Beispiel über ein Schöpfwerk), muss eine Kopplung Fließgew. → Standgew. und eine anschließende indirekte Kopplung Standgew. → Fließgew. vorgegeben werden. Die Parameter des Standgewässers (= Pumpensumpf) können so vorgegeben werden, dass keine Auswirkungen auf den Grundwasserstand berechnet werden (Ankopplung mit äußerst geringem Leitwert).

Kopplung Fließgewässer → Standgewässer

- Im Feld *VON* wird der Flussname und in *NAME* das Standgewässer eingetragen. Der Gesamtfluss wird eingeleitet. Die Felder 7 bis 13 müssen leer bzw. Null gesetzt sein.

Direkte Kopplung Standgewässer → Fließgewässer (*HUEBER* > 0)

- Bei einem Wasserstand von H(*VON*) > max(H(*NAME*), *HUEBER*) wird solange Wasser in das Fließgewässer *NAME* fließen, bis entweder obige Bedingung nicht mehr erfüllt ist oder *QMAX* erreicht ist. Bei Vorgabe von *FAKTDRV*, *HEINLAUF*, *HAUSLAUF* muss H(*VON*) > *HEINLAUF* und H(*NAME*) < *HAUSLAUF* gelten, damit Wasser aus *VON* nach *NAME* fließen kann. Die maximale Menge ergibt sich zu QMAX = min(*QMAX*, f_{drv} * sqrt (h_{ein}^2-h_{aus}^2)).

Indirekte Kopplung Standgewässer → Fließgewässer (*HUEBER* = 0)

- Das aus *VON* mit einer Pumpanlage o.ä. geförderte Wasser Q_{rand}(t) (Vorgabe oder Realisierung eines bestimmten Wasserspiegels im Standgewässer *VON* in {proj}rabe.dbf) wird in den Fluss *NAME* (realisiert am Beginn des Fließgewässers) eingespeist, Begrenzung *QMAX*. Ausgewiesen wird in *VON* ein um die Überleitung vermindertes Q_{rand}(t) und im Fluss *NAME* ein höherer Wasserstand infolge der zusätzlichen Starteinspeisung.

Direkte Kopplung Standgewässer → Standgewässer (*HUEBER* > 0)

- Bei einem Wasserstand von H(*VON*) > max(H(*NAME*), *HUEBER*) wird solange Wasser nach dem Standgewässer *NAME* fließen, bis entweder obige Bedingung nicht mehr erfüllt ist oder *QMAX* erreicht ist. Bei Vorgabe von *FAKTDRV*, *HEINLAUF*, *HAUSLAUF* muss H(*VON*) > *HEINLAUF* und H(*NAME*) < *HAUSLAUF* gelten, damit Wasser von *VON* nach *NAME* fließen kann. Die maximale Menge ergibt sich zu QMAX = min(*QMAX*, f_{drv}* sqrt (h_{ein}^2-h_{aus}^2)).
- Die Kopplung Standgew. ←→ Standgew. kann über eine Vorgabe von zwei Datensätzen in jeweils eine der beiden Richtungen realisiert werden (siehe Bsp. res/ren in Tabelle 4-15).

Direkte Kopplung Standgewässer → Standgewässer (wasserstandsabhängiger Abfluss beim Standgewässer VON)

- Eine vereinfachte Möglichkeit der wasserstandsabhängigen Abflusssteuerung kann durch die gleichzeitige mehrfache Eingabe von Kopplungen vom Standgewässer *VON* zum Standgewässer *NAME* erfolgen. Eine aufsteigende Sortierung nach dem Feld HUEBER ist hierbei zwingend notwendig, vergleiche hierzu Tabelle 4-16. Bei den aufgeführten Wasserständen HUEBER kann maximal die angegebene Überlaufmenge QMAX · 10^{QMAXE} übergleitet werden. Wenn der Wasserstand HUEBER unterschritten wird, wird automatisch der vorhergehende Eintrag für die Berechnung verwendet. Im Ergebnis wird eine wasserstandsabhängige Stufenfunktion des Abflusses ausgewiesen (siehe Abbildung 4-8).
- Zu beachten ist, dass mit dieser Möglichkeit keine vom Unterwasser abhängige Abflusssteuerung möglich ist.

Indirekte Kopplung Standgewässer → Standgewässer (*HUEBER* = 0)

- Das in *VON* geförderte Wasser Q_{rand}(t) (Vorgabe oder Realisierung eines bestimmten Wasserspiegels im Standgewässer *VON* mit einer Pumpanlage o.ä. über {proj}rabe.dbf) wird in

das Standgewässer *NAME* eingespeist, Begrenzung *QMAX*. Ausgewiesen wird in *VON* ein um die Überleitung vermindertes $Q_{rand}(t)$ und in *NAME* ein höherer Wasserstand infolge der zusätzlichen Einspeisung.

Die folgende Tabelle zeigt einige Beispiele.

Tabelle 4-15: Beispiele für Gewässerkopplungen

VON	*NAME*	*LUPE*	*IS*	*JZ*	*MG*	*HUEBER*	...
fl1	fls		3	5	2		
fl2	fls		7	11	1		
res	ren					75.5	
ren	res					75.5	
rzw	rha						

Der Fluss fl1 mündet im Element 3, 5, 2 und der Fluss fl2 im Element 7, 11, 1 in den Fluss fls. Die Standgewässer res und ren haben ab 75,5 m einen gemeinsamen Wasserspiegel, denn falls der Wasserstand in res höher als 75,5 m ist und ren unter dem aktuellen Wasserstand von res liegt, erfolgt ein Überlauf von res nach ren. Dies gilt aber auch für den umgekehrten Fall (siehe vorletzte Zeile). In der letzten Zeile wird festgelegt, dass alles Wasser, das sich in rzw als $Q_{rand}(t)$ ergeben würde, z.B. durch Festlegung eines bestimmten Wasserspiegels im Standgewässer, der nur durch Abpumpen realisiert werden kann, in das Standgewässer rha eingeleitet wird. Ausgewiesen wird in rzw ein $Q_{rand}(t) = 0$ und in rha ein höherer Wasserstand infolge der zusätzlichen Einspeisung.

Tabelle 4-16: Kopplung Standgewässer mit wasserstandsabhängigem Überlauf

VON	NAME	LUPE	IS	JZ	MG	HUEBER	QMAX	QMAXE	DATUMA	DATUME
rka	rns					147,4	0,001		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					147,61	1		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					147,8	2		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					147,96	3		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					148,09	4		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					148,15	4,5		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					148,2	4,9		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					148,33	6		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					148,43	7		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					148,5	7,6		02.01.2071	01.01.2200
rka	rns					148,53	8		02.01.2071	01.01.2200
						0	0			

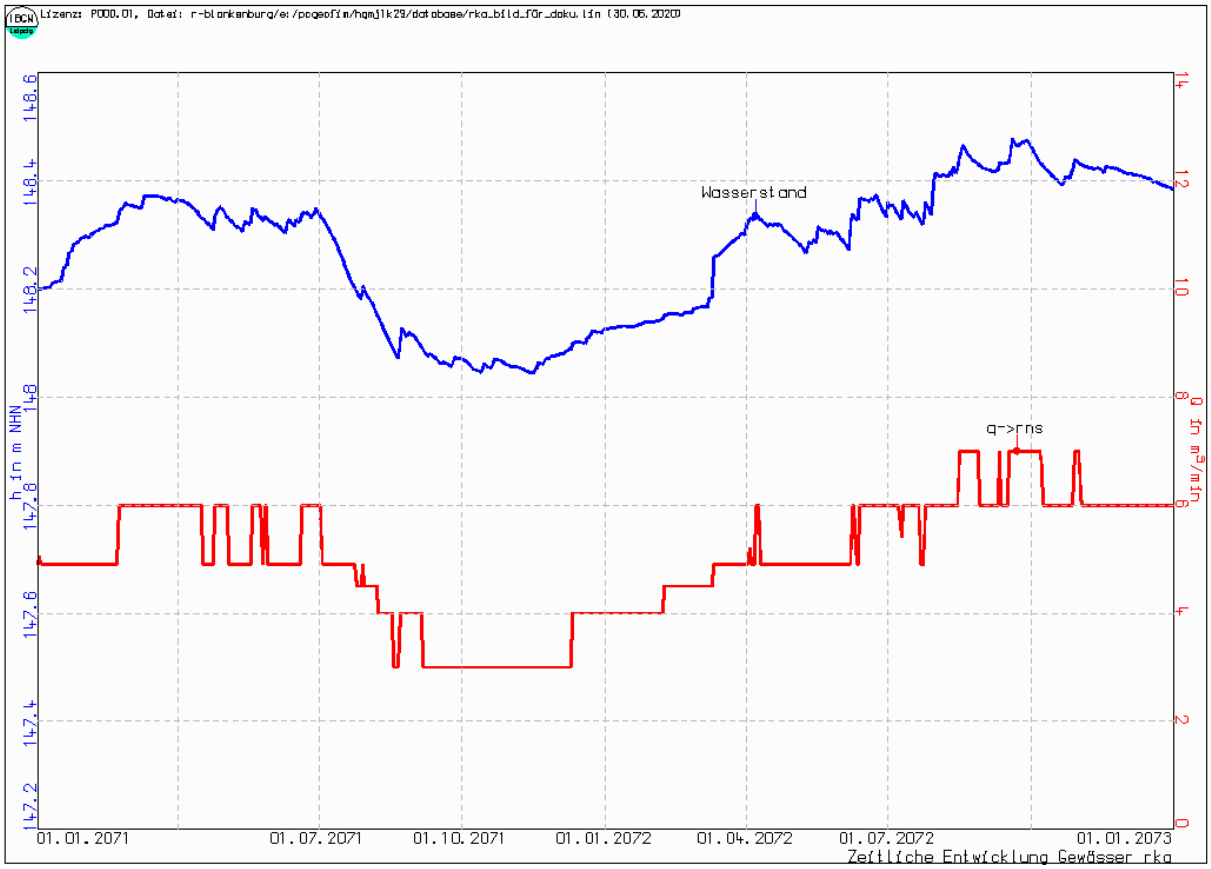


Abbildung 4-8: Ganglinien bei wasserstandsabhängigem Überlauf am Gewässer rka

4.7 Definition von Brunnen- und Randbedingungsgruppen

Es wurde die Möglichkeit geschaffen, Brunnengruppen und Randbedingungsgruppen zu bilden. Für diese Gruppen kann im Postprozess die Gesamtwasserhebung als Ganglinie ausgegeben werden (Grafik und Text). Die Vorgabe der Gruppen erfolgt in der Datei {proj}grup.dbf. Damit auch Untergruppen realisiert werden können, kann ein Brunnen bzw. eine Randbedingung bis zu drei Gruppen angehören. Die Tabelle 4-17 zeigt die Struktur und die Tabelle 4-18 ein Beispiel.

Tabelle 4-17: Struktur der Datei {proj}grup.dbf.

Feldname	Typ	Länge
NAME	Zeichen	3
LUPE	Zeichen	1 | 2
IS	Numerisch	3
JZ	Numerisch	3
MG	Numerisch	2
GRUPPE1	Zeichen	8
GRUPPE2	Zeichen	8
GRUPPE3	Zeichen	8
COM	Zeichen	20

Tabelle 4-18: Ausschnitt aus der Definition von Gruppen im Beispiel Altlast

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	NAME	LUPE	IS	JZ	MG	GRUPPE1	GRUPPE2	GRUPPE3	COM
2	bru		14	27	0	brunnen			Summe q für alle Brunnen
3	bru		13	25	0	brunnen			
4	bru		12	23	0	brunnen			
5	bru		12	20	0	brunnen			
6	bru		15	9	0	brunnen			
7	bru		17	6	0	brunnen			
8	bru		17	3	0	brunnen			
9	bru		26	9	0	brunnen			
10	flu		9	1	1	Fluss	fliessgw		Gruppe1: Summation Fluss
11	flu		9	2	1	Fluss	fliessgw		Gruppe2: Summation alle
12	flu		8	3	1	Fluss	fliessgw		Fliessgewässer
13	flu		7	4	1	Fluss	fliessgw		
14	...								
15	flu		8	29	1	Fluss	fliessgw		
16	bac		33	19	1	Bach	fliessgw		Gruppe1: Summation Bach
17	bac		32	19	1	Bach	fliessgw		
18	...								
19	bac		21	19	1	Bach	fliessgw		
20	gra		16	21	1	Graben	fliessgw		Gruppe1:Summation Graben
21	gra		15	21	1	Graben	fliessgw		
22	...								
23	gra		8	29	1	Graben	fliessgw		
24									

altlgrup

4.8 Kopplung Randbedingungsgruppe an Fließgewässerabschnitt

Seit Version 17.3 des Simulators Geofim ist die Kopplung einer Randbedingungsgruppe an einen beliebigen Fließgewässerabschnitt möglich. Damit kann der summarische Volumenstrom, der über die Randbedingungsgruppe berechnet wird, gezielt einem Fluss zugeführt werden. Da es sich bei den Gruppen um ein bilanzseitiges Ergebnis nach Beendigung eines Simulationszeitschritts handelt, wird der Volumenstrom erst im nachfolgenden Zeitschritt in das Fließgewässerelement eingespeist. Von Geofim wird der summarische Volumenstrom nur dann verwendet, wenn dieser netto eine Grundwasserentnahme darstellt, einzelne Teilvolumenströme können demnach auch in das Grundwasser einspeisen.

Für die Kopplung als Gruppe sind nur bestimmte Randbedingungsarten zulässig:

- Randbedingung 1. Art
- Randbedingung 2. Art
- Randbedingung 3. Art
- Randbedingung Tagebau
- Randbedingung Brunnen (horizontal und vertikal)

Die in der Gruppe enthaltenen Randbedingungen werden von Geofim beim Einlesen geprüft und ggf. mit einer Fehlermeldung quittiert. Die Angaben für die Kopplungen sind in der Struktur {proj}gruf.dbf zu definieren, die in Tabelle 4-19 aufgeführt ist. Optional kann eine Zeitabhängigkeit vorgegeben werden. Um das Einlesen der Datei {proj}gruf.dbf zu aktivieren, ist in der Steuerdatei das Schlüsselwort #GRUFLU im Feld *JNR* auf „r“ zu setzen.

Tabelle 4-19: Struktur der Tabelle {proj}gruf.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
GRUPPE	Z	3	Name der Randbedingungsgruppe aus {proj}grup.dbf
FLNAME	Z	3	Name des Fließgewässerelements
LUPE	Z | N	1 | 2	Lupe
IS	N	3	Index IS
JZ	N	3	Index JZ
MG	N	2	Modellgrundwasserleiter
DATUMA	D	8	Beginn der Kopplung
ZEITA	N	8.1	
DATUME	D	8	Ende der Kopplung
ZEITE	N	8.1	
COM	Z	10	Kommentar

4.9 Vorgabe von Kopplungen zwischen Entnahme- und Infiltrationsbrunnen

Für die Migrationsberechnung ist eine Kopplung von Entnahme- und Infiltrationsbrunnen realisiert, mit der Möglichkeit der Vorgabe einer Abreicherung der Partialdichte in Prozent. Die Kopplung erfolgt in der Steuerdatei über das Schlüsselwort #INFILTRATION, die Daten werden in der Datei {proj}infi.dbf vorgegeben. Sie enthält die Namen der Entnahme- und der Infiltrationsbrunnen, die Abreicherung und eventuell einzuhaltende Grenzen. Bei Vorgabe für mehr als einen Migranten muss die Struktur (Tabelle 4-20) entsprechend erweitert werden.

Tabelle 4-20: Struktur der Datei geoinfi.dbf → home/database/{proj}infi.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*VON*	Z	3	Name und Element des Entnahmebrunnens
2	*LUPEV*	Z	1 | 2	
3	*ISV*	N	3	
4	*JZV*	N	3	
5	*NACH*	Z	3	Name und Element des Infiltrationsbrunnens
6	*LUPEN*	Z	1 | 2	
7	*ISN*	N	3	
8	*JZN*	N	3	
9	*PROZENT1*	N	5.1	Abreicherung um PROZENT für Migrant 1
10	*MIG1GR*	N	5.3	Untere Grenze für Abreicherung für Migrant 1 MIG1GR $10^{MIG1GRE}$ in RHO-MASS
11	*MIG1GRE*	N	2	
12	*PROZENT2*	N	5.1	wie oben, jedoch für Migrant 2
13	*MIG2GR*	N	5.3	wie oben, jedoch für Migrant 2
14	*MIG2GRE*	N	2	
15	*COM*	Z	20	Kommentar

4.10 Vorgabe der Grundwasserneubildung

In der Tabelle 4-21 sind die verschiedenen Möglichkeiten zur Vorgabe der Grundwasserneubildung zusammengestellt.

Tabelle 4-21: Vorgabe der Grundwasserneubildung im Programmsystem PCGEOFIM

Grundwasserneubildung	**Ortsabhängigkeit**	**Zeitabhängigkeit**
zeitkonstant	Feld *GWR* in {proj}par{i}.dbf	-
zeitabhängig	Feld *GWR* in {proj}par{i}.dbf	Abweichungen vom Mittelwert in {proj}gwfz.dbf
flurabstandsabhängig und zeitkonstant	{proj}gwf.dbf (elementweise Vorgabe) oder {proj}gwfi.dbf und {prof}terr.dbf (klassenweise Vorgabe)	-
flurabstands- und zeitabhängig (einfaches Faktorverfahren der Zeitabhängigkeit)	{proj}gwf.dbf (elementweise Vorgabe) oder {proj}gwfi.dbf und {proj}terr.dbf (klassenweise Vorgabe)	Abweichungen vom Mittelwert in {proj}gwfz.dbf
flurabstands- und zeitabhängig (komplexes Verfahren der Zeitabhängigkeit auf Basis flurferner/flurnaher Werte)	Klassifizierung in Grundwasserneubildungsklassen {proj}terr.dbf	Flurferne und flurnahe Neubildung in {proj}gwfu.dbf (bis zu 10 verschiedene Flurabstände definierbar)
auf Basis von Messwerten (i.A. Sickerwasserdaten von Lysimeterstationen)	Klassifizierung in Grundwasserneubildungsklassen {proj}terr.dbf	Flurferne Neubildung in {proj}lysi.dbf, Flurnahe Neubildung (korrigierter Niederschlag minus Evapotranspiration) in {proj}klim.dbf

Der Fall "zeitkonstant" wurde im Abschnitt 3.1 beim Aufbau der globalen Parameterdatei vorgestellt. Im Feld *GWR* kann die Grundwasserneubildung für jedes finite Volumenelement vorgegeben werden.

4.10.1 Flurabstandsabhängige Grundwasserneubildung

Mit der von Bagrov und Glugla (Glugla, et al., 1976) entwickelten Methode zur Bestimmung des langjährigen Mittelwertes der Grundwasserneubildung im Lockergestein wird aus den für die Verdunstung maßgebenden Standortfaktoren und dem mittleren Niederschlag der Gesamtabfluss ermittelt. Wesentlichen Einfluss auf die Verdunstung hat der Flurabstand (Abstand

zwischen Gelände und Grundwasserspiegel). Für verschiedene Flurabstände wird die Methode von Bagrov und Glugla angewendet (z.B. mit Hilfe eines Bodenwasserhaushaltsmodells wie das Programm ABIMO, Bundesanstalt für Gewässerkunde, Außenstelle Berlin, 1997) und das sich ergebende Polygon in die Datei {proj}gwf.dbf eingetragen. Der Reduktionsfaktor gibt an, welcher Teil des Gesamtabflusses nicht in das Grundwasser gelangt.

Die Vorgabe kann elementweise oder klassenweise erfolgen. Empfohlen wird die klassenweise Vorgabe, weil sie kompatibel zu den im Anschluss beschriebenen Möglichkeiten der Vorgabe der Grundwasserneubildung ist.

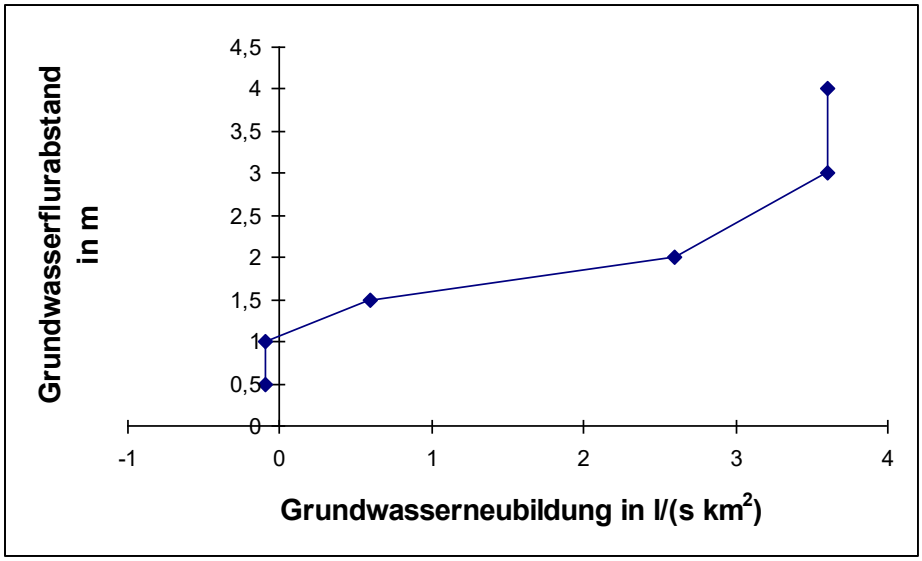


Abbildung 4-9: Polygonfunktion Grundwasserneubildung als Funktion des Flurabstands (teufenorientiert)

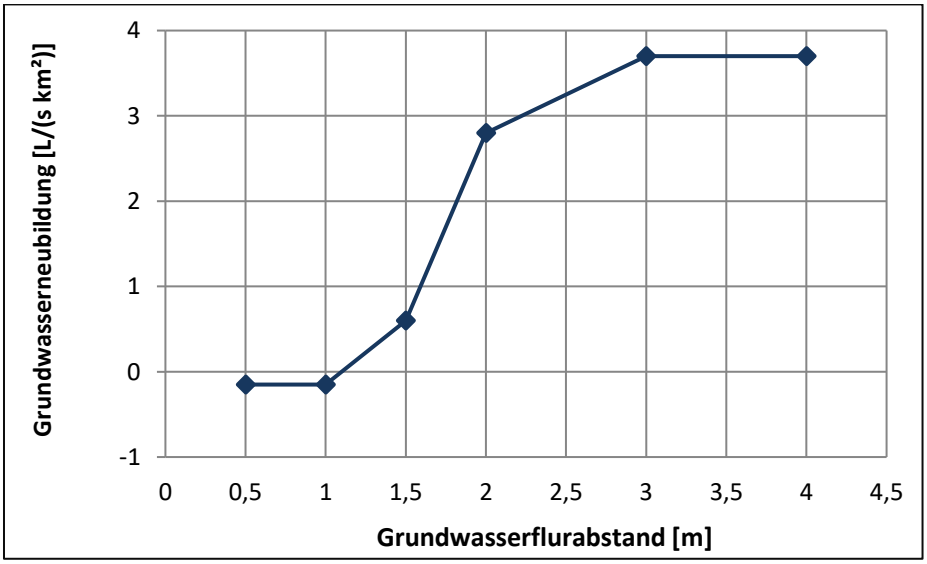


Abbildung 4-10: Polygonfunktion der Grundwasserneubildung als Funktion des Flurabstands

Tabelle 4-22: Struktur des Datensatzes flurabstandsabhängige Neubildung geogwf.dbf → home/database/{proj}gwf.dbf (elementeweise Vorgabe)

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterungen
1	*LUPE*	Z	1 | 2	Lupenbezeichnung
2	*IS*	N	3	Nummerierung in x-Richtung
3	*JZ*	N	3	Nummerierung in y-Richtung
4	*MG*	N	2	Nummerierung in z-Richtung
5	*GEL*	N	6.2	Gelände in m NHN[1]
6	*F1*	N	3.1	Vorgabe als Polygon:
7	*G1*	N	4.1	
8	*F2*	N	3.1	*Fi* - Flurabstand im m
9	*G2*	N	4.1	*Gi* - Grundwasserneubildung (positiv) oder
10	*F3*	N	3.1	Zehrung (negativ) in l/(s*km^2) bzw.
11	*G3*	N	4.1	10^{-9} m/s
12	*F4*	N	3.1	
13	*G4*	N	4.1	*GWR*(f) = *G*(*F*) · (1-*RDF*/100)
14	*F5*	N	3.1	
15	*G5*	N	4.1	Eine Vorgabe folgender Flurabstände *F1*…*F7*
16	*F6*	N	3.1	hat sich in der Großraummodellierung bewährt:
17	*G6*	N	4.1	0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 3.0, 4.0 m
18	*F7*	N	3.1	
19	*G7*	N	4.1	
20	*RDF*	N	2	Reduktionsfaktor in %
21	*COM*	Z	20	Kommentar

[1]Wenn mit der {proj}gwf.dbf simuliert wird, muss hier das Gelände vorgegeben werden. Das Gelände in den Dateien {proj}par{i}.dbf wird ignoriert.

Hinweis:

Wenn in {proj}par{i}.dbf *GWR* ≠ 0 vorgegeben wurde, wird die Vorgabe einer flurabstands-abhängigen Neubildung ignoriert.

Tabelle 4-23: Struktur des Datensatzes flurabstandsabhängige Neubildung geogwfi.dbf → home/database/{proj}gwfi.dbf (klassenweise Vorgabe)

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterungen
1	*IGWF*	N	4	Grundwasserneubildungsklasse
2	*F1*	N	3.1	Vorgabe als Polygon:
3	*G1*	N	4.1	
4	*F2*	N	3.1	*Fi* - Flurabstand im m
5	*G2*	N	4.1	*Gi* - Grundwasserneubildung (positiv) oder
6	*F3*	N	3.1	Zehrung (negativ) in l/(s*km^2) bzw.
7	*G3*	N	4.1	10^{-9} m/s
8	*F4*	N	3.1	
9	*G4*	N	4.1	*GWR*(f) = *G*(*F*) · (1-*RDF*/100)
10	*F5*	N	3.1	
11	*G5*	N	4.1	Eine Vorgabe folgender Flurabstände *F1*…*F7*
12	*F6*	N	3.1	hat sich in der Großraummodellierung bewährt:
13	*G6*	N	4.1	0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 3.0, 4.0 m
14	*F7*	N	3.1	
15	*G7*	N	4.1	
16	*RDF*	N	2	Reduktionsfaktor in %
17	*COM*	Z	20	Kommentar

Hinweise:

Wenn in {proj}par{i}.dbf *GWR* ≠ 0 vorgegeben wurde, wird die Vorgabe einer flurabstandsabhängigen Neubildung ignoriert.

Der Flurabstand für F1 sollte immer vorgegeben sein. Wird das Polygon F2-F7 nicht vollständig definiert, ergänzt Geofim die fehlenden Einträge wie folgt:

- sind 2 aufeinanderfolgende F-Einträge null, wird der vorangegangene Eintrag des Flurabstands um 0,1 m erhöht
- die zugehörige Grundwasserneubildung wird ebenfalls vom vorangegangenen Eintrag verwendet, jedoch nicht verändert

Die Abbildung 4-11 verdeutlicht den Fall, falls das Polygon nur für die Flurabstände F1-F4 definiert wurde:

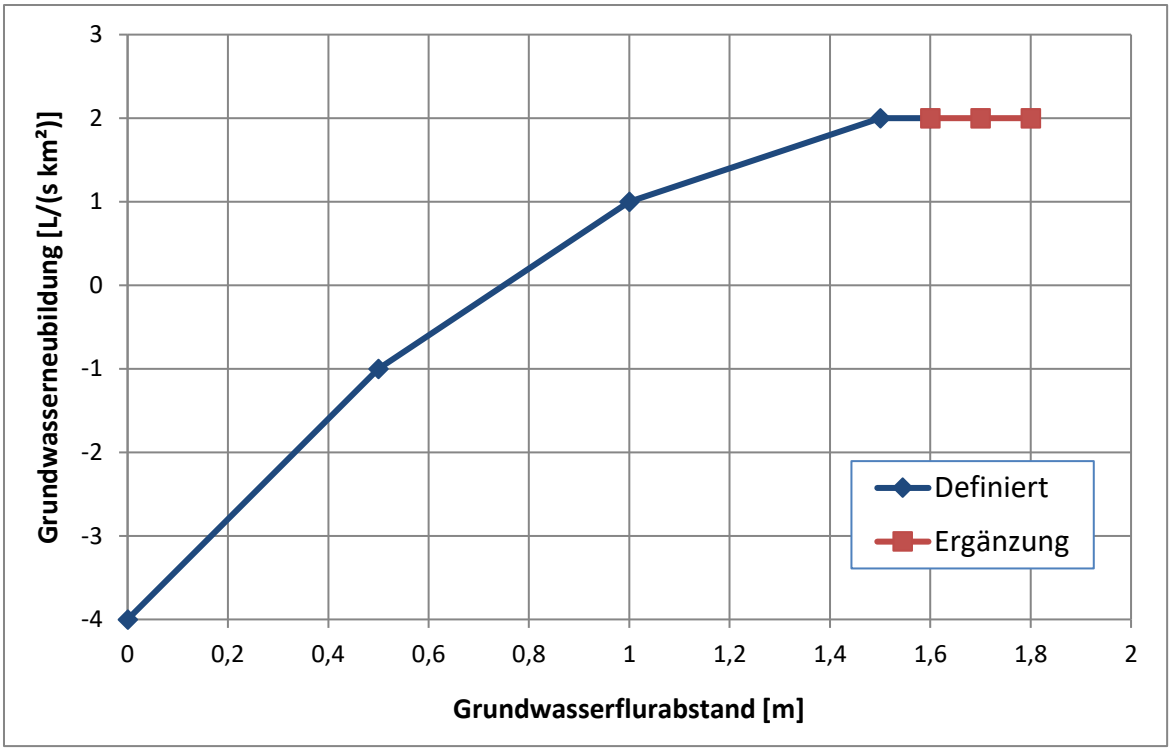


Abbildung 4-11: Beispieldarstellung im Falle der unvollständigen Polygonvorgabe

4.10.2 Zeit- und flurabstandsabhängige Neubildung

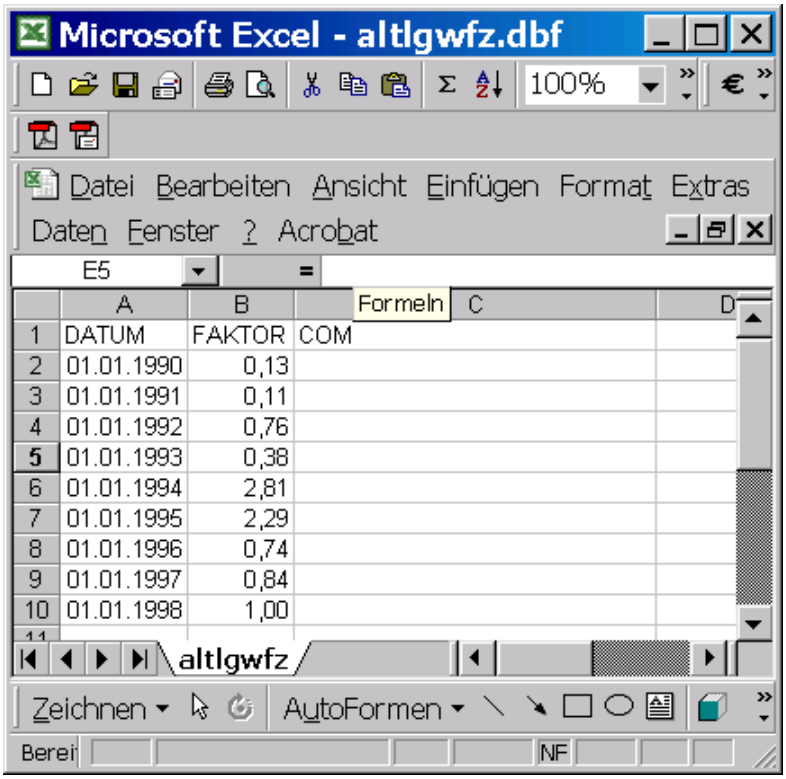
Viele Modellierungen im Grundwasserbereich erfordern die Berücksichtigung einer zeitabhängigen Grundwasserneubildung. Dies wird besonders deutlich, wenn man ein Modell kalibrieren will. Die gemessenen Pegel in oberen Grundwasserleitern weisen einen innerjährlichen und mehrjährigen Gang auf, der nur nachgebildet werden kann, wenn man die Grundwasserneubildung zeitabhängig vorgibt. Eine Möglichkeit besteht in der Vorgabe einer generellen Zeitabhängigkeit der Grundwasserneubildung. Auf diese Art und Weise können trockene und feuchte Jahre oder Monate bei der Kalibrierung berücksichtigt werden. Vorgegeben werden die Faktoren im Datensatz {proj}gwfz.dbf.

Tabelle 4-24: Struktur des Datensatzes Faktor zeitabhängige Neubildung geogwfz.dbf → home/database/{proj}gwfz.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*DATUM*	Datum	8	ab DATUM bzw. Zeit wird die GWR mit FAKTOR multipliziert
1	*ZEIT*	N	8.1	
2	*FAKTOR*	N	4.2	
3	*COM*	Z	20	Kommentar

Die Tabelle 4-25 zeigt die Datei altlgwfz.dbf aus dem Testbeispiel Altlast. Die Ergebnisse der Berechnung für zwei Messstellen sind in der Abbildung 4-12 zu sehen. Es zeigt sich, dass mit einer dem Jahresgang angepassten Grundwasserneubildung eine recht gute Übereinstimmung zwischen gemessenen und berechneten Werten erreicht werden kann.

Tabelle 4-25: Vorgabe einer jährlich sich ändernden Grundwasserneubildung



	A	B	C
1	DATUM	FAKTOR	COM
2	01.01.1990	0,13	
3	01.01.1991	0,11	
4	01.01.1992	0,76	
5	01.01.1993	0,38	
6	01.01.1994	2,81	
7	01.01.1995	2,29	
8	01.01.1996	0,74	
9	01.01.1997	0,84	
10	01.01.1998	1,00	

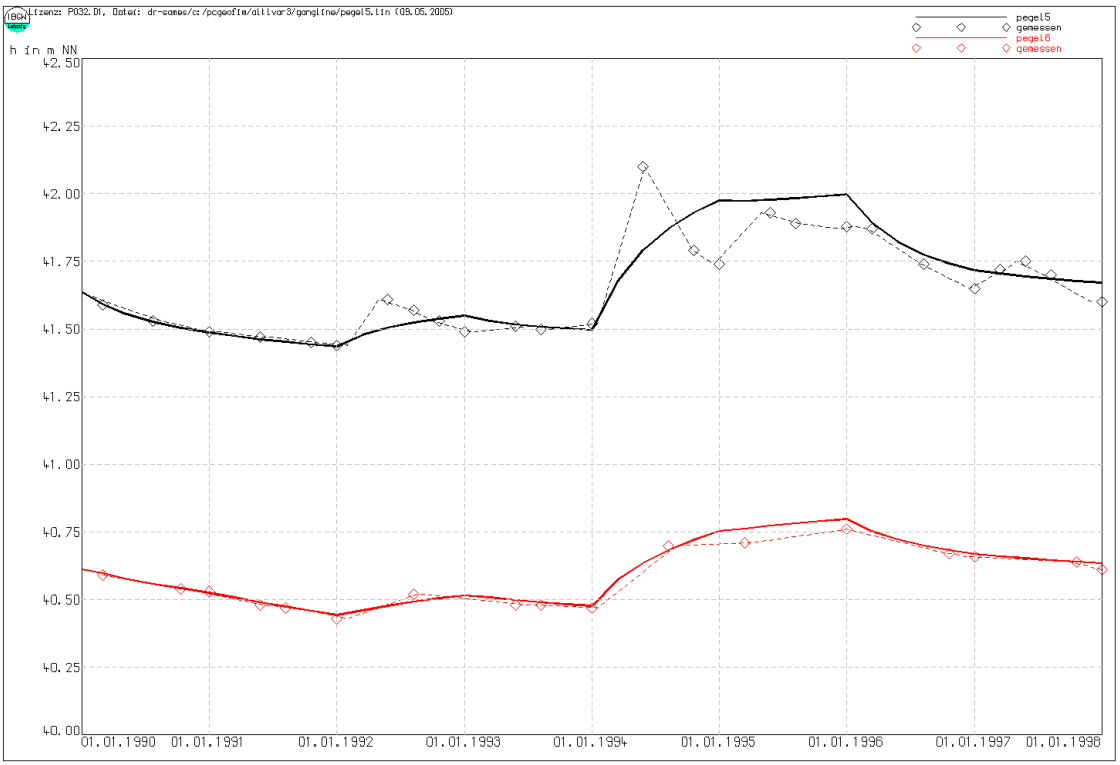


Abbildung 4-12: Messstellenanpassung bei Vorgabe der Zeitabhängigkeit der GWN mit Hilfe der Faktoren altlgwfz.dbf

Eine genauere Methode ist die Einteilung des Gebietes in GWR-Klassen und die zeit- und flurabstandsabhängige Vorgabe für jede Klasse. Die Zuordnung der Grundwasserneubildungsfunktion zum Gitterpunkt erfolgt im Datensatz {proj}terr.dbf und die Vorgabe der zeit- und flurabstandsabhängigen Neubildung in {proj}gwfu.dbf.

Tabelle 4-26: Struktur des Datensatzes geoterr.dbf → home/database/{proj}terr.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*LUPE*	Z	1 | 2	Lupe[2]
2	*IS*	N	3	Nummerierung in x-Richtung
3	*JZ*	N	3	Nummerierung in y-Richtung
4	*MG*	N	2	Nummerierung in z-Richtung
5	*GEL*	N	6.1	Gelände in m NHN[1]
6	*IGWF*	N	3 | 4	Grundwasserneubildungsklasse
7	*COM*	Z	20	Kommentar

[1] Wenn mit der {proj}terr.dbf simuliert wird, muss hier das Gelände vorgegeben werden. Das Gelände in den Dateien {proj}par{i}.dbf wird ignoriert.

[2] Die Einträge müssen aufsteigend nach LUPE sortiert vorgegeben werden.

Tabelle 4-27: Struktur des Datensatzes geoterz.dbf home/database/{proj}terr.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
DATUM	D	8	Zeitpunkt der Änderung von *GEL* bzw. *IGWF*
ZEIT	N	8.1	
LUPE	Z | N	1 | 2	Lupenbezeichnung oder -nummer
IS	N	3	Indizierung in X-Richtung
JZ	N	3	Indizierung in Y-Richtung
MG	N	2	Indizierung in Z-Richtung
GEL	N	6.1	Gelände in m NHN
IGWF	N	5	Grundwasserneubildungsklasse
COM	Z	20	Kommentar

Idealisiert kann man die Funktion Abbildung 4-9 in der Form Abbildung 4-13 nachbilden. Die Kurve wird durch vier Werte beschrieben:

1. Flurabstand flurnah
2. Grundwasserneubildung oder Zehrung für diesen Abstand
3. Flurabstand fern
4. Grundwasserneubildung flurfern

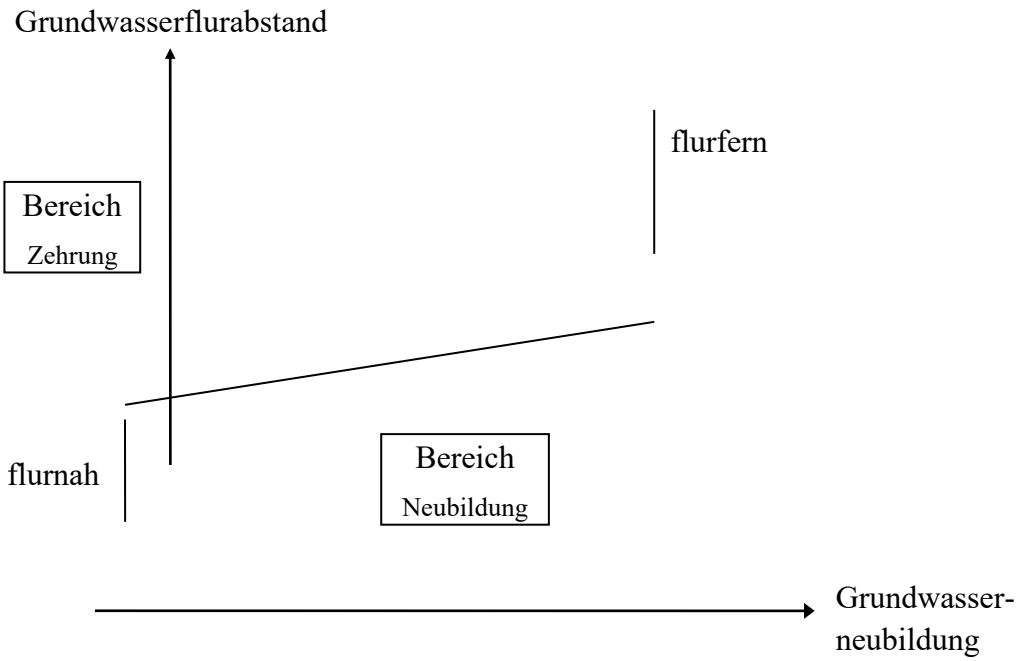


Abbildung 4-13: Die Grundwasserneubildungsfunktion

Diese Werte werden zeitabhängig für jede Grundwasserklasse in der Datei {proj}gwfu.dbf vorgegeben. Es werden 2 Strukturen der gwfu.dbf unterstützt. In der Datei geogwfu.dbf werden die Abstände flurnah sowie flurfern definiert. Über die Struktur geogwfu10 können zwischen 3 und maximal 10 verschiedene Flurabstände definiert werden. Analog zu Abbildung 4-13 wird zwischen den vorgegebenen Stützpunkten linear interpoliert.

Tabelle 4-28: Struktur des Datensatzes geogwfu.dbf → home/database/{proj}gwfu.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	IGWF	N	4	Grundwasserneubildungsklasse
2	DATUM	Datum	8	Datum oder Zeit[1]
2	ZEIT	N	8.1	
3	GWFN	N	4.1	GWN flurnah in l/(s·km^2) bzw. 10^{-9} m/s
4	GWFF	N	4.1	GWN flurfern in l/(s·km^2) bzw. 10^{-9} m/s
5	COM	Z	20	Kommentar

[1]Beim ersten Datensatz jeder GWN-Klasse beschreibt dieser Satz den Flurabstand flurnah und flurfern in m, wenn das Datum leer ist. Erfolgt keine Vorgabe, so werden die Werte 0,5 und 2,5 Meter angenommen.

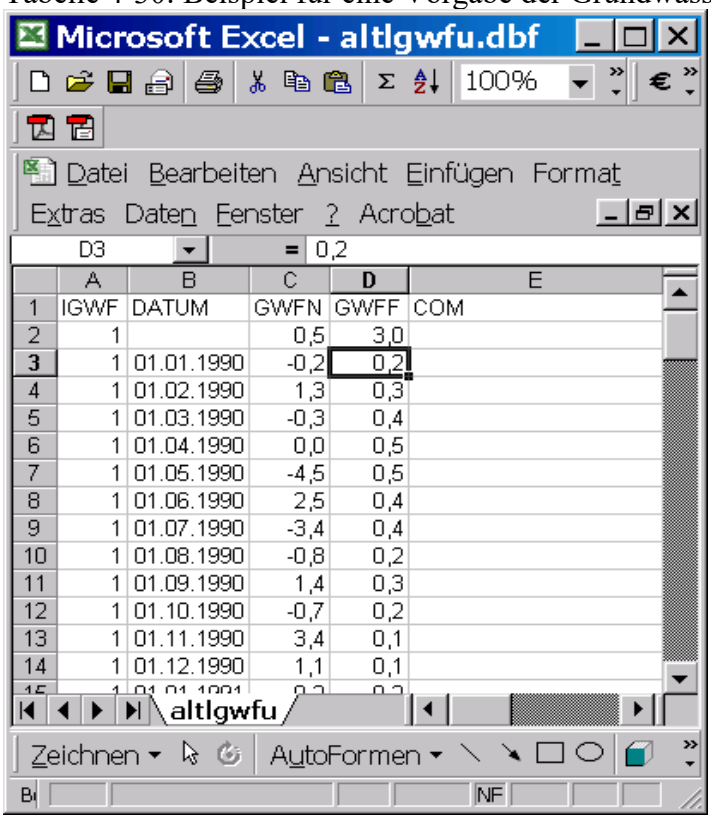
Tabelle 4-29: Struktur des Datensatzes geogwfu10.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
IGWF	N	4	Grundwasserneubildungsklasse
DATUM	Datum	8	Datum oder Zeit[1]
ZEIT	N	8.1	
GWN1	N	5.2	GWN für maximal 10 verschiedene Grundwasser-flurabstände in l/(s·km^2) bzw. 10^{-9} m/s Für GWN1[2] siehe Erläuterung unter der Tabelle
GWN2	N	5.2	
GWN3	N	5.2	
GWN4	N	5.2	
GWN5	N	5.2	
GWN6	N	5.2	
GWN7	N	5.2	
GWN8	N	5.2	
GWN9	N	5.2	
GWN10	N	5.2	
COM	Z	20	Kommentar

[1]Beim ersten Datensatz jeder IGWF-Klasse beschreibt dieser Satz die Flurabstände in Metern, wenn das Datumsfeld leer ist. Erfolgt keine Vorgabe, so werden die Abstände 0,25 m, 0,5 m, 1,0 m, 1,5 m, 2,0 m, 2,5 m, 3,0 m, 3,5 m, 4,0 m, 4,5 m verwendet.

[2]Wird für GWN1 ein Abstand > 0 vorgegeben, erfolgt bei einem Grundwasserflurabstand < GWN1 die Berücksichtigung der Daten aus der Datei klim.dbf (pm_korr – ETP). Dieses Verhalten kann abgeschaltet werden, indem für den Abstand GWN1 = 0 definiert wird. Sind die Daten mehrerer Klimastationen in der klim.dbf hinterlegt, werden die Werte der ersten Station verwendet.

Tabelle 4-30: Beispiel für eine Vorgabe der Grundwasserneubildungsfunktion



IGWF	DATUM	GWFN	GWFF	COM
1		0,5	3,0	
1	01.01.1990	-0,2	0,2	
1	01.02.1990	1,3	0,3	
1	01.03.1990	-0,3	0,4	
1	01.04.1990	0,0	0,5	
1	01.05.1990	-4,5	0,5	
1	01.06.1990	2,5	0,4	
1	01.07.1990	-3,4	0,4	
1	01.08.1990	-0,8	0,2	
1	01.09.1990	1,4	0,3	
1	01.10.1990	-0,7	0,2	
1	01.11.1990	3,4	0,1	
1	01.12.1990	1,1	0,1	

4.10.3 Vorgabe von Klimadaten

In der Wasserwirtschaft wird die Grundwasserneubildung im Allgemeinen in mm/Zeiteinheit vorgegeben. Dies ist auch in PCGEOFIM möglich. Mit Hilfe von Klima- und Lysimeterdaten wird die zeit- und flurabstandsabhängige Grundwasserneubildung ermittelt. Die Struktur geoklim.dbf beschreibt das Klima (korrigierter Niederschlag und potenzielle Verdunstung), geolysi.dbf die gemessene Versickerung und geoevap.dbf die Zehrung von freien Wasserflächen. Die in geoklim.dbf und geoevap.dbf vorgegebenen Klimadaten überschreiben die in der Füllkurvendatei georest.dbf (siehe Tabelle 4-10) vorgegebene Zehrung und den oberirdischen Direktabfluss. Der oberirdische Direktabfluss von der Landfläche (Fläche der Uferböschung) in das Standgewässer wird in diesem Fall modellintern in Abhängigkeit des Wasserstands *HRES* mit *PM_KORR* · (F_{gesamt} - Fläche(*HRES*)) · 0,25 bzw. mit dem nach dem Schlüsselwort #RL_LANDABFLUSS vorgegebenen Faktor berechnet. Optional kann in der Datei rest.dbf (siehe Abschnitt 4.4) ein gewässerspezifischer Faktor des prozentualen Anteils definiert werden. Es wird angenommen, dass die Wirkung der Evapotranspiration auf den Direktabfluss vernachlässigt werden kann.

In den Strukturen geoklim.dbf und geoevap.dbf können optional die Zeitreihen mehrerer Klimastation vorgegeben werden (siehe Tabelle 4-31 und Tabelle 4-33). In Verbindung mit der Struktur georest.dbf (Tabelle 4-10) kann jedem Standgewässer eine der Lage entsprechende Klimastation zugeordnet werden. Insbesondere bei großflächigen Grundwassermodellen lassen sich lokale Klimabedingungen besser abbilden.

Tabelle 4-31: Struktur des Datensatzes geoklim.dbf → home/database/{proj}klim.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
IKLIM[2]	N	3	Optional: Nummer der Klimastation, für die die Datensätze gelten; Angabe von Null ist unzulässig
DATUM	Datum	8	Datum bzw. Zeitpunkt
ZEIT	N	8.1	
PM_KORR	N	6.1	Korrigierter Niederschlag in mm/Zeiteinheit[1]
ETP	N	6.1	Potentielle Evapotranspiration in mm/Zeiteinheit[1]
COM	Z	20	Kommentar

[1]Zeiteinheit = Datum nächster Datensatz minus Datum aktueller Datensatz (daraus folgt, dass *PM_KORR* und *ETP* des letzten Datensatzes ignoriert werden und dass mit dem Klima des vorletzten Datensatzes die Berechnung für alle Zeitpunkte erfolgt, die größer als das *DATUM* im vorletzten Datensatz sind)

[2]Ist das Feld *IKLIM* in der Struktur geoklim.dbf vorhanden, muss auch die Struktur geoevap.dbf das Feld aufweisen

Tabelle 4-32: Struktur des Datensatzes geolysi.dbf → home/database/{proj}lysi.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
IGWF	N	3	Grundwasserneubildungsklasse[1]
DATUM	Datum	8	Datum[2]
GWN	N	6.1	Grundwasserneubildung in mm/Zeiteinheit[3]
MIG1	N	5.3	Schadstoffeintrag in *RHO-MASS*[4]
MIG1E[5]	N	2	$\rho_1 = MIG1 \cdot 10^{MIG1E}$
COM	Z	20	Kommentar

[1]definiert in geoterr.dbf

[2]Die ersten beiden Datensätze jeder IGWF-Klasse beschreiben die Grundwasserflurabstände in Metern, wenn das Datumsfeld leer. Erfolgt keine Vorgabe, werden die Abstände 0,5m und 2,5m verwendet.

[3]Zeiteinheit = Datum nächster Datensatz minus Datum aktueller Datensatz (siehe Bemerkungen zur Tabelle 4-31)

[4]siehe Tabelle 2-1

[5]wenn mehrere Migranten eingetragen werden, muss die Struktur entsprechend erweitert werden

Tabelle 4-33: Struktur des Datensatzes geoevap.dbf → home/database/{proj}evap.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
IKLIM [3]	N	3	Optional: Nummer der Klimastation, für die die Datensätze gelten; die Angabe von Null ist unzulässig
DATUM	Datum	8	Datum oder Zeitpunkt bzw. leer im ersten Datensatz [1]
ZEIT	N	8.1	
EVAW1	N	6.1	Wassertiefe in m (nur erster Datensatz)
EVAW2	N	6.1	Verdunstung von der freien Wasserfläche in mm/Zeiteinheit bei der im ersten Datensatz definierten Wassertiefe [2]
EVAW3	N	6.1	
EVAW4	N	6.1	
EVAW5	N	6.1	

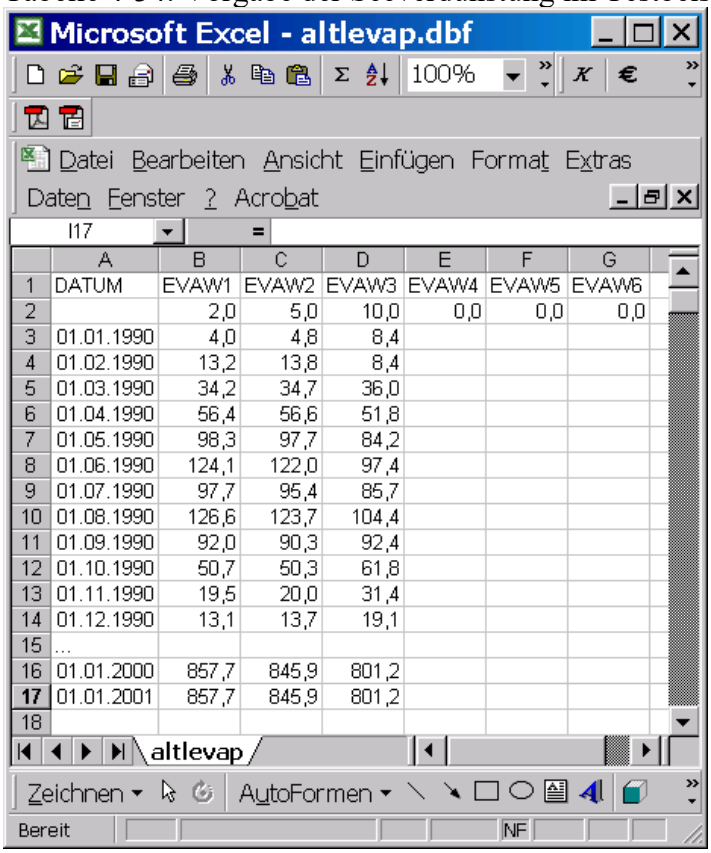
EVAW6	N	6.1	
COM	Z	20	Kommentar

[1]Im ersten Datensatz wird die Wassertiefe definiert. Danach folgt die zeitabhängige Verdunstung. Bei Zeit-Modellen muss für ZEIT ein Leerwert vorgegeben („geblankt“, „null“) und nicht durch die Zahl „0“ ersetzt werden.

[2]Zeiteinheit = Datum nächster Datensatz minus Datum aktueller Datensatz (siehe Bemerkungen zur Tabelle 4-31)

[3]Ist das Feld *IKLIM* in der Struktur geoevap.dbf vorhanden, muss auch die Struktur geoklim.dbf das Feld aufweisen

Tabelle 4-34: Vorgabe der Seeverdunstung im Testbeispiel Altlast



	A	B	C	D	E	F	G
1	DATUM	EVAW1	EVAW2	EVAW3	EVAW4	EVAW5	EVAW6
2		2,0	5,0	10,0	0,0	0,0	0,0
3	01.01.1990	4,0	4,8	8,4			
4	01.02.1990	13,2	13,8	8,4			
5	01.03.1990	34,2	34,7	36,0			
6	01.04.1990	56,4	56,6	51,8			
7	01.05.1990	98,3	97,7	84,2			
8	01.06.1990	124,1	122,0	97,4			
9	01.07.1990	97,7	95,4	85,7			
10	01.08.1990	126,6	123,7	104,4			
11	01.09.1990	92,0	90,3	92,4			
12	01.10.1990	50,7	50,3	61,8			
13	01.11.1990	19,5	20,0	31,4			
14	01.12.1990	13,1	13,7	19,1			
15	...						
16	01.01.2000	857,7	845,9	801,2			
17	01.01.2001	857,7	845,9	801,2			
18							

5 Vorgabe von Transportparametern

Zur Modellierung von Transportprozessen werden Parameter benötigt, die den Transportprozess beschreiben. Diese sind

- Diffusionskoeffizienten (stoffabhängig)
- longitudinale Dispersivität (konstant oder ortsabhängig)
- Faktor longitudinale Dispersivität vertikal, Faktor transversale Dispersivität
- Retardationskoeffizienten (ortsabhängig)
- Abbaukoeffizienten (stoffabhängig)
- Isotherme (stoff- und ortsabhängig)

Die Strömungsrandbedingungen, die Brunnen und die Gewässer ergeben Zu- oder Abflüsse. Zuflüsse der Mengenströmung führen zusammen mit der vorgegebenen Einspeisedichte zu Massequellen beim Stofftransport. Abflüsse der Mengenströmung führen zusammen mit den im Abflussknoten vorhandenen Partialdichten zu Massensenken in der entsprechenden Stofftransportgleichung.

Bei der Migrationsrandbedingung (*ART* = „m“ in der Datei {proj}rast.dbf, siehe Abschnitt 4 auf den Seiten 40, 44 und 47) werden die Partialdichten in vorgegebenen finiten Volumenelementen auf einem bestimmten Niveau (eventuell auch zeitabhängig) festgehalten. Über einen Sonderfall kann auch eine Vorgabe OHNE eine Ab-Konzentration realisiert werden (vgl. Ausführungen auf Seite 47). Die dazu notwendigen Massenquellen bzw. -senken werden berechnet und in den betreffenden Ganglinien ausgewiesen.

Partialdichten können auch für die Randbedingungen Brunnen („b“, „h“ und „r“), die Gewässer („f“ und „s“) und den ungekoppelten RB (s. Abschnitt 4.2, gilt nicht für Modellpegel „p“) vorgegeben werden (eventuell auch zeitabhängig). Bei Einspeisungen werden die in der Datei {proj}rabe.dbf vorgegebenen Partialdichten mit dem berechneten Volumenstrom Q realisiert. Bei Gewässern kann nur die Wirkung vom Gewässer auf den Grundwasserkörper abgebildet und ausgewertet werden, eine Mischung im Gewässerkörper erfolgt nicht. Bei einem Fließgewässer „f“ muss für jeden betroffenen Flussabschnitt eine Partialdichte vorgegeben werden.

Mit der Grundwasserneubildung kann Stoff in das Grundwasser eingetragen werden (siehe Abschnitt 4.10.3).

Es kann die Wirkung der Ein- und Ausspeisung an allen Randbedingungen (auch Modellpegel „p“) auf den Grundwasserkörper ausgewertet werden (siehe Dokumentationen zu Geogang und Geogasci).

5.1 Diffusion

Für jeden Migranten (Stoff), für den eine Partialdichteverteilung berechnet werden soll, kann ein Diffusionskoeffizient (m^2/s) in der folgenden Form eingegeben werden:

Tabelle 5-1: Struktur des Diffusions-Datensatzes geodiff.dbf → home/database/{proj}diff.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*REAL1*	N	7.3	Diffusionskoeffizient D_1 = *REAL1* · 10^{EXP1} in m^2/s
2	*EXP1*	N	3	
3	*REAL2*	N	7.3	Diffusionskoeffizient D_2 = *REAL2* · 10^{EXP2} in m^2/s
4	*EXP2*	N	3	
5	*REAL3*	N	7.3	Diffusionskoeffizient D_3 = *REAL3* · 10^{EXP3} in m^2/s
6	*EXP3*	N	3	
7	*REAL4*	N	7.3	Diffusionskoeffizient D_4 = *REAL4* · 10^{EXP4} in m^2/s
8	*EXP4*	N	3	
9	*REAL5*	N	7.3	Diffusionskoeffizient D_5 = *REAL5* · 10^{EXP5} in m^2/s
10	*EXP5*	N	3	
11	*COM*	Z	20	Kommentar

Im Allgemeinen kann der Diffusionskoeffizient gegenüber dem Dispersionskoeffizienten vernachlässigt werden.

Wenn der Diffusionskoeffizient nicht explizit mit der Datei {proj}diff.dbf vorgegeben wird, kann in der Steuerdatei (Tabelle 2-1) mit dem Feld #DIFFUSION ein Wert für alle Migranten vorgegeben werden.

5.2 Dispersivität

In Abhängigkeit zur Strömungsrichtung lassen sich verschiedene, aus Erfahrungswerten gewonnene, Dispersivitäten vorgeben. Diese sind keine Stoffkennwerte, sondern hängen von den Inhomogenitäten ab, die auf dem Fließweg wirksam werden. Je größer der Fließweg, desto größer sind die Dispersivitäten. Dabei besteht ein Unterschied, ob die Dispersivität in Hauptströmungsrichtung (longitudinal) verläuft oder senkrecht dazu (transversal).

Es können folgende Werte vorgegeben werden:

DLONG Dispersivität entlang der Strömungsrichtung bei horizontaler Strömung, als Richtwert gilt: $\delta_L = 0.017 \cdot$ Fließweg

FLONGV Dispersivität in vertikaler Strömungsrichtung

FTRANS Dispersivität senkrecht zur Strömungsrichtung

Tabelle 5-2: Struktur des Disp.-Datensatzes geodisp.dbf → home/database/{proj}disp.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
DLONG	N	5.1	Longitudinale Dispersivität in m (Standard: 10 m)
FLONGV	N	5.2	Faktor Dispersivität in vertikaler Strömungsrichtung (Standard: 0,1)
FTRANS	N	5.2	Faktor Dispersivität senkrecht zur Strömungsrichtung (Standard: 0,1)
COM	Z	20	Kommentar

Die longitudinale Dispersivität kann auch ortsabhängig in der Felddatensatzbank {proj}ldis.dbf vorgegeben werden (siehe Abschnitt 3.8). In diesem Falle werden nur die Multiplikatoren aus {proj}disp.dbf verwendet.

Wenn der Dispersionskoeffizient nicht explizit mit der Datei {proj}disp.dbf vorgegeben wird, werden die automatisch in der Tabelle 5-2 genannten Standardwerte berücksichtigt. In der Steuerdatei (Tabelle 2-1) kann außerdem anstelle der Datei {proj}disp.dbf ein Wert für *DLONG* im Feld #DISPERSIVITÄT vorgegeben werden.

5.3 Retardationsfaktor

Der Retardationsfaktor ist ein Maß für das Speichervermögen der Feststoffphase im Vergleich zur fluiden Phase, d.h. er gibt die Verzögerung an, die beim Stofftransport infolge Sorption entsteht. Daraus ergibt sich, dass der Retardationskoeffizient ein Stoffkennwert ist und den Wert 1 nicht unterschreiten kann.

Die Eingabe erfolgt als Wert in der Steuerdatei oder als Felddatensatz {proj}reta.dbf (s. Abschnitt 3.8), wobei der Retardationskoeffizient für alle Migranten den gleichen Wert besitzt. Wenn das nicht der Fall ist, müssen Isothermen definiert werden (siehe Abschnitt 5.5).

Wenn der Retardationsfaktor nicht explizit mit der Datei {proj}reta.dbf vorgegeben wird, kann in der Steuerdatei (Tabelle 2-1) im Feld #RETARDATION ein Wert für alle Migranten vorgegeben werden.

5.4 Abbaukoeffizient

Entweder wird der Abbaukoeffizient als Wert für alle Migranten in der Steuerdatei (Eintrag „j“), als Felddatensatz {proj}lamb.dbf (siehe Tabelle 5-3) vorgegeben, konzentrationsabhängig[5] über die Datei {proj}lamc.dbf (Tabelle 5-4) oder λ wird im Datensatz {proj}isot.dbf definiert.

Tabelle 5-3: Struktur des Abbau-Datensatzes geolamb.dbf → home/database/{proj}lamb.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*REAL1*	N	7.3	Abbaukoeffizient λ_1 = *REAL1* · 10^{EXP1} in 1/s
2	*EXP1*	N	3	
3	*REAL2*	N	7.3	Abbaukoeffizient λ_2 = *REAL2* · 10^{EXP2} in 1/s
4	*EXP2*	N	3	
5	*REAL3*	N	7.3	Abbaukoeffizient λ_3 = *REAL3* · 10^{EXP3} in 1/s
6	*EXP3*	N	3	
7	*REAL4*	N	7.3	Abbaukoeffizient λ_4 = *REAL4* · 10^{EXP4} in 1/s
8	*EXP4*	N	3	
9	*REAL5*	N	7.3	Abbaukoeffizient λ_5 = *REAL5* · 10^{EXP5} in 1/s
10	*EXP5*	N	3	
11	*COM*	Z	20	Kommentar

Pro Zeile können in Tabelle 5-3 somit die Abbauraten von 5 Migranten vorgegeben werden. Die Anzahl kann durch Einfügen weiterer Zeilen entsprechend erhöht werden.

Tabelle 5-4: Struktur zur Vorgabe des konzentrationsabhängigen[5] Abbaus geolamc.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
LAMBCN	N	2	Zuordnung zum Finiten Volumenelement in der geopara.dbf (Verwendung von 1, falls nicht vorhanden)
MIGNR	N	2	Nummer des Stoffs/ Komponente
KONZ	N	15.8	Konzentration in RHO_MASS
LAMBDA	N	7.5	Abbaukoeffizient λ(Konz) = *LAMBDA* · $10^{LAMBDAE}$ in 1/s
LAMBDAE	N	3	
COM	Z	20	Kommentar

Die Aktivierung der Option des konzentrationsabhängigen Abbaus erfolgt durch Setzen des Steuerworts #LAMC in der Geofim-Steuerdatei und Eintragen von „r“ im Feld „JNR“. Der Abbau ist in der Struktur geolamc.dbf für jeden Stoff durch ein Polygon aus mindestens 2 Werten vorzugeben, die maximale Anzahl der Stützpunkte ist hingegen nicht begrenzt. Über das Feld LAMBCN kann eine Ortsabhängigkeit der Abbaukoeffizienten definiert werden, indem eine Zuordnung zum entsprechenden Eintrag in der geopara.dbf erfolgt. Während der Transportsimulation wird der Abbaukoeffizient für jedes Finite Volumen in Abhängigkeit von dessen Konzentration aus dem vorangegangenen Teilzeitschritt durch lineare Interpolation berechnet. Liegt die Konzentration außerhalb des Polygons, wird der Anfangs- bzw. Endwert des Polygons verwendet. Optional kann die Ausgabe einer Logdatei aktiviert werden. Die Aktivierung erfolgt, indem in der Steuerdatei für das Steuerwort #LAMC das Feld „UNIT“ mit dem Eintrag „log“ belegt wird. In diesem Fall wird am Ende jedes Gesamtzeitschritts bei der Transportsimulation die Konzentration sowie der entsprechende Abbaukoeffizient für Konzentrationen > 0 ausgegeben. Die Logdatei trägt den Namen lambdac.log und wird im Ordner home/result abgelegt.

[5] Die Option des konzentrationsabhängigen Abbaus ist gesondert freizuschalten

Wenn hingegen der Abbau im Isothermendatensatz definiert ist, können auch komplexere Zusammenhänge modelliert werden (siehe Abschnitt 5.5).

Wenn der Abbaukoeffizient nicht explizit in der Datei {proj}lamb.dbf vorgegeben wird, kann in der Steuerdatei (Tabelle 2-1) über das Steuerwort #LAMBDA ein globaler Wert für alle Migranten vorgegeben werden.

5.5 Isotherme

Das Programmsystem PCGEOFIM löst die Transportgleichung (siehe Teil Theorie):

$\partial (n_w R \rho_w)/\partial t + \mathrm{div} \rho_w v_{Dar}$ - div $(D^* + n_w D)$ grad $\rho_w + \lambda\, n_w\, R^*\, \rho_w = q$

$R = 1 + (1-n_w)/n_w\, k_{1d}\, \rho_w^{\nu-1} / (1 + k_{2d}\, \rho_w)$, $\lambda = \lambda_1 / (1 + \lambda_2\, \rho_w)$, $n_w = n_e + n_s$

D^* - Dispersionstensor ($D^* = \delta_L |v_{Dar}|$) in $m_R\, m_w^3/m_R^3\, m_R/s = (m_w^3/m_R)/s$

D - Diffusionskonstante der k-ten Komponente in m_R^2/s

k_{1d} - Koeffizient zur Stoffverteilung k-te Komponente (bei $\nu = 1$ in m_w^3/m_f^3)

k_{2d} - Koeffizient zur Stoffverteilung in m_w^3/kg_k

λ_1 - Abbaukonstante k-te Komponente in 1/s

λ_2 - Abbaukonstante k-te Komponente in $(kg_k/m_w^3)^{-1}$

n_e - entwässerbare bzw. wiederauffüllbare Porosität in m_w^3/m_R^3

n_s - mit stagnierender wässriger Phase gefüllte Porosität in m_w^3/m_R^3

n_w - volumetrischer Phasengehalt der wässrigen Phase in m_w^3/m_R^3

ν - Exponent der Freundlich-Isotherme der Komponente k

q - summarische Quell-Senken-Belegung der Komponente k in $(kg_k/m_R^3)/s$

R - R-Faktor k-te Komponente (-)

R^* - R-Faktor k-te Komponente (-), im Falle $\lambda_f = 0$: $R^* = 1$

ρ_w - Partialdichte k in der wässrigen Phase (kg_k/m_w^3)

Die obige Transportgleichung enthält die Annahme, dass sich zwischen der wässrigen Phase und der Feststoffphase ein Gleichgewicht einstellt, welches durch die folgende Beziehung beschrieben wird:

$$s_f = n_f \rho_f = \frac{k_{1d}^* \rho_b \rho_w^\nu}{1 + k_{2d} \rho_w} \quad \text{bzw.} \quad \rho_f = \frac{k_{1d} \rho_w^\nu}{(1 + k_{2d} \rho_w)}$$

mit $k_{1d} = k_{1d}^* (\rho_b/n_f) = k_{1d}^* \rho_0$ und

s_f - sorbierte Masse des betrachteten Stoffes k am Feststoff in kg_k/m_R^3

n_f - volumetrischer Phasengehalt der Feststoffmatrix in m_f^3/m_R^3

ρ_f - Partialdichte des Stoffes k in der Feststoffmatrix in kg_k/m_f^3

ρ_w - Partialdichte des Stoffes k in der wässrigen Phase in kg_k/m_w^3

ρ_b - Rohdichte des Feststoffes (bulk density) in kg_f/m_R^3

ρ_0 - Reindichte des Feststoffes in kg_f/m_f^3

k_{1d}^* - bei $\nu = 1$ Verteilungskoeffizient in m_w^3/kg_f, sonst Größengleichung

k_{1d} - bei $\nu = 1$ Verteilungskoeffizient in m_w^3/m_f^3, sonst Größengleichung

k_{2d} - Parameter in m_w^3/kg_k; $1/k_{2d}$ - Halbsättigungskonstante, d.h. ρ_w-Wert, für den s_f bzw. ρ_f gleich der Hälfte des Maximalwertes ist

Wie die Tabelle 5-5 zeigt, beinhaltet diese allgemeine Isotherme die drei bekanntesten Gleichgewichte.

Tabelle 5-5: Parameter der Henry-, Freundlich- und Langmuir-Isotherme

	k_{1d}	k_{2d}	ν
Henry-Isotherme	k_{1d}	0	1
Freundlich-Isotherme	k_{1d}	0	e
Langmuir-Isotherme	k_{1d}	k_{2d}	1

Die Wandlung des Stoffes k wird durch die Terme $\lambda\ n_w R^* \rho_w$ erfasst. Für den Abbau durch radioaktiven Zerfall gilt: Abbau in der fluiden Phase und in der Feststoffphase ist gleich groß. Für mikrobielle Abbauprozesse wird gewöhnlich $\lambda_{Feststoff} = 0$ gesetzt. Aus diesem Grund muss zwischen R und R^* im Abbauterm unterschieden werden.

Im Programmsystem PCGEOFIM sind neben einer Reaktionskinetik erster Ordnung, beschrieben durch λ = const., weitere Ansätze mit $\lambda = \lambda(\rho_w)$ implementiert worden. Die folgende Tabelle gibt eine Übersicht.

Tabelle 5-6: Definition der Abbaufunktion

Kinetik	**Abbaufunktion in der wässrigen Phase**
Kinetik 1. Ordnung	λ_w = const.
Michaelis-Menten-Kinetik	$\lambda_w = \lambda_1 / (1 + \lambda_2\ \rho_w)$
Toxische Inhibierung	$\lambda_w = \lambda_1 \max(1 - \rho_w/\rho_{wtox},0)$
Kombination von aerober und toxischer Inhibierung	$\lambda_w = \lambda_1 \max(1 - \rho_w/\rho_{waerob},0) + \lambda_2 \max(1 - \rho_w/\rho_{wtox},0)$

Für relativ kleine ρ_w-Werte reflektiert die Michaelis-Menten-Kinetik einen Abbau 1. Ordnung und für relativ große ρ_w-Werte einen Abbau 0. Ordnung. $1/\lambda_2$ ist dabei die Halbsättigungskonstante, d.h. für $\lambda_2 = 1/\rho_w$ erfolgt der Stoffabbau mit der Hälfte der Maximalrate. Auch die toxische Inhibierung stellt für kleine ρ_w-Werte eine Kinetik erster Ordnung dar. Wenn aber die Partialdichte die Größenordnung der Grenzdichte ρ_{wtox} erreicht wird die Abbaurate immer kleiner und nimmt bei Überschreiten den Wert Null an. Die Wahl einer Kombination von zwei inhibierten Kinetiken 1. Ordnung ist sinnvoll, wenn die Zeitkonstanten und die Grenzdichten von sehr unterschiedlicher Ordnung sind, z.B. Abbau in der aeroben und in der anaeroben Zone. Zur Verdeutlichung sind Zahlenwerte in der Tabelle 5-7 zu finden. In der nachfolgenden Abbildung ist die Abbaurate graphisch dargestellt.

Tabelle 5-7: Zahlenwerte zur Berechnung der Abbaufunktion (Beispiel)

Kinetik	**Abbaufunktion in der wässrigen Phase**
Kinetik 1. Ordnung	$\lambda_w = 1/125d^{-1} = 9{,}25926\ 10^{-8}\ s^{-1}$
Michaelis-Menten-Kinetik	$\lambda_1 = 9{,}25926\ 10^{-8}\ s^{-1}$, $\lambda_2 = 10\ m_w^3/kg_k$, $\lambda_w = \lambda_1 / (1 + \lambda_2\ \rho_w)$
Toxische Inhibierung	$\lambda_1 = 9{,}25926\ 10^{-8}\ s^{-1}$, $\rho_{wtox} = 0{,}1\ kg_k/\ m_w^3$, $\lambda_w = \lambda_1\ \max(1 - \rho_w/\rho_{wtox}, 0)$
Kombination von aerober und toxischer Inhibierung	$\lambda_1 = 2{,}31481\ 10^{-5}\ s^{-1}$, $\rho_{waerob} = 0{,}001\ kg_k/\ m_w^3$, $\lambda_2 = 9{,}25926\ 10^{-8}\ s^{-1}$, $\rho_{wtox} = 0{,}075\ kg_k/\ m_w^3$, $\lambda_w = \lambda_1\ \max(1 - \rho_w/\rho_{waerob}, 0) + \lambda_2\ \max(1 - \rho_w/\rho_{wtox}, 0)$

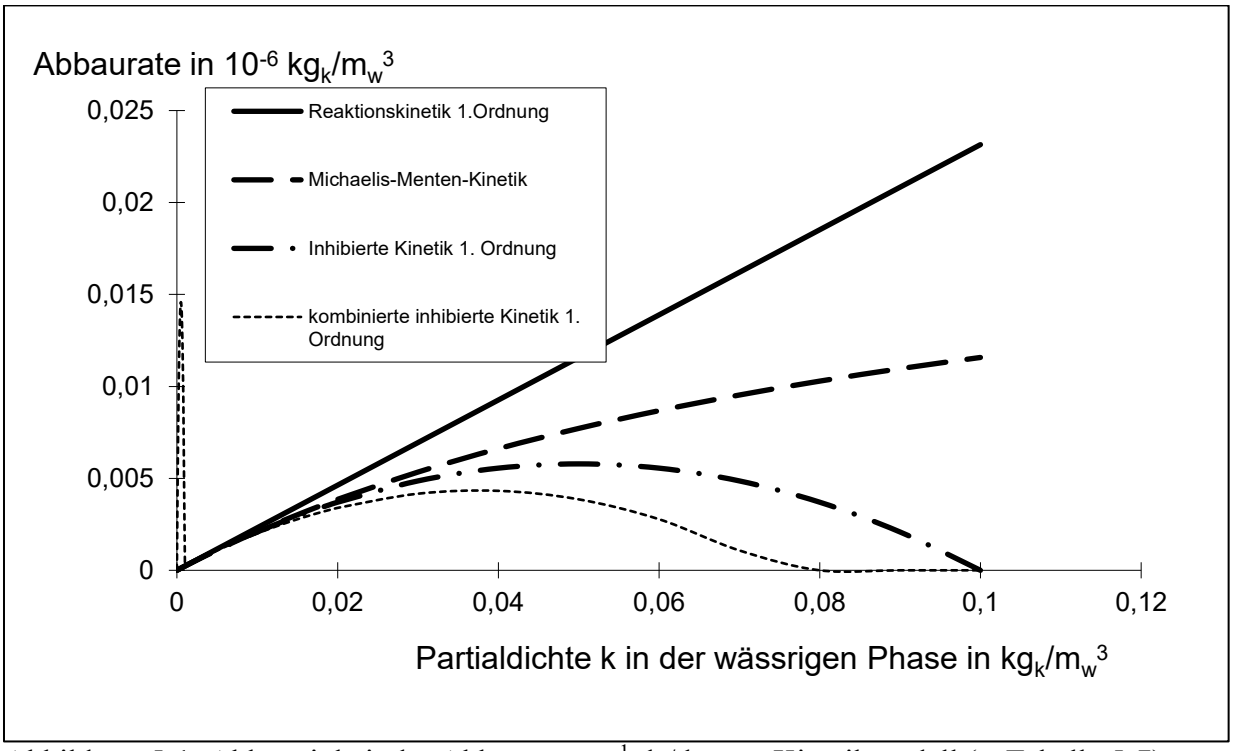
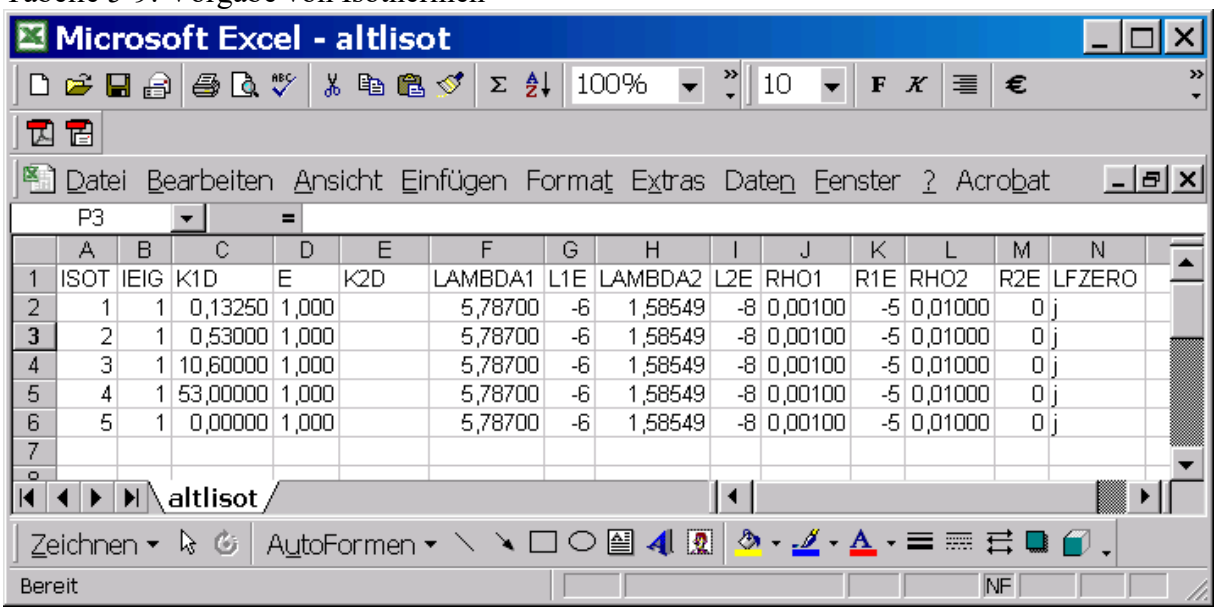


Abbildung 5-1: Abhängigkeit der Abbaurate n_w^{-1} ds/dt vom Kinetikmodell (s. Tabelle 5-7)

Tabelle 5-8: Struktur des Isothermendatensatzes geoisot.dbf → home/database/{proj}isot.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*ISOT*	N	2	Isotherme (definiert in der Parameterdatei)
2	*IEIG*	N	2	Eigenschaft (1, 2, ..., Anzahl Partialdichten)
3	*K1D*	N	10.5	Verteilungskoeffizient $k_1 = K1D \cdot 10^{K1E}$ in m_w^3/m_f^3
4	*E*	N	7.3	Exponent der Freundlich-Isotherme
5	*K2D*	N	10.5	Parameter der Langmuir-Isotherme in m_w^3/kg
6	*LAMBDA1*	N	7.5	Abbaukoeffizient $\lambda_1 = LAMBDA1 \cdot 10^{L1E}$ in s^{-1}
7	*L1E*	N	3	
8	*LAMBDA2*	N	7.5	Abbaukoeffizient $\lambda_2 = LAMBDA2 \cdot 10^{L2E}$ in m_w^3/kg
9	*L2E*	N	3	
10	*RHO1*	N	7.5	Partialdichte ρ_{wtox} in *RHO_MASS*
11	*R1E*	N	3	
12	*RHO2*	N	7.5	Partialdichte ρ_{waerob} in *RHO_MASS*
13	*R2E*	N	3	
14	*LFZERO*	Z	1	j bei mikrobiellem Abbau
15	*COM*	Z	20	Kommentar

Tabelle 5-9: Vorgabe von Isothermen



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	ISOT	IEIG	K1D	E	K2D	LAMBDA1	L1E	LAMBDA2	L2E	RHO1	R1E	RHO2	R2E	LFZERO
2	1	1	0,13250	1,000		5,78700	-6	1,58549	-8	0,00100	-5	0,01000	0	j
3	2	1	0,53000	1,000		5,78700	-6	1,58549	-8	0,00100	-5	0,01000	0	j
4	3	1	10,60000	1,000		5,78700	-6	1,58549	-8	0,00100	-5	0,01000	0	j
5	4	1	53,00000	1,000		5,78700	-6	1,58549	-8	0,00100	-5	0,01000	0	j
6	5	1	0,00000	1,000		5,78700	-6	1,58549	-8	0,00100	-5	0,01000	0	j
7														

5.6 Gebietsbegrenzung für die Transportmodellierung

Sollen in einem umfangreichen Strömungsmodell lokal begrenzte Transportprobleme berechnet werden, lässt sich eine Einschränkung dieser Berechnung auf ein begrenztes Gebiet machen. Es können horizontal und vertikal Grenzen vorgegeben werden, innerhalb derer die Dichteverteilung ermittelt wird. Damit lässt sich eine erhebliche Rechenzeiteinsparung erzielen.

Tabelle 5-10: Struktur des Ausschnittdatensatzes geoauss.dbf → home/database/ {proj}auss.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*I1*	N	3	Transportraum umfasst die globalen Elemente *I1*
2	*D1*	Z	1	**:** (bis)
3	*I2*	N	3	*I2*
4	*J1*	N	3	*J1*
5	*D2*	Z	1	: (bis)
6	*J2*	N	3	*J2*
7	*K1*	N	2	*K1*
8	*D3*	Z	1	: (bis)
9	*K2*	N	2	*K2*
10	*COM*	Z	20	Kommentar

5.7 Vorgabe von Anfangsdichteverteilungen

Für die Berechnung der Partialdichteverteilung wird, falls nicht anders vorgegeben wurde, im gesamten Gebiet einen Anfangswert von 0 angenommen. Durch Vorgabe von Randbedingungen können Masseeinträge in ausgewählte Elemente vorgenommen werden. Es besteht aber auch die Möglichkeit, eine Anfangsdichteverteilung vorzugeben.

Tabelle 5-11: Struktur der Anfangsbedingungen geoanfa.dbf → home/ database/ {proj}anfa.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*LUPE*	Z	1 | 2	Lupe
2	*IS*	N	3	Nummerierung in x-Richtung
3	*JZ*	N	3	Nummerierung in y-Richtung
4	*MG*	N	2	Nummerierung in z-Richtung
5	*P*	N	5.3	Anfangsdruck $P \cdot 10^{PE}$ in Pa (Vorgabe nur aus Kompatibilitätsgründen möglich)
6	*PE*	N	2	
7	*MIG1*	N	5.3	Teildichte $\rho_1 = MIG1 \cdot 10^{MIG1E}$ in diesem Element in *RHO_MASS*
8	*MIG1E*	N	2	
9	*MIG2*	N	5.3	Teildichte $\rho_2 = MIG2 \cdot 10^{MIG2E}$ in diesem Element in *RHO_MASS*
10	*MIG2E*	N	2	
11	*MIG3*	N	5.3	Teildichte $\rho_3 = MIG3 \cdot 10^{MIG3E}$ in diesem Element in *RHO_MASS*
12	*MIG3E*	N	2	
13	*MIG4*	N	5.3	Teildichte $\rho_4 = MIG4 \cdot 10^{MIG4E}$ in diesem Element in *RHO_MASS*
14	*MIG4E*	N	2	
15	*MIG5*[1]	N	5.3	Teildichte $\rho_5 = MIG5 \cdot 10^{MIG5E}$ in diesem Element in *RHO_MASS*
16	*MIG5E*	N	2	
17	*COM*	Z	20	Kommentar

[1]Wenn mehr als 5 Migranten berechnet werden sollen, muss die Struktur entsprechend erweitert werden.

Neben dieser Art der Vorgabe besteht die Möglichkeit, die Anfangs-Partialdichten als Felddatensatz (s. Abschnitt 3.8) einzugeben. Dazu muss in der Geofim-Steuerdatei (Tabelle 2-1) das Lesen der Dateien {proj}rh{i}.dbf mit i = 1, 2, ..., *NRHO* durch Einfügen der Schlüsselworte *#RH1*, *#RH2*, ... nach dem Datensatz *#S0* aktiviert werden.

6 Vorgabe von Schutzzonen und Stromlinien

6.1 Schutzzonen

Voraussetzung für die Berechnung von **Schutzzonen** ist das Vorhandensein einer stationären Lösung. Entweder wird diese im gleichen Lauf zuvor berechnet oder sie wurde in einer vorhergehenden Simulation berechnet und gesichert. Liegt die stationäre Lösung als gespeicherter Zeitpunkt vor, ist über die Steuerdatei dieser Zeitpunkt als Restart-Zeitpunkt auszuwählen. Zu beachten ist, dass das Ende der Simulation hinter dem Restart-Zeitpunkt liegen muss. Vorgegeben werden Startpunkte um das zu schützende Objekt. Die eingesetzten Partikel werden mit der negativen Abstandsgeschwindigkeit $-v_{Dar}/n_e$ im Strömungsfeld bewegt. Aus diesem Grunde ergeben die Verbindungen der Partikelpositionen für einen bestimmten Zeitpunkt das Gebiet, aus dem Grundwasser das zu schützende Objekt innerhalb der Zeitspanne Zeitpunkt minus Startzeit erreicht. Die Zeitpunkte werden in der Datei {proj}isoc.dbf festgelegt. Die Vorgabe erfolgt in der Struktur geodatum.dbf (siehe Tabelle 6-3). Wird die Zeiteinheit in der Steuerdatei auf eine andere Einheit als Kalender („k“) festgelegt, so ist für die Datei {proj}isoc.dbf die Struktur entsprechend Tabelle 6-4 zu verwenden. Diese Angaben werden bei der Darstellung im Isolinienplan zur Beschriftung verwendet.

6.2 Strom- und Bahnlinien

Eine **Stromlinie** ist das Abbild der Bewegung eines Fluidteilchens durch den Aquifer im Falle stationärer Strömungsverhältnisse, **Bahnlinien** das Abbild im Falle instationärer Verhältnisse (die eingesetzten Partikel werden mit der Abstandsgeschwindigkeit v_{Dar}/n_e im Strömungsfeld bewegt). In beiden Fällen verwendet PCGEOFIM das Schlüsselwort #STROMLINIE. Analog zur Vorgabe bei den Schutzzonen kann eine gespeicherte stationäre Lösung verwendet werden, indem der gespeicherte Zeitpunkt als Restart-Zeit verwendet wird. Die Tabelle 6-2 zeigt die Struktur geostro.dbf. Dabei ist zu beachten, dass entweder *Z* oder *MG* mit Werten belegt werden darf. Im ersten Fall erfolgt die Berechnung der Bewegung des Fluidteilchens im dreidimensionalen Raum, d.h. Fluidteilchen können von einem Grundwasserleiter in einen anderen wechseln. Wenn hingegen *MG* vorgegeben wird, erfolgt die Berechnung der Bewegung der Fluidteilchen zweidimensional (v_z wird nicht berücksichtigt). Für die Beschriftung im Isolinienplan werden die Zeitpunkte verwendet, die in der Datei {proj}isoc.dbf definiert sind.

Es ist wichtig, dass der erste und der letzte Zeitpunkt in der {proj}isoc.dbf mit den Angaben zur Simulationslaufzeit in der Steuerdatei übereinstimmen, um eine korrekte Beschriftung im Isolinienplan sicherzustellen.

Tabelle 6-1: Struktur der Datenbanken geoschu .dbf → home/database/{proj}schu.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*X*	N	7	Startkoordinate x
2	*Y*	N	7	Startkoordinate y
3	*MG*	N	2	Start im Modellgrundwasserleiter *MG*[1]
4	*Z*	N	6.1	Startkoordinate z[1]
5	*COM*	Z	20	Kommentar

[1]Entweder wird *MG* oder *Z* vorgegeben.

Tabelle 6-2: Struktur der Datenbanken geostro.dbf → home/database/{proj}stro.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*X*	N	7	Startkoordinate x
2	*Y*	N	7	Startkoordinate y
3	*MG*	N	2	Start im Modellgrundwasserleiter *MG*[1]
4	*Z*	N	6.1	Startkoordinate z[1]
5	*DATUM*	Datum	8	Startzeit des Partikels
5	*ZEIT*	N	8.1	
6	*COM*	Z	20	Kommentar

[1]Entweder wird *MG* oder *Z* vorgegeben.

Tabelle 6-3: Struktur des Datensatzes geodatum.dbf → home/database/{proj}isoc.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*DATUM1*	Datum	8	Festlegung von Zeitstützstellen[1]
2	*DATUM2*	Datum	8	
3	*DATUM3*	Datum	8	
4	*DATUM4*	Datum	8	
5	*DATUM5*	Datum	8	
6	*COM*	Z	20	Kommentar

[1]Pro Zeile werden maximal fünf Zeitpunkte festgelegt, die aufsteigend sortiert vorgegeben werden sollten. Es kann auch nur das Feld *DATUM1* und mehrere Zeilen genutzt werden, wenn mehr als 5 Zeitstützstellen notwendig sind.

Tabelle 6-4: Struktur des Datensatzes georeaf.dbf (home/database/{proj}isoc.dbf bei Zeitvorgaben als Zahl)

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*REAL1*	N	7.3	
2	*EXP1*	N	3	
3	*REAL2*	N	7.3	
4	*EXP2*	N	3	
5	*REAL3*	N	7.3	
6	*EXP3*	N	3	
7	*REAL4*	N	7.3	
8	*EXP4*	N	3	
9	*REAL5*	N	7.3	
10	*EXP5*	N	3	
11	*COM*	Z	20	Kommentar

7 Spezielle Daten zur Visualisierung

7.1 Brunnenstandorte

Brunnendaten werden nur für die graphische Darstellung innerhalb der Isolinienkonstruktion benötigt. Wenn sie nicht vorgegeben werden, werden die Brunnen im Isolinienplan nicht eingezeichnet.

Tabelle 7-1: Struktur der Datenbank geobrun.dbf→ home/database/{proj}brun.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*NAME*	Z	3	Brunnenname (laut NAME in Datei rast.dbf)
2	*LUPE*	Z | N	1 | 2	Lupe
3	*IS*	N	3	Index in x-Richtung (IS)
4	*JZ*	N	3	Index in y-Richtung (JZ)
5	*MG*	N	2	ohne Bedeutung
6	*X*	N	11.3	Brunnenstandort bzw. Einspeise- /Entnahmestelle bei Horizontalfilterbrunnen (Lage der Beschriftung im Isolinienplan)
7	*Y*	N	11.3	
8	*NAME_EXT*	Z	12	Externer Brunnenname (wird im Isolinienplan ausgewiesen)
9	*X1*	N	11.3	Polygon zur Beschreibung der Lage des Horizontalfilterbrunnens
10	*Y1*	N	11.3	
11	*X2*	N	11.3	
12	*Y2*	N	11.3	
13	*X3*	N	11.3	
14	*Y3*	N	11.3	
15	*X4*	N	11.3	
16	*Y4*	N	11.3	
17	*X5*	N	11.3	
18	*Y5*	N	11.3	
19	*X6*	N	11.3	
20	*Y6*	N	11.3	
21	*X7*	N	11.3	
22	*Y7*	N	11.3	
23	*X8*	N	11.3	
24	*Y8*	N	11.3	
25	*X9*	N	11.3	
26	*Y9*	N	11.3	
27	*X10*	N	11.3	
28	*Y10*	N	11.3	
29	*COM*	Z	30	Kommentar

7.2 Messstellendaten

Die Vorgabe von Messwerten zur Kalibrierung der Strömungs- und Transportmodellierung sowie für die Parameteridentifikation erfolgt analog zu den Randbedingungen in zwei Datenbanken, den Stammdaten in der Datei {proj}pest.dbf und den Bewegungsdaten (Messwerte) in der Datei {proj}pebe.dbf. Die Stammdaten beinhalten die Lage der Messstelle, gegeben durch x- und y- Koordinaten, den Modellgrundwasserleiter und die Lupe. Zusätzliche Angaben, welche die Zuordnung der Messstelle zu einem Modellgrundwasserleiter unterstützen, sind möglich.

Neben gewöhnlichen Messstellen können Pegelstammdaten auch mit Randbedingungen verbunden sein. In diesem Fall können gemessene Werte von Randbedingungen als Pegelbewegungsdaten vorgegeben werden. Beispielsweise ist es auf diese Weise möglich, gemessene Brunneninnenwasserstände als Pegelbewegungsdaten vorzugeben und damit in die Berechnung der Standardabweichung einzubeziehen.

Es ist auch möglich, Standorte und externe Namen in den Randbedingungsstammdaten {proj}rast.dbf bzw. Brunnenstandorte in der Datei {proj}brun.dbf vorzugeben. Eine Vorgabe von Messwerten ist für diese Randbedingungen und Brunnen dann aber nicht möglich.

7.2.1 Vorgabe von Messstellen

Die Vorgabe der Standorte und der Art der Messstellen erfolgt in der Datei {proj}pest.dbf. Im Zuge der Programmentwicklung wurde eine weitere Struktur der Datei implementiert. Diese wird im Weiteren mit Struktur II bezeichnet. Die Tabelle 7-2 zeigt die Struktur I und Abbildung 7-1 beispielhaft den Inhalt der Datei. Beide Strukturen besitzen weiterhin volle Gültigkeit bei der Modellbearbeitung und können uneingeschränkt verwendet werden.

Mit Version 17.5 des Simulators Geofim wird die Zuordnung einer Messstelle in bis zu 3 verschiedene Gruppen unterstützt. In der {proj}pest.dbf sind dafür die optionalen Felder GRUPPE1, GRUPPE2 und GRUPPE3 vorgesehen. Die Gesamtzahl der Gruppen selbst wird nicht durch Geofim begrenzt. Anwendung findet die Gruppierung bei der statistischen Auswertung der Messstellen nach Beendigung der Simulation. In den Dateien error.txt (inkl. deren zeitabhängige Versionen) sowie in der Protokolldatei *.mes werden die Messstellen entsprechend der Gruppenzugehörigkeit statistisch ausgewertet (analog zur bereits bestehenden Gruppierung über den MGWL, siehe auch Abbildung 11-2).

Tabelle 7-2: Struktur I der Datei {proj}pest.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	NAME	Z	16	Name der Messstelle
2	X	N	11.3	Standort der Messstelle
3	Y	N	11.3	
4	MG	N	2	Ausbau der Messstelle im Modellgrundwasserleiter
5	NAMKOP	Z	13	Leer, Randbedingung (Tabelle 7-4) oder Eintrag entsprechend Tabelle 7-5
6	GWLUK	N	6.1	Grundwasserleiterunterkante in m NHN
7	GWLOK	N	6.1	Grundwasserleiteroberkante in m NHN
8	FIUK	N	6.1	Filterunterkante in m NHN
9	FIOK	N	6.1	Filteroberkante in m NHN
10	GWSTOCK	Z	4	Grundwasserleiter
11	LUPE	Z|N	1 | 2	Lupe
12	IS	N	3	Zellenindex in x-Richtung
13	JZ	N	3	Zellenindex in y-Richtung
14	GRUPPE1	Z	8	Bezeichnung für Gruppe 1
15	GRUPPE2	Z	8	Bezeichnung für Gruppe 2
16	GRUPPE3	Z	8	Bezeichnung für Gruppe 3
17	WEIGHT	N	1	Wenn ≠ 0: Wichtung der Messstelle wird deaktiviert
18	COM	Z	16	Kommentar

Beim Einlesen der Daten werden alle Werte entsprechend des dbf-Formats konvertiert, so dass die Feldlängen insbesondere der numerischen Werte verändert werden können.

Die Definition der Struktur II ist in Tabelle 7-3 vorgegeben. Die Tabelle enthält in diesem Fall zusätzlich das Feld IDX. Es beschreibt eindeutig das zu NAME_EXT gehörende finite Volumen[6]:

$$IDX = 100000000 * val(LUPE) + 100000 * IS + 100 * JZ + MG$$

Ein Beispiel: LUPE = a, IS = 12, JZ = 7, MG = 3 ergibt IDX = 10 012 007 03. Deutlich wird die Bezeichnung des Finiten Volumens 10 12 7 3 bzw. a 12 7 3.

Hinweis: IDX braucht nicht ausgefüllt zu werden, wird jedoch bei allen Ausgaben gemäß obiger Vorschrift gebildet und in die Datei geschrieben. Grundsätzlich ist dieses Feld sinnvoll bei Datenbankverknüpfungen zu anderen Tabellen.

[6] val(LUPE) mit LUPE = 0, 1, 2, ..., 9, a, b, ..., v ist zu interpretieren als val(LUPE) = 0, 1, 2, ..., 9, 10, 11, ..., 31

Tabelle 7-3: Struktur II der Datei {proj}pest.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	NAME_EXT	Z	16	Name der Messstelle
2	NAME_INT	Z	13	Leer, Randbedingung (Tabelle 7-4) oder Eintrag entsprechend Tabelle 7-5
3	X	N	11.3	Standort der Messstelle
4	Y	N	11.3	
5	LUPE	Z|N	1 | 2	Lupe
6	IS	N	3	Zellenindex in x-Richtung
7	JZ	N	3	Zellenindex in y-Richtung
8	MG	N	2	Ausbau der Messstelle im Modellgrundwasserleiter
9	FELD1	Z	6	Benutzerdefinierte Einträge
10	FELD2	Z	6	
11	FELD3	Z	6	
12	FELD4	Z	6	
13	TEXT	Z	16	
14	IDX	N	10	Index des Finiten Volumens
15	GRUPPE1	Z	8	Bezeichnung für Gruppe 1
16	GRUPPE2	Z	8	Bezeichnung für Gruppe 2
17	GRUPPE3	Z	8	Bezeichnung für Gruppe 3
18	WEIGHT	N	1	Wenn ≠ 0: Wichtung der Messstelle wird deaktiviert
19	COM	Z	16	Kommentar

Tabelle 7-4: Vorgabeschemata für NAMKOP oder NAME_INT bei Kopplung von Messstellen zu Randbedingungen

Randbedingungstyp	**Vorgabeschema** (Unterschied: Lupe 1- oder 2-stellig)	**Hinweis**	**Bemerkung**
Flusselement bzw. -abschnitt	NNNLIIIJJJMM oder NNNLLIIIJJJMM	Feld MG muss leer sein (oder 0); als Ganglinie wird der Durchfluss ausgegeben	N – Name L – Lupe I – IS J – JZ M – MG rechtsbündig Schema ggf. durch Leerzeichen vervollständigen, bspw.: „NNNLLIIIJJJ“ → „bru 6 1 99“
See	NNN	Feld MG muss leer sein (oder 0)	
Vertikalfilterbrunnen	NNNLIIIJJJ oder NNNLLIIIJJJ	Feld MG muss leer sein (oder 0)	
Horizontalfilterbrunnen	NNN	Feld MG muss leer sein (oder 0)	
übrige Randbedingungen	NNNLIIIJJJMM oder NNNLLIIIJJJMM	Feld MG muss dem Wert von MM entsprechen	

Tabelle 7-5: Bedeutung der Einträge in Spalte NAMKOP oder NAME_INT

Spezieller Name	Bedeutung
schutzziel	In {proj}pebe.dbf wird die maximal zulässige Spiegelhöhe für diesen Punkt vorgegeben (siehe auch Abschnitt 10)
irrelevant	Die Messstelle wird nicht zur Berechnung der Standardabweichung herangezogen, jedoch im Isolinienplan dargestellt
dummy	Diese Messstelle wird inkl. der zugeordneten Messwerte ignoriert
gruppe[7]	Die Messstelle ist eine Gruppenmessstelle, deren Bezeichnung im Feld *NAME* sich auf eine Randbedingungs- oder Brunnengruppe bezieht

NAME	X	Y	MG	NAMKOP	GWLUK	GWLOK	FIUK	FIOK	GWSTOCK	LUPE	IS	JZ
pegel1	2120	950	1	irrelevant							22	10
pegel2	1325	650	1									
pegel3	2475	2525	1									
pegel4	4250	2025	1									
pegel5	450	1265	1									
pegel6	2495	610	1									
pegel7	2150	305	3									
pegel8	810	1675	1									
pegel9	1575	2020	3									
pegel10	4025	2150	3									
see	1800	1900	0	see								
flu	50	1450	0	flu 1 15 1								
rand	4450	1450	1	ran 45 15 1								
bru	2550	860	1									
pegschu	2140	940	1	schutzziel								
bru4	1150	1950	0	bru 12 20								
Brunnen1	1350	2650	0	bru 14 27	0	30				0	14	27
bru2	1250	2450	0	bru 13 25							13	25

Abbildung 7-1: Beispieldaten für die Messstellenvorgabe

7.2.2 Vorgabe von Messwerten

Alle Messwerte werden in der Datei {proj}pebe.dbf vorgegeben. Die folgende Tabelle zeigt die Struktur. Danach folgt ein Ausschnitt aus der Datei altlpebe.dbf.

Hinweis: Aus Kompatibilitätsgründen kann das erste Feld NAME oder NAME_EXT heißen.

Die Pegelbewegungsdaten übergeben dem Simulator Geofim folgende Messwerte:

- Standrohrspiegelhöhen
- Volumenströme
- Partialdichten

Im Falle der Vorgabe von Schutzzielen entfällt die Vorgabe des Datums.

[7] Die Nutzung ist nur für Lizenzen der LEAG und GWL Grundwasser Leipzig GmbH möglich

Tabelle 7-6: Struktur der Pegelbewegungsdaten geopebe.dbf→home/database/{proj}pebe.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
NAME	Z	16	Name der Messstelle
DATUM	Datum	8	Messzeitpunkt[1]
ZEIT	N	8.1	
H	N	6.2	Gemessene Standrohrspiegelhöhe in m NHN
BEW	Z	1	Bewertung des H-Messwertes (kompatibel zu HYINFO)
Q	N	8.3	Gemessener Volumenstrom in Q-MASS
BQ	Z	1	Bewertungsfeld[3] des Q-Messwerts
WICHTUNG	N	5.3	Wichtung des H-Messwerts (Berücksichtigung nur bei Optimierung mit dem Programm PEST)
MIG1	N	5.3	Gemessene Partialdichte in *RHO-MASS: MIG1* · 10^{MIG1E}
MIG1E	N	2	
BM1	Z	1	Bewertungsfeld[2] Migrant 1
MIG2	N	5.3	Gemessene Partialdichte in *RHO-MASS: MIG2* · 10^{MIG2E}
MIG2E	N	2	
BM2	Z	1	Bewertungsfeld[2] Migrant 2
MIG3	N	5.3	Gemessene Partialdichte in *RHO-MASS: MIG3* · 10^{MIG3E}
MIG3E	N	2	
BM3	Z	1	Bewertungsfeld[2] Migrant 3
MIG4	N	5.3	Gemessene Partialdichte in *RHO-MASS: MIG4* · 10^{MIG4E}
MIG4E	N	2	
BM4	Z	1	Bewertungsfeld[2] Migrant 4
MIG5	N	5.3	Gemessene Partialdichte in *RHO-MASS: MIG5* · 10^{MIG5E}
MIG5E	N	2	
BM5	Z	1	Bewertungsfeld[2] Migrant 5
COM	Z	20	Kommentar

[1] Sortiert nach Datum bzw. Zeit (streng monoton aufsteigend).

[2] Wird für die Bewertung das Zeichen „<“ vorgegeben (Nachweisgrenze), werden diese Messwerte als Bestandteil der Ganglinie in Geogang dargestellt, sonst als separate Punkte.

[3] Durch Vorgabe von „0“ für das Feld BQ kann ein mit dem Wert 0 vorliegender Messwert trotzdem in den Ganglinien dargestellt werden (verbunden). Bei Vorgabe eines anderen Zeichens (nicht leer) wird dieser Wert in der Ganglinie dargestellt, jedoch nicht verbunden mit anderen Messwerten.

Liegen mehr als 5 Migranten vor, kann die Struktur entsprechend erweitert werden.

8 Daten zur Parameteridentifikation

Für die Parameteridentifikation (Grundlagen siehe Teil Theorie) ist es erforderlich, zusätzliche Eingabewerte vorzugeben. Es müssen Messstellen lokalisiert und Messwerte (auch zeitabhängig) erfasst werden. Für die in der Steuerdatei Tabelle 2-1 ausgewählten Parametergruppen sind Startwerte und Schranken festzulegen. Außerdem sind Bereiche (Zonen) auszuweisen, innerhalb derer die Parameter angepasst werden sollen. Die Eingabe von Messwerten wurde schon im vorangegangenen Abschnitt erläutert.

Es muss noch darauf hingewiesen werden, dass zeitabhängige Parameter bei der Parameteridentifikation nicht zulässig sind.

8.1 Vorgabe der Startwerte und der Grenzen für die Parameter

Bei der Parameteridentifikation werden die zu identifizierenden Größen selbst nicht verändert, sondern es werden Faktoren eingeführt, die variiert werden und mit dem jeweiligen Parameter multipliziert eine optimale Modellanpassung erreichen sollen. Soll z. B. k_f ermittelt werden, setzt sich der neue Wert aus

$$k_{f\,neu} = f_{kf} \cdot k_f$$

zusammen, wobei nach bestimmten Suchalgorithmen f_{kf} so bestimmt wird, dass ein mit $k_{f\,neu}$ berechnetes Modell zu einer verbesserten Übereinstimmung zwischen berechneten Werten und Messwerten führt. Bei dieser Vorgehensweise ist es sinnvoll, den Startwert 1 zu setzen, wobei auch jede andere Vorgabe möglich ist für die *FMIN* <= *F* <= *FMAX* gilt.

Tabelle 8-1: Struktur des Datensatzes geo{xx}-i.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
NAME	Z	4	Zonenname
F	N	9	Startwert
FMIN	N	9	untere Grenze *F*
FMAX	N	9	obere Grenze *F*
COM	Z	20	Kommentar

Dabei bezeichnet {xx} wahlweise die Zeichenfolgen kf, lk, gw, ne, s0, ra, ld, re oder rm für die Identifikation des k_f-Wertes, des Leakage-Faktors, der Grundwasserneubildung, des n_e-Wertes, des S_0-Wertes, der Randbedingungen, der longitudinalen Dispersivität, der Retardation oder der Migrationsrandbedingung 1. Art.

Die Vorgabe der minimalen und maximalen Werte (Faktoren - keine Parameterwerte!), die beim Suchverfahren nicht unter- oder überschritten werden sollen, ergeben sich aus physikalischen Gründen.

8.2 Definition der Zonen

Für jede Parametergruppe werden Bereiche definiert, innerhalb der die Parameter mittels der Faktoren variiert werden. Dabei müssen die Zonen nicht zusammenhängend sein. Für einen Parametertyp können mehrere Zonen definiert werden.

Tabelle 8-2: Struktur des Datensatzes geozone.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
LUPE	Z	1 | 2	Lupe
IS	N	3	Nummerierung in x-Richtung
JZ	N	3	Nummerierung in y-Richtung
MG	N	2	Nummerierung in z-Richtung
NAMKF	Z	4	Identifikation k_f-Wert: finites Volumen gehört zur Zone *NAMKF*
NAMLK	Z	4	Identifikation Leakage: finites Volumen gehört zur Zone *NAMLK*
NAMGW	Z	4	Identifikation GWN: finites Volumen gehört zur Zone *NAMGW*
NAMNE	Z	4	Identifikation n_e-Wert: finites Volumen gehört zur Zone *NAMNE*
NAMS0	Z	4	Identifikation S_0-Wert: finites Volumen gehört zur Zone *NAMS0*
NAMRA	Z	4	Identifikation RB 2. oder 3. ART: finites Volumen gehört zur Zone *NAMRA*
NAMLD	Z	4	Identifikation long. Dispersivität: finites Volumen gehört zur Zone *NAMLD*
NAMRE	Z	4	Identifikation Retardationskoeff.: finites Volumen gehört zur Zone *NAMRE*
NAMRM	Z	4	Identifikation Migrations-RB 1. Art: finites Volumen gehört zur Zone *NAMRM*
COM	Z	20	Kommentar

Die Tabelle 8-2 zeigt, dass für jeden zu identifizierenden Parameter ein Feld vorgegeben ist. In dieses Feld können je nach Anzahl der Zonen pro Parameter beliebig viele Namen (in Abhängigkeit der Messpunktanzahl und unter Einbeziehung geohydraulischer Gegebenheiten) für die Zonen eingetragen werden. Die Anzahl der zu identifizierenden Parameter ist gleich der Anzahl der Namen. Die Erfahrungen zeigen, dass die Anzahl der Zonen kleiner als zehn sein sollte.

8.3 Berechnung der Parameteridentifikation

Wird eine Parameteridentifikation durchgeführt, wird der Fortschritt der Berechnung in Dateien gespeichert. Dadurch kann die erreichte Verbesserung verfolgt und bewertet werden. Außerdem ist es möglich, eine laufende Parameteridentifikation anzuhalten und zu einem späteren Zeitpunkt wiederaufzunehmen.

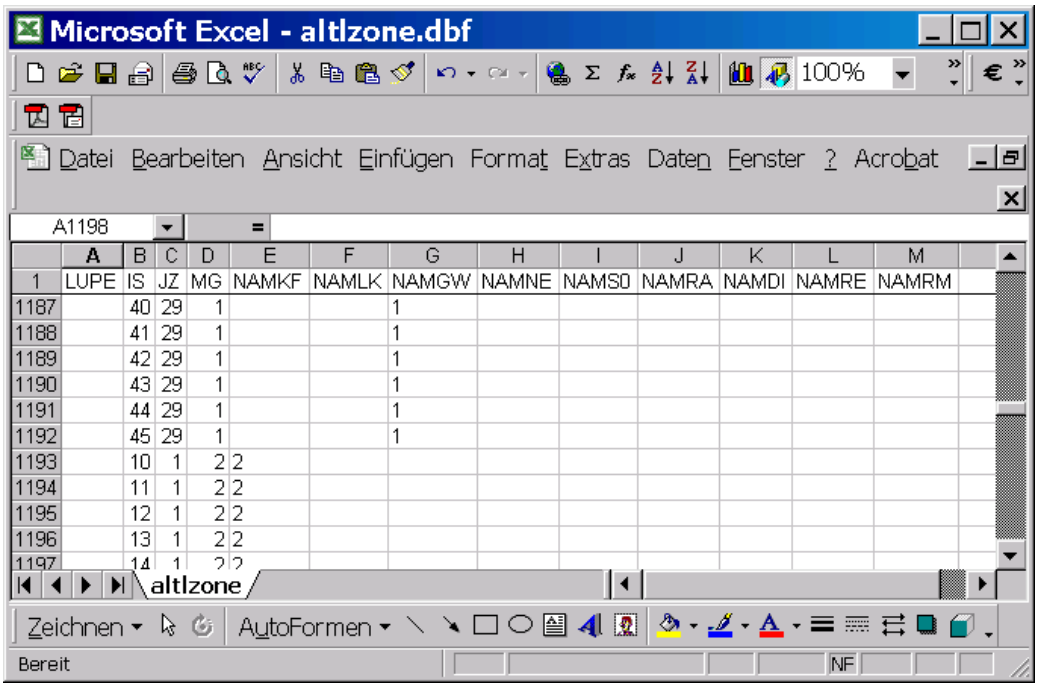
Im Ordner „result“ werden in den Dateien pident{XX}.geo die einzelnen Zonenfaktoren, zugehörige Sensitivitäten sowie zu jedem Pegel die Standardabweichung und der Anteil ausgegeben. {XX} steht dabei für die Nummer der Iteration des Identifikationsalgorithmus, nach der die Ergebnisse geschrieben wurden. Die Dateien werden im Textformat gespeichert und können daher mit jedem Editor angezeigt werden.

Im Ordner „save“ werden in den Dateien pident.geo, pidguete.geo sowie gangline.pid der Status sowie der Fortschritt der Parameteridentifikation gespeichert. Bei einem Restart bzw. der abschließenden Berechnung mit den identifizierten Parametern im Nachgang einer erfolgten Parameteridentifikation werden diese Dateien verwendet. Ist keine Wiederaufnahme der Parameteridentifikation nach einem Abbruch geplant, so sind diese Dateien vor Beginn der Simulation zu löschen.

8.4 Beispiel zur Parameteridentifikation

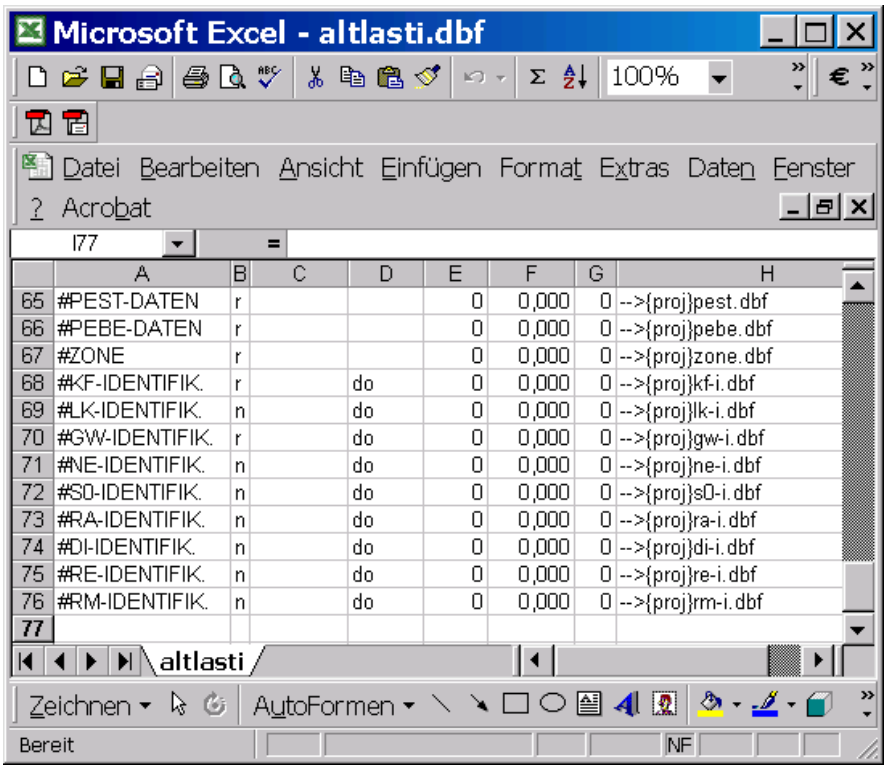
Am Testbeispiel altlast soll die Vorgehensweise erläutert werden. Identifiziert werden die Grundwasserneubildung und der k_f-Wert des Schluffs im MGWL 2. Aus diesem Grunde wurden die Zonen *NAMGW* = "1" und *NAMKF* = "2" definiert (siehe Tabelle 8-3).

Tabelle 8-3: Ausschnitt Datei altlzone.dbf



LUPE	IS	JZ	MG	NAMKF	NAMLK	NAMGW	NAMNE	NAMSO	NAMRA	NAMDI	NAMRE	NAMRM
1187	40	29	1			1						
1188	41	29	1			1						
1189	42	29	1			1						
1190	43	29	1			1						
1191	44	29	1			1						
1192	45	29	1			1						
1193	10	1	2	2								
1194	11	1	2	2								
1195	12	1	2	2								
1196	13	1	2	2								
1197	14	1	2	2								

Tabelle 8-4: Ausschnitt Geofim-Steuerdatei altlasti.dbf



	A	B	C	D	E	F	G	H
65	#PEST-DATEN	r			0	0,000	0	-->{proj}pest.dbf
66	#PEBE-DATEN	r			0	0,000	0	-->{proj}pebe.dbf
67	#ZONE	r			0	0,000	0	-->{proj}zone.dbf
68	#KF-IDENTIFIK.	r		do	0	0,000	0	-->{proj}kf-i.dbf
69	#LK-IDENTIFIK.	n		do	0	0,000	0	-->{proj}lk-i.dbf
70	#GW-IDENTIFIK.	r		do	0	0,000	0	-->{proj}gw-i.dbf
71	#NE-IDENTIFIK.	n		do	0	0,000	0	-->{proj}ne-i.dbf
72	#SO-IDENTIFIK.	n		do	0	0,000	0	-->{proj}sO-i.dbf
73	#RA-IDENTIFIK.	n		do	0	0,000	0	-->{proj}ra-i.dbf
74	#DI-IDENTIFIK.	n		do	0	0,000	0	-->{proj}di-i.dbf
75	#RE-IDENTIFIK.	n		do	0	0,000	0	-->{proj}re-i.dbf
76	#RM-IDENTIFIK.	n		do	0	0,000	0	-->{proj}rm-i.dbf
77								

Die Tabelle 8-4 zeigt, dass zur Ausführung der Parameteridentifikation in der Geofim-Steuerdatei die Schlüsselworte *#PEST-DATEN*, *#PEBE-DATEN*, *#ZONE*, *#KF-IDENTIFIK.* und *#GW-IDENTIFIK.* aktiviert werden müssen.

Die Parameteridentifikation ist ein iterativer Prozess. Berechnet werden das Gütefunktional, welches die Abweichung zwischen berechneten und gemessenen Spiegelhöhen beschreibt sowie die Sensitivität der Zonenfaktoren. Die folgende Tabelle zeigt den Verlauf der Optimierung. Die Standardabweichung (Wert des Gütefunktionals) wurde von 16 auf 5 cm verbessert.

Tabelle 8-5: Iterative Verbesserung des Gütefunktionals

0. Iteration:	0,158	m	4. Iteration:	0,086	m	
	kf-2	gw-1		kf-2	gw-1	
Zonenfaktoren	1,000	1,000	Zonenfaktoren	5,063		1,097
Sensitivität	0,022	0,012	Sensitivität	0,015		-0,048
1. Iteration:	0,149	m	5. Iteration:	0,056	m	
	kf-2	gw-1		kf-2	gw-1	
Zonenfaktoren	1,500	1,075	Zonenfaktoren	7,594		1,102
Sensitivität	0,020	-0,043	Sensitivität	0,008		-0,032
2. Iteration:	0,135	m	6. Iteration:	0,048	m	
	kf-2	gw-1		kf-2	gw-1	
Zonenfaktoren	2,250	1,100	Zonenfaktoren	9,332		1,102
Sensitivität	0,019	-0,060	Sensitivität	0,000		0,002
3. Iteration:	0,114	m	Optimum:	0,048	m	
	kf-2	gw-1		kf-2	gw-1	
Zonenfaktoren	3,375	1,101	Zonenfaktoren	9,441		1,104
Sensitivität	0,018	-0,058	Sensitivität	0,000		0,000

9 Ausgabesteuerung

9.1 Zeitschrittsteuerung

Die Zeitschrittsteuerung wird vom Anwender durch die in Abbildung 9-1 schematisch skizzierten Vorgaben beeinflusst. Alle durch *#ZEIT*[8] und *#XMASKE* in der Geofim-Steuerdatei festgelegten Zeitpunkte führen zu einer Unterteilung der Zeitachse. Zeitabhängige Parameterdaten und zeitabhängige Stützstellen in den Randbewegungsdaten führen zu weiteren Unterteilungen der Zeitachse. Nur im Falle der Parameteridentifikation unterteilen Pegelbewegungsdaten die Zeitachse. Wenn dann noch Zeitintervalle existieren, die größer als durch *#DTMAX* oder *#DTPATH* vorgegeben wurden, werden zusätzliche Zeitstützstellen erzeugt, so wie die Abbildung 9-1 zeigt. Die Vorgabe von *#DTIMAX* unterteilt dann noch einmal den externen Zeitschritt in eine Anzahl von internen Zeitschritten, um die von der Standrohrspiegelhöhe abhängigen Leitwerte mit dem gerade ermittelten h zu berechnen und beim PBCG-Verfahren die Dominanz der Hauptdiagonalelemente zu sichern (Erfahrungswert: 10 Tage).

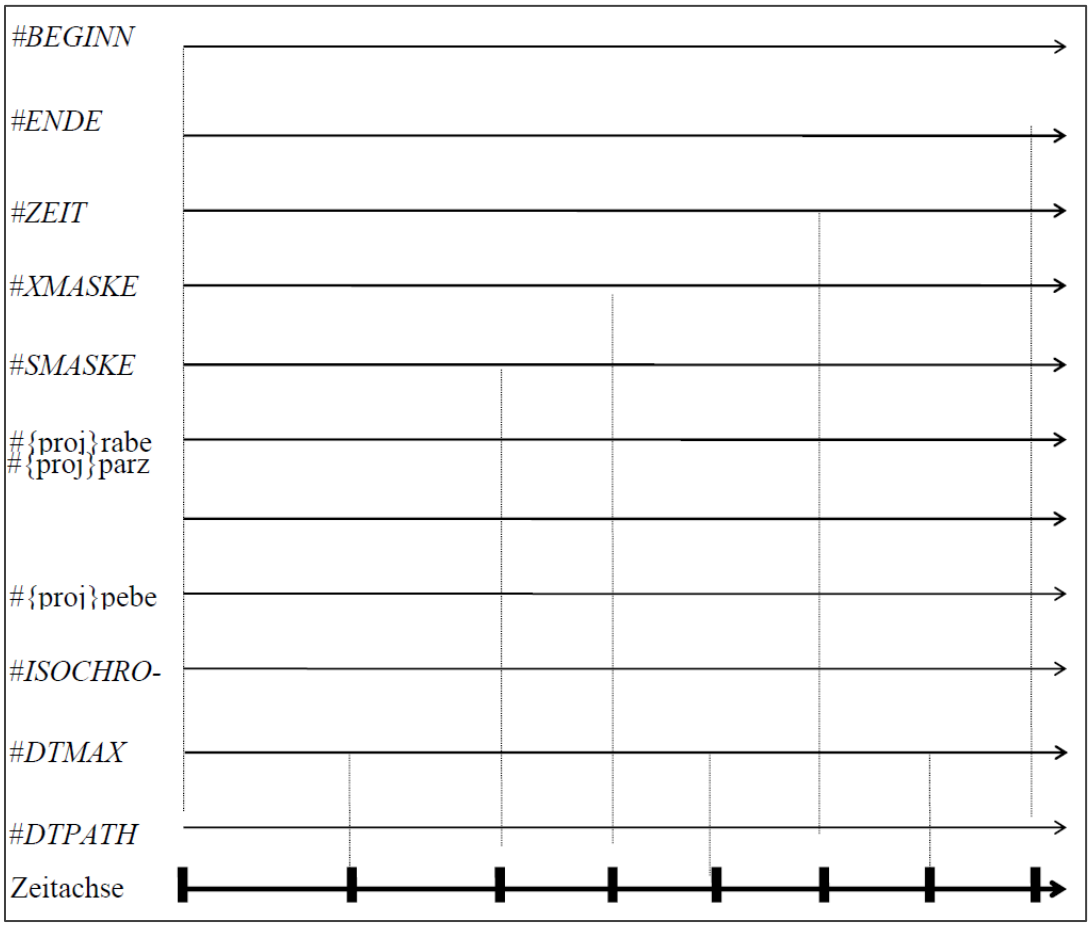


Abbildung 9-1: Zeitschrittsteuerung im Simulator Geofim (*#XMASKE* = *#IMASKE* & *#RMASKE*)

[8] Mit Hilfe der Datei {proj}zeit.dbf (Struktur geodatum.dbf) kann der Anwender beliebige Zeitpunkte festlegen.

9.2 Sicherung von Berechnungsergebnissen für Restart und für das Post-processing

Das Verzeichnis home\save ist die Schnittstelle zwischen dem Simulator Geofim und dem Programm PCGEOFIM.

Gespeichert wird die Topologie home\save\topology (Geometrie und k_f-Werte), die Lupenzuordnung home\save\magnify und die Pegelstammdaten als home\save\pegstamm zu Beginn jeder Simulation, wenn zu irgendeinem Zeitpunkt gesichert werden soll. Außerdem wird die Anfangsspiegelhöhe als h_{time}, die Gewässeranfangswasserstände als isosave und die Anfangsteildichten im Falle der Transportmodellierung als r1{time}, r2{time}, ... gespeichert. Dabei bezeichnet {time} eine Zeichenkette, die im Falle der Zeitvorgaben als Datum in der Form jjjjmm.dd und sonst als Zahl kodiert wird.

Immer wenn eine Sicherung erfolgen soll, werden je nach Problemstellung die in Tabelle 9-1 angegebenen Dateien gesichert.

Durch Verwendung der Datei {proj}hext.dbf können minimale, maximale und mittlere Grundwasserstände zeitraumbezogen gespeichert werden. Bei Vorgabe einer zeitabhängigen Grundwasserneubildung wird neben der mittleren über den gesamten Simulationszeitraum auch eine zeitraumbezogene Neubildung gespeichert. Die Struktur der Datei {proj}hext.dbf kann aus Tabelle 11-1 bzw. Tabelle 11-2 entnommen werden. Darüber hinaus muss das Schlüsselwort „#HEXTR“ in der Steuerdatei mit „r“ aktiviert werden. Der jeweilige Zeitraum wird durch Anfügen von „time1_time2“ an die entsprechende Datei (hmax, hmin, hqu, qgqu) gekennzeichnet, wobei je nach verwendeter Zeiteinheit folgende Angaben verwendet werden:

- Einheit „Datum“:
  - time1: Anfangsdatum in „JJJJMMDD“
  - time2: Enddatum in „JJJJMMDD“
- Alle anderen Zeiteinheiten:
  - time1: Anfangszeit
  - time2: Endzeit

Tabelle 9-1: Sicherung zu einem vorgegebenen Zeitpunkt

Dateiname	Zusätzliche Bedingungen	Erläuterung
to{time}	zeitabhängige Parameter	Bei zeitabhängigen Parametern wird die zu diesem Zeitpunkt gültige Topologie gespeichert.
h_{time}	Zeit in {proj}smas.dbf	Spiegelhöhe zum Zeitpunkt time
hqu		Mittlerer Grundwasserstand im Simulationszeitraum
hqu_time1_time2	Zeitraum in {proj}hext.dbf definiert	Mittlerer Grundwasserstand im angegebenen Zeitraum
hmin, hmax		Jemals erreichter minimaler und maximaler Grundwasserstand
hmin_time1_time2, hmax_time1_time2	Zeitraum in {proj}hext.dbf definiert	Jemals im Zeitraum erreichter minimaler und maximaler Grundwasserstand
is{time}	Modell enthält Brunnen und / oder Standgewässer	Spiegelhöhen in Brunnen und Standgewässern zum Zeitpunkt time
qgqu	Zeitabhängige GW-Neubildung wurde vorgegeben	Mittlere Grundwasserneubildung im gesamten Simulationszeitraum
qgqu_time1_time2	Zeitraum in {proj}hext.dbf definiert	Mittlere Grundwasserneubildung im angegebenen Zeitraum
r1{time}, r2{time}, ...	Transportberechnung	Teildichten zum Zeitpunkt time
pe{time}	Pegel wurden vorgegeben	Vorgegebene Pegelmesswerte und Messzeitpunkt
pm{time}	Pegel wurden vorgegeben, Transportberechnung	Gemessene Partialdichten und Messzeitpunkt
vx{time}, vy{time}, vz{time}		Migrationsgeschwindigkeit
wa{time} wt{time}	Stromlinien- oder Schutzzonenberechnung	Aufenthaltsort (wa) zum Zeitpunkt (wt) aller eingesetzten Punkte
wr{time}	Random-Walk	Aufenthaltsort aller eingesetzten Partikel zum Zeitpunkt time
{zs}{time}	zusätzliche Ergebnisse (siehe Tabelle 9-3)	Das Sichern zusätzlicher Ergebnisse muss explizit in {proj}smas eingetragen werden ({zs} = *QS*, *QG*, *QR*, *QF*, *QW*).
home\result\wa{time}	Modell enthält Gewässer	Die Wasserstände der Stand- und Fließgewässer werden als ASCII-Datei in home\result gespeichert.
home\ result\db{time}\{proj}res{l}.dbf	Zeit in {proj}pmas.dbf oder in {proj}rmas.dbf	Berechnete Spiegelhöhen und Volumenströme werden für jedes finite Volumen zum Zeitpunkt {time} im dbf-Format gespeichert.
home\ result\db{time}\{proj}rand.dbf	Zeit in {proj}rmas.dbf	Berechnete Randwerte (H, Q, RHO) werden zum Zeitpunkt {time} im dbf-Format gespeichert.
home\ isoline\h{time}{m|i}{ll}.{typ}	Zeit in {proj}imas.dbf	Ausgewählte Isolinienpläne im PCGEOFIM-Grafik-Format oder als Surfer-Grid
home\ gangline\{gangline}.lin	Ganglinie in {proj}gmas.dbf, Zeit in {proj}smas.dbf	Ausgewählte Randbedingungsganglinien im PCGEOFIM-Grafik-Format
home\ gangline\{messstelle}.lin	Messstelle in {proj}mmas.dbf, Zeit in {proj}smas.dbf	Ausgewählte Messstellenganglinien im PCGEOFIM-Grafik-Format

Tabelle 9-2: Sicherung am Ende der Simulation

Dateiname	Zusätzliche Bedingungen	Erläuterung
home\result\error.txt home\result\error.dbf	Modell enthält Pegel mit Messwerten	Für jede Messstelle werden zum Ende der Berechnung gemessene und berechnete Mittelwerte und die Standardabweichung ausgegeben. Es erfolgt weiterhin eine Ausgabe der Standardabweichungen für einzelne MGWL.
error_JJJJMMDD_JJJJMMDD.txt error_JJJJMMDD_JJJJMMDD.dbf	Modell enthält Pegel mit Messwerten, {proj}tsta.dbf enthält Start- und Enddatum zu mindestens einem spezifischen Statistikzeitraum	Ausgaben analog zu error.txt und error.dbf, jeweils für einen oder mehrere Statistikzeiträume.
home\result\zustrom.res	Modell wird mit Migration gerechnet und enthält Standgewässer	Für die Standgewässer werden die Massenzuströme zu jedem berechneten Zeitpunkt und jedem Migranten ausgegeben

9.2.1 Optionen in der Datei smas.dbf

Schließlich werden im Verzeichnis home\save die Ganglinien gesichert (Dateiname: gangline.{ext} mit {ext} = bgn, bil, eig, hra, inf, nam, peg, pem, qfl, qgr, qra und tim). Ein Update erfolgt bei jedem Zeitschritt. Intern gespeichert werden nur die Spiegelhöhen, Volumenströme, Pegelmesswerte, Teildichten und Bilanzen für den aktuellen Zeitpunkt und den vorhergehenden.

Tabelle 9-3: Struktur des Datensatzes geosmas.dbf → home/database/{proj}smas.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*DATUM*	Datum	8	Save-Zeitpunkt (kann unsortiert vorgegeben werden)
2	*QS*	N	1	Bei Vorgabe von 1: Ausgabe Quell-Senken-Belegung
3	*QG*	N	1	Bei Vorgabe von 1: Ausgabe Grundwasserneubildung
4	*QR*	N	1	Bei Vorgabe von 1: Ausgabe Randbedingungen
5	*QF*	N	1	Bei Vorgabe von 1: Ausgabe Filterbrunnen
6	*QW*	N	1	Bei Vorgabe von 1: Ausgabe Standgewässer
7	*VX*	N	1	*VX, VY* und *VZ* werden immer gesichert
8	*VY*	N	1	
9	*VZ*	N	1	
10	*COM*	Z	26	Kommentar

9.2.2 Ausgabe der Gewässerdaten

Im Ordner home\result\ wird zu jedem in der smas.dbf vorgegebenen Zeitpunkt eine Ausgabedatei zum Gewässerstand geschrieben. Voraussetzung ist, dass in der rast.dbf Gewässer (Standgewässer, Fließgewässer) oder Horizontalfilterbrunnen vorgegeben sind.

Die Dateibezeichnung enthält das Datum und wird in der Form waJJJMM.DD gebildet. Die Einträge sind sortiert nach Standgewässer, Fließgewässer und zuletzt die Horizontalfilterbrunnen. Für Standgewässer wird neben dem Wasserstand, Einspeisung und den Überläufen zu anderen Gewässern auch die mittlere Tiefe (= Vorrat / Fläche) angegeben, welche für die Berechnung der Seeverdunstung verwendet wird.

```
Gewässer am 01.02.2002

Nummer Name  h in m    Tiefe    Q in m3/m   Überläufe in m3/m

  102   see    42.54    6.49  -8.97136E-08  q(see<-bac) =  2.93747E-01

Nummer    Name      h in m  hr in m  qr in m3/m  Tiefe  qf in m3/m

    1 flu  9  1 1   43.91    44.00  1.71671E-01  2.00  7.99828E+02  8.00000E+02 Einspeisung
    2 flu  9  2 1   43.82    43.90  1.47242E-01  2.00  7.99681E+02
    3 flu  8  3 1   43.82    43.90  1.47274E-01  2.00  7.99534E+02
    4 flu  7  4 1   43.74    43.80  1.18314E-01  2.00  7.99415E+02
    5 flu  7  5 1   43.65    43.70  9.95782E-02  2.00  7.99316E+02
    6 flu  6  6 1   43.56    43.60  8.40027E-02  2.00  7.99232E+02
    7 flu  5  7 1   43.55    43.60  9.03632E-02  2.00  7.99142E+02
    8 flu  5  8 1   43.47    43.50  6.36057E-02  2.00  7.99078E+02
    9 flu  4  9 1   43.46    43.50  7.85995E-02  2.00  7.98999E+02
   10 flu  3 10 1   43.37    43.40  5.72787E-02  2.00  7.98942E+02
   11 flu  3 11 1   43.37    43.40  6.74450E-02  2.00  7.98875E+02
   12 flu  2 12 1   43.30    43.30 -6.19946E-03  2.00  7.98881E+02
   13 flu  1 13 1   43.18    43.20  3.79812E-02  2.00  7.98843E+02
   14 flu  1 14 1   43.20    43.20  7.12934E-03  2.00  7.98836E+02
   15 flu  1 15 1   43.09    43.10  2.34987E-02  2.00  7.98812E+02
   16 flu  1 16 1   43.08    43.10  3.89524E-02  2.00  7.98773E+02
   17 flu  1 17 1   42.99    43.00  1.62671E-02  2.00  7.98757E+02
   18 flu  1 18 1   42.90    42.90 -6.78350E-03  2.00  7.98764E+02
   19 flu  2 19 1   42.89    42.90  1.41016E-02  2.00  7.98750E+02
   20 flu  3 20 1   42.79    42.80  1.54722E-02  2.00  7.98734E+02
   21 flu  3 21 1   42.70    42.70 -5.24354E-03  2.00  7.98739E+02
   22 flu  4 22 1   42.69    42.70  2.53092E-02  2.00  7.98714E+02
   23 flu  4 23 1   42.60    42.60  1.24525E-02  2.00  7.98702E+02
```

Abbildung 9-2: Beispielausgabe der Gewässerdatei für Projekt Altlast

9.3 Ausgabe von Ergebnissen im Shapefile- oder dbf-Format

Spezielle Drucklisten über die Option „#pmas“ werden nur noch aus historischen Gründen unterstützt. Mit den im Programm PCGEOFIM implementierten Tools können diese Listen als Grafik wesentlich effektiver erzeugt werden. Eine Ausnahme bilden die zu nutzerdefinierten Zeitpunkten ausgegebenen Resultatdateien, die im folgenden Abschnitt beschrieben werden.

Es besteht die Möglichkeit, diese Ausgabe mit der Datei {proj}rmas.dbf zu aktivieren. Darin wird festgelegt, zu welchen Zeitpunkten Ergebnisse und Randbedingungen gespeichert werden. Die Tabelle 9-4 zeigt die Struktur der Steuerdatei und die Tabelle 9-5 ein Beispiel.

9.3.1 Ausgabe lupenbasierter Informationen

Mit Beginn der Geofim-Version 16.4.5 werden für sowohl für einstellige Lupenmodelle als auch für Modelle mit erweiterter Parameterstruktur identische Informationen in der dbf-Datei ausgegeben. Ausgegeben werden die Resultate für das globale Raster {proj}resu.dbf und alle Lupen {proj}res{l}.dbf | {proj}resu.d{ll} im Verzeichnis home\result\db{datum}. Bei Verwendung der neuen Parameterstruktur (Tabelle 3-2) erfolgt die Ausgabe in die Dateien {proj}re{ll}.dbf, wobei {ll} somit auch das Grundraster umfasst. Dabei wird jeweils die Struktur entsprechend Tabelle 9-6 geschrieben.

Tabelle 9-4: Struktur der Datei {proj}rmas.dbf

Feldname	Typ	Länge	Bemerkung
DATUM	D	8	Datum
RESULT	N	1	0 – keine Ausgabe von Grundraster und Lupen 1 – Ausgabe der Geschwindigkeit als Abstandsgeschwindigkeit v_a: $k_f \cdot$ grad h / n_e 2 – Ausgabe der Geschwindigkeit als Filtergeschwindigkeit v_f: $k_f \cdot$ grad h 3 – Ausgabe der Geschwindigkeit als Migrationsgeschwindigkeit v_m: $k_f \cdot$ grad h / n_w
RAND	N	1	0 – keine Ausgabe der Randbedingungen 1 – Ausgabe der Randbedingungen 2 – Ausgabe der zum Ausgabezeitpunkt aktiven Randbedingungen
COM	Z	20	Kommentar

Tabelle 9-5: Datei altlrmas.dbf im Beispiel Altlast

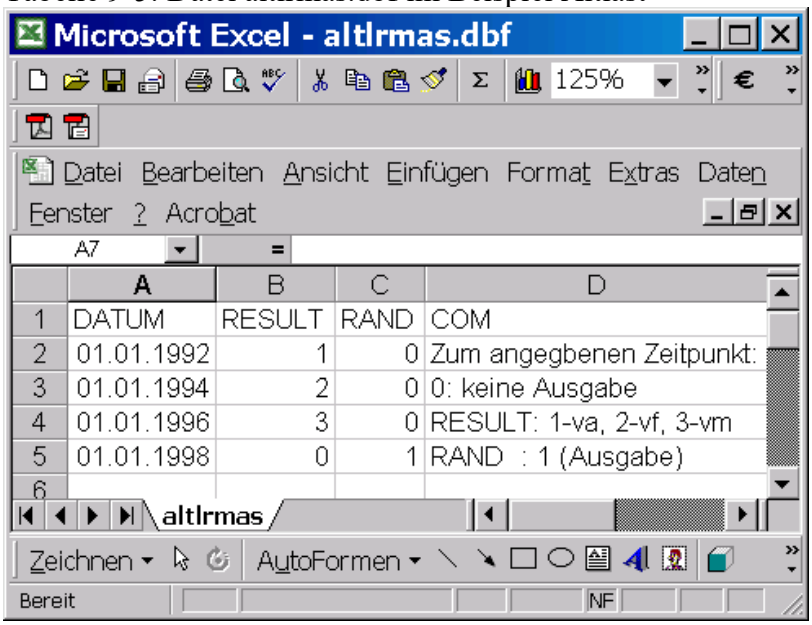


Tabelle 9-6: Struktur der Resultatdatei georesu.dbf

Name	Typ	Länge	Erläuterung
DATUM	D	8	Datum (Ausgabezeitpunkt)
ZEIT	N	11	
XM	N	11.3	Koordinaten des Elementmittelpunkts in m
YM	N	11.3	
LUPE	Z | N	1 | 2	Lupenbezeichnung oder -nummer
IS	N	3	Nummerierung in x-Richtung
JZ	N	3	Nummerierung in y-Richtung
MG	N	2	Nummerierung in z-Richtung
ZU	N	7.2	Elementunterkante in m
ZO	N	7.2	Elementoberkante in m (berechnet)
M1	N	6.2	Mächtigkeit Schicht 1 in m
GEL	N	7.2	Gelände in m (aus para, parz, terr oder berechnet)
KF1	N	3.1	k_f-Wert = $KF1 \cdot 10^{KE1}$ in m/s
KE1	N	3	
LEAK	N	3.1	Leakage-Faktor $LEAK \cdot 10^{LEAKE}$ (von *MG* nach *MG*+1)
LEAKE	N	3	
NE	N	5.3	Entwässerbare Porosität
NS	N	5.3	Porosität der stagnierenden Phase
S0	N	7.5	spezifischer Speicherkoeffizient
IGWF	N	6	IGWF-Klasse zum Zeitpunkt, falls mit IGWF gerechnet wird
ISOTH	N	2	Isolinienthema
BIL1	Z	4	Name Bilanzklasse 1
BIL2	Z	4	Name Bilanzklasse 2
BIL3	Z	4	Name Bilanzklasse 3
LNVF	Z	1	Kennzeichnung lokale Netzverfeinerung
GWL	Z	4	Bezeichnung Grundwasserleiter
KOP	N	2	Kopplung MGWL (0: nein, 1: nach oben, -1: nach unten, 2:

			nach oben und unten)
STX	N	3.1	Störung in x-Richtung STX · 10^{STXE}
STXE	N	3	
STY	N	3.1	Störung in y-Richtung STY · 10^{STYE}
STYE	N	3	
STZ	N	3.1	Störung in z-Richtung STZ · 10^{STZE} (MG nach MG-1)
STZE	N	3	
H	N	8.3	Standrohrspiegelhöhe in m
GWN	Z	8.3	Grundwasserneubildung in *L/s/km²*
QGN	N	11.6	Grundwasserneubildung (alle Volumenströme in *Q-MASS*[9])
QRA	N	11.6	Volumenstrom Randbedingungen (inkl. Fließgewässer)
QBR	N	11.6	Volumenstrom Filterbrunnen
QWA	N	11.6	Volumenstrom Standgewässer
QXM	N	11.6	Volumenstrom[10] in negativer x-Richtung
QXP	N	11.6	Volumenstrom[10] in positiver x-Richtung
QYM	N	11.6	Volumenstrom[10] in negativer y-Richtung
QYP	N	11.6	Volumenstrom[10] in positiver y-Richtung
QZU	N	11.6	Volumenstrom[10] nach unten
QZO	N	11.6	Volumenstrom[10] nach oben
QBIL	N	11.6	Summe aller Aus- und Einspeisungen
VORRAT	N	12.4	GW-Vorrat im Finiten Volumenelement zum Ausgabezeitpunkt
VX	N	10.6	Geschwindigkeit[11] in x-Richtung in m/d
VY	N	10.6	Geschwindigkeit[11] in y-Richtung in m/d
VZ	N	10.6	Geschwindigkeit[11] in z-Richtung in m/d
GWFA	N	7.2	Grundwasser-Flurabstand in m
RH1-RH15	N	13.7	Konzentration 1-15 in *RHO_MASS*[9], falls Migration aktiviert
IDX	N	10	Index berechnet aus Lupe, IS, JZ, MG
COM	Z	20	Kommentar aus Parameterdatei

Die Ausgabe der Koordinaten des Elementmittelpunkts bringt Vorteile bei der Verarbeitung der Dateien in einem GIS. Die geschriebenen Dateien können auf diese Weise direkt als Point-Shape dargestellt werden. In Abbildung 9-3 wurde die Ergebnisdatei des Grundrasters für das Altlastbeispiel in ein GIS eingelesen und die aktiven Elemente markiert.

Für PCGEOFIM-Lizenznehmer, welche über die SHAPE-Option verfügen, wird die Ausgabe der Dateien georesu.dbf dahingehend erweitert, dass vollständige Shape-Dateien ausgegeben und die Dateien der Struktur georesu.dbf als Attributtabellen verwendet werden. Die Speicherung der Informationen erfolgt als Polygon-Z-Feature für jedes aktive Finite Volumenelement und wird in einem GIS als Modellgitter dargestellt (siehe Abbildung 9-4). Durch Extrusion

[9] Siehe Geofim-Steuerdatei Tabelle 2-1

[10] die Ausgabe eines positiven Werts bedeutet, dass der Volumenstrom in die entsprechende Richtung weist; bei Ausgabe eines negativen Werts erfolgt der Zustrom aus der entsprechenden Richtung des Nachbarelements

[11] Art der Geschwindigkeit wird über Feld RESULT in der Datei geormas.dbf festgelegt

über das Attribut M1 kann auch eine 3D-Darstellung des Modells erfolgen (Abbildung 9-5), falls die GIS-Software diese Funktion unterstützt.

Im Falle von 2D-Vertikal-Modellen (z.B. Schnittmodelle) werden für die Shape-Ausgabe die Werte ZU und M1 statt der Y-Koordinate verwendet, um die Polygone zu erstellen. Die Geometrie des Vertikal-Modells ist somit direkt im GIS darstellbar (siehe dazu Abbildung 9-6).

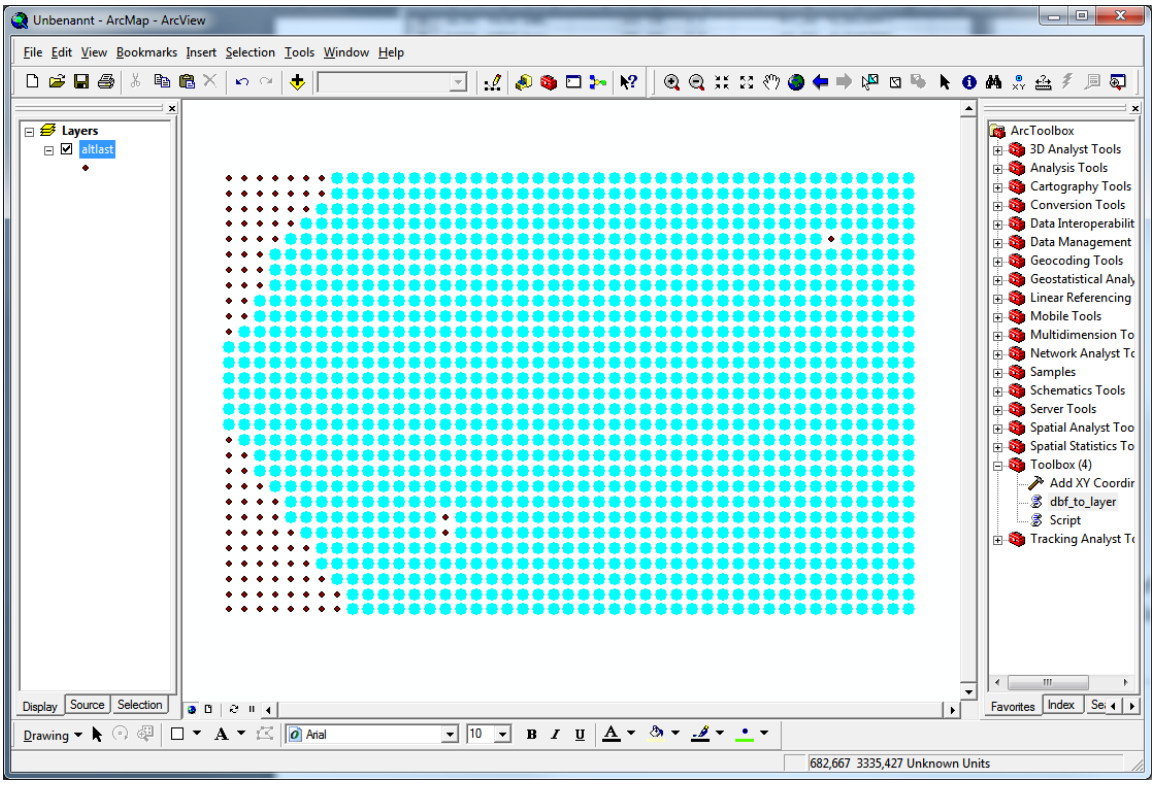


Abbildung 9-3: Darstellung des Grundrasters der Ergebnisdatei in einem GIS als dbf-Datei (Punkt-Shape)

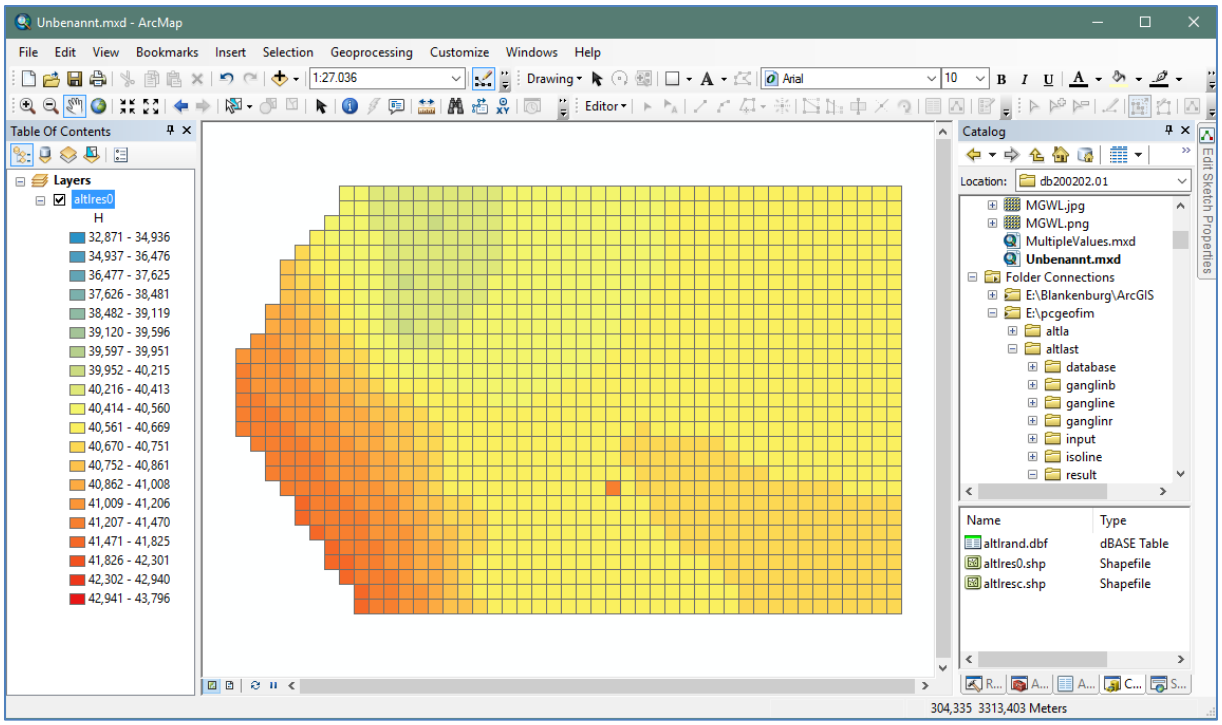


Abbildung 9-4: Darstellung des Grundrasters der Ergebnisdatei als Polygon-Shape

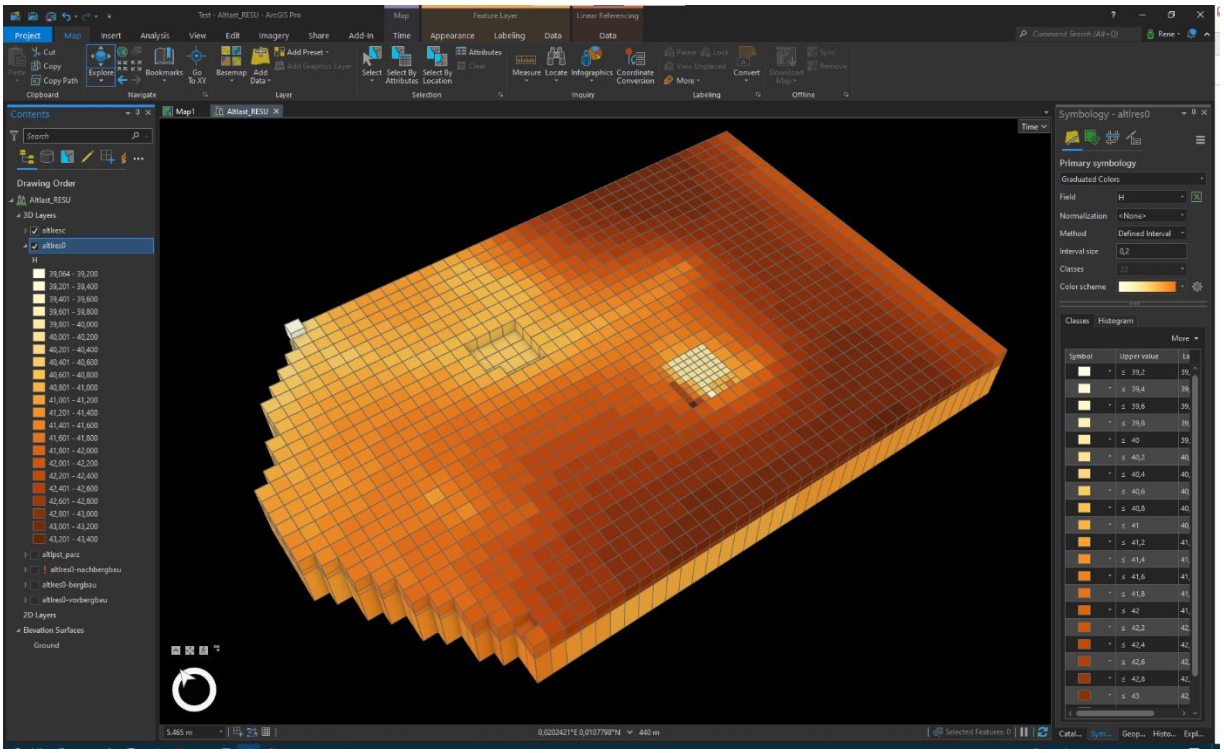


Abbildung 9-5: 3D-Darstellung des Modells in ArcGIS Pro mit 10-facher Überhöhung

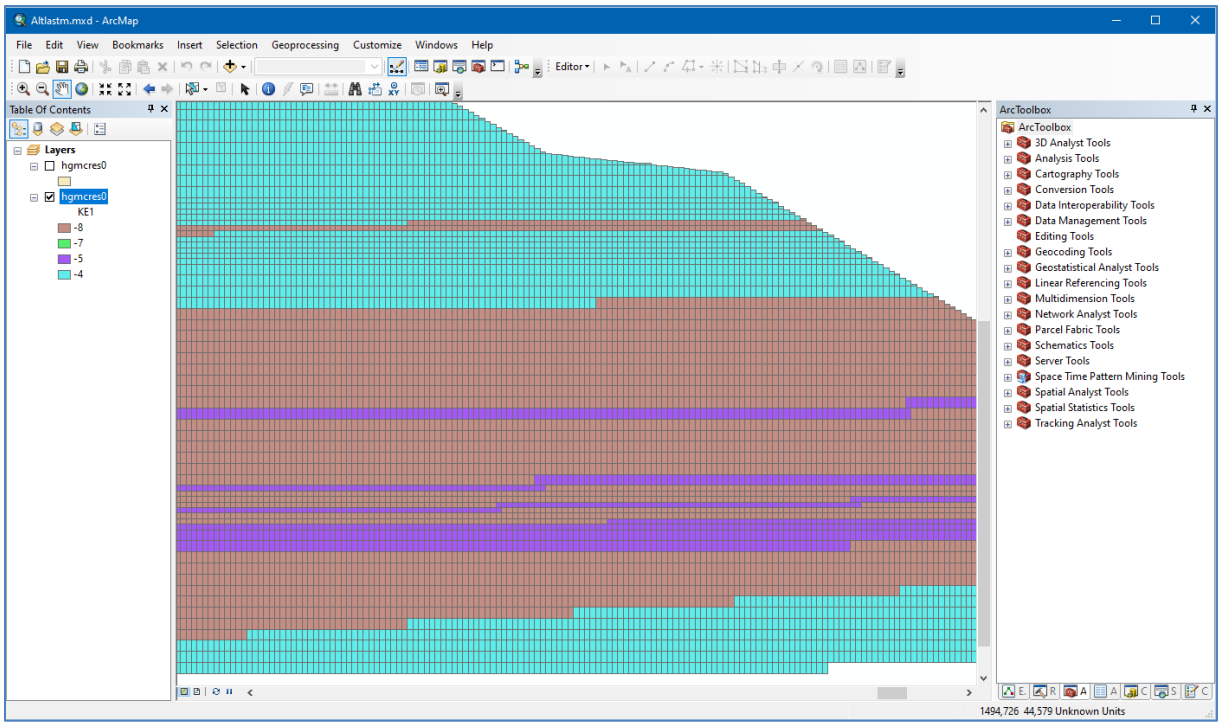


Abbildung 9-6: Darstellung der Ergebnisdatei eines 2D-Vertikal-Modells in einem GIS

9.3.2 Vereinfachte Ausgabe von Randbedingungsinformationen

Die Tabelle 9-7 beschreibt die Struktur der Datei {proj}rand.dbf, Tabelle 9-8 stellt einen Ausschnitt aus der Datei altlrand.dbf am 01.01.1998 dar. Beim Betrachten dieser Tabelle zeigt sich, dass neben allen Randbedingungen bei den gekoppelten Randbedingungen 3. Art Brunnen und Seen auch die einzelnen Zu- bzw. Abflüsse ausgegeben werden, die sonst nur am Bildschirm im Nicht-RUN-Mode ermittelt werden können. Eine optionale Ausgabe im Shapefile-Format ist derzeit nicht implementiert.

Tabelle 9-7: Struktur der Datei {proj}rand.dbf

Name	Typ	Länge	Erläuterung
DATUM	D		Datum
XM	N	11.3	Koordinaten des Elementmittelpunkts in m
YM	N	11.3	
NAME	Z	3	Name der Randbedingung
LUPE	Z | N	1 | 2	Lupe
IS	N	3	Nummerierung in x-Richtung
JZ	N	3	Nummerierung in y-Richtung
MG	N	2	Nummerierung in z-Richtung
ART	Z	1	Randbedingungsart
BILG	Z	8	Bilanzklasse Gewässer
HR	N	8.3	Randspiegelhöhe in m NHN
QR	N	15.9	Randvolumenstrom in *Q_MASS*[9]
H	N	8.3	Grundwasserstand in der indizierten Zelle
RH1 – RH15	N	15.8	Partialdichte 1 bis 15 in *RHO_MASS*[9]
COM	Z	20	Kommentar

Tabelle 9-8: Ausschnitt aus der Datei altlrand.dbf am 01.01.1998

XM	YM	NAME	LUPE	IS	JZ	MG	ART	BILG	HR	QR	RH1
850	50	flu		9	1	1	f		42,40	0,186780	
850	150	flu		9	2	1	f		42,30	0,157771	
750	250	flu		8	3	1	f		42,30	0,160204	
...											
750	2750	flu		8	28	1	f		40,58	0,088769	
750	2850	flu		8	29	1	f		40,49	-0,031004	
3250	1850	bac		33	19	1	f		41,50	-0,065841	
3150	1850	bac		32	19	1	f		41,50	-0,016795	
...											
2050	1850	bac		21	19	1	f		40,70	-0,004634	
1550	2050	gra		16	21	1	f		40,61	-0,013603	
1450	2050	gra		15	21	1	f		40,61	-0,013527	
...											
750	2850	gra		8	29	1	f		40,51	0,028955	
4450	50	ran		45	1	1	1		44,00	0,005383	
4450	150	ran		45	2	1	1		44,00	0,005424	
...											
4450	2850	ran		45	29	1	1		44,00	0,005507	
3050	1050	unf		31	11	1	m		41,33	0,000000	
1350	2650	bru		14	27	3	b		39,95	-0,333000	
1350	2650	bru		14	27		b		39,95	-0,333000	
...											
2550	850	bru		26	9	3	b		39,89	-0,667000	
2550	850	bru		26	9		b		39,89	-0,667000	
1750	1650	see		18	17	1	s	1	40,70	-0,016795	
1850	1650	see		19	17	1	s	1	40,70	-0,013369	
...											
1950	2050	see		20	21	3	s	3	40,70	0,015175	
0	0	see					s		40,70	0,000000	

9.3.3 Erweiterte Ausgabe von Randbedingungsinformationen

Die in Abschnitt 9.3.2 beschriebene Ausgabe von Randbedingungsinformationen wurde erheblich erweitert. Für die Randbedingungen Standgewässer, Flüsse und Brunnen wurde jeweils eine separate Struktur entwickelt, die im dbf-Format und optional als Shapefile ausgegeben werden (bei aktivierter SHAPE-Option). Die Darstellung in einem GIS wird dadurch erheblich erleichtert.

Das Namensschema für die Ergebnisdateien orientiert sich am PCGEOFIM-Standard und lautet bspw. {proj}rflu.dbf bzw. {proj}rflu.shp, wobei {proj} die ersten 4 Zeichen des PCGEOFIM-Modells bezeichnen.

Die erweiterte Ausgabe der Randbedingungsinformationen muss für eine PCGEOFIM-Lizenz zunächst freigeschaltet werden.

9.3.3.1 Ausgabe der Standgewässer in der Datei RSEE.dbf

Für jedes Standgewässer werden die in der Tabelle 9-9 aufgeführten Daten ausgegeben. Ist der See zum Ausgabezeitpunkt inaktiv, werden nur die Felder *DATUM* und *NAME* mit Werten belegt. Für das Feld *NIEDERSCHLAG* wird nur dann ein Wert ausgegeben, wenn für das Geofim-Modell die Datei {proj}klim.dbf bei der Berechnung verwendet wird. Andernfalls wird für das Feld *NIEDERSCHLAG* der Wert 0 ausgegeben. Die Felder *QUE1* und *QUE1_NAME* usw. sind optional und werden anhand der aktiven Kopplungen zum Ausgabezeitpunkt bestimmt.

Ist die SHAPE-Option für die PCGEOFIM-Lizenz verfügbar, wird eine Polygon-Z-Shape-Datei erstellt, die die gefüllten Konturen der jeweiligen Seerandbedingung repräsentiert. Die Datei {proj}RSEE.dbf entspricht in diesem Fall der Attributtabelle. Analog zur Isolinienberechnung über die Datei {proj}imas.dbf wird für den zum Ausgabezeitpunkt berechneten Seewasserstand die Kontur ermittelt. Dabei wird berücksichtigt, dass die Seekontur über Inseln verfügt oder sich mehrere Teilflächen ausbilden. In diesem Fall wird ein Polygon aus mehreren Teilen erstellt. Die Inseln stellen sich dann als Löcher in der grafischen Anzeige dar. Der Seewasserstand wird der Z-Koordinate des jeweiligen Polygons zugeschrieben. Ist eine Seerandbedingung zum Ausgabezeitpunkt inaktiv, kann keine Kontur berechnet werden. In diesem Fall wird ein sogenanntes „Null-Shape“ erzeugt, welches zwar über keine Geometrie verfügt, jedoch einen Eintrag in der Attributtabelle aufweist. Diese Vorgehensweise ist zur korrekten Darstellung einer Shape-Datei erforderlich. Ist ein See aktiv und kann aus diversen Gründen (z.B. keine Triangulation (*.tri) vorhanden, DGM des Sees fehlt usw.) keine Kontur erstellt werden, wird ebenfalls ein Null-Shape-Objekt ohne Geometriedaten erzeugt, um die Konsistenz der Datei zu gewährleisten.

Derzeit werden die Felder *QUE1* und *QUE1_NAME* usw. noch nicht mit Werten belegt.

Tabelle 9-9: Struktur der Datei RSEE.dbf

Feld	**Typ**	**Länge**	**Erläuterung**
DATUM	D		Zeitpunkt
ZEIT	N	8	
NAME	Z	3	Bezeichnung des Standgewässers
VOLUMEN	N	15.3	Volumen des Standgewässers in m³
FLAECHE	N	12.2	Fläche des Standgewässers in m²
TIEFE	N	7.2	Mittlere Tiefe des Standgewässers in m
H	N	7.2	Wasserstand des Standgewässers in m
Q	N	11.8	Ein- oder Ausspeisung in Q_MASS[9]
OBZUFLUSS	N	11.8	Oberirdischer Zufluss in Q_MASS[9]
NIEDERSCHL	N	11.8	Niederschlag in Q_MASS[9]
EVAP	N	11.8	Evaporation in Q_MASS[9]
HZ	Z	1	Steuerung zum Zeitpunkt (h oder q)
QZUGWL	N	11.8	Volumenstrom, der aus den gekoppelten Grundwasserleitern dem Standgewässer zufließt (in Q_MASS[9])
QABGWL	N	11.8	Volumenstrom, der aus dem Standgewässer an die gekoppelten Grundwasserleiter abgegeben wird (in Q_MASS[9])
QUE1	N	11.8	Überlauf in Q_MASS[9]
QUE1_NAME	Z	10	Quelle oder Ziel des Überlaufs (Name und Richtung)

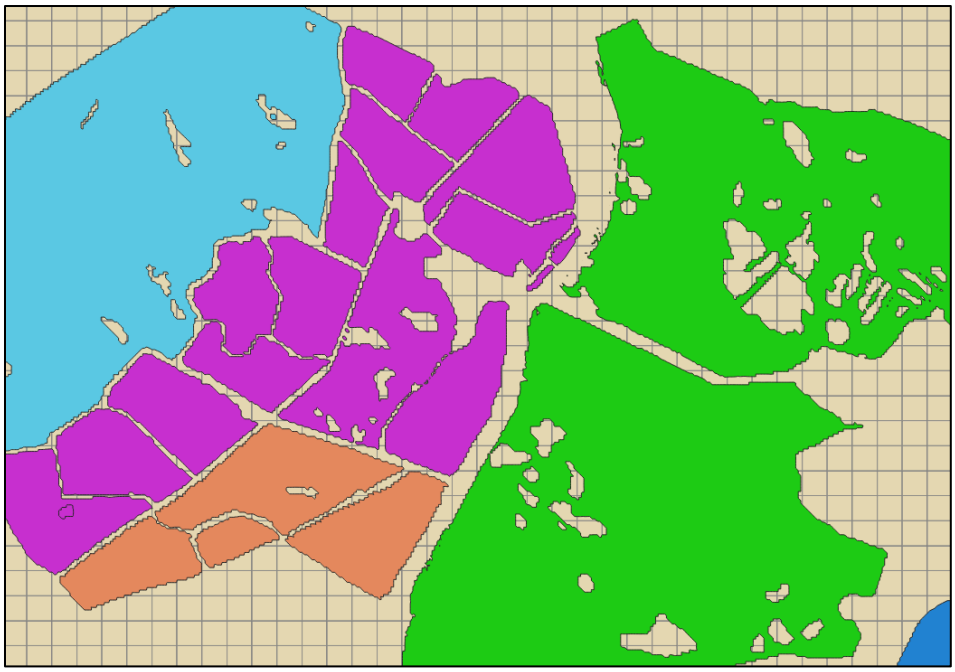


Abbildung 9-7: Beispieldarstellung der RSEE.shp in einem GIS und Symbolisierung nach NAME

9.3.3.2 Ausgabe der Flussrandbedingungen in der Datei RFLU.dbf

Die Ergebnisse der Flussrandbedingungen (Abschnittsweise) werden durch die in Tabelle 9-10 dargestellte Struktur ausgegeben. Das Feld *COM* wird zum aktuellen Entwicklungsstand noch nicht mit Daten gefüllt, da das Einlesen des *COM*-Felds in der Rast noch nicht erfolgt. Ist die Shape-Option der PCGEOFIM-Lizenz aktiviert, wird eine Polygon-Z-Shape-Datei gespeichert, deren Attributtabelle der Datei RFLU.dbf entspricht. Die Felder *Q2* und *Q2_NAME* usw. sind optional und werden zum Ausgabezeitpunkt aus den aktiven Kopplungen bestimmt. Maximal werden 6 Kopplungen ausgegeben.

Tabelle 9-10: Struktur der Datei RFLU.dbf

Feld	Typ	Länge	Erläuterung
DATUM	D		Zeitpunkt
XM	N	11.3	Koordinaten des Elementmittelpunkts in m
YM	N	11.3	
NAME	Z	3	Bezeichnung
NAME_EXT	Z	16	Externer Name der Randbedingung (aus rast.dbf)
LUPE	Z | N	1 | 2	Lupennummer oder -bezeichnung
IS	N	3	Index in x-Richtung
JZ	N	3	Index in y-Richtung
MG	N	2	Index in z-Richtung
FGWID	N	3	Flussbezogene Stationsnummer
LTWT	N	3.1	Leitwert LTWT · 10^{LTWTE} in m/s (Austausch zwischen Fluss und Grundwasserzelle)
LTWTE	N	3	
H	N	7.2	Grundwasserstand im Element in m
HR	N	7.2	Wasserstand der Randbedingung in m
QR	N	12.5	Austauschrate mit Grundwasser in Q_MASS[9]
TIEFE	N	7.2	Wasserstand im Flussabschnitt (bezogen auf Flusssohle)

			in m
QF	N	12.5	Durchfluss (Abfluss) im Flusselement (Q_MASS[9])
Q1	N	12.5	Ein- oder Ausspeisung (optional) (Q_MASS[9])
Q1_NAME	Z	18	Einspeisung, Ausspeisung, Herkunft oder Ziel Q1
Q2	N	12.5	Ein- oder Ausspeisung (optional) (Q_MASS[9])
Q2_NAME	Z	18	Einspeisung, Ausspeisung, Herkunft oder Ziel Q2
QN	N	12.5	Ein- oder Ausspeisung (optional) (Q_MASS[9])
QN_NAME	Z	18	Einspeisung, Ausspeisung, Herkunft oder Ziel QN
IDX	N	10	Index berechnet aus Lupe, IS, JZ, MG
COM	Z	15	Kommentar aus rast.dbf

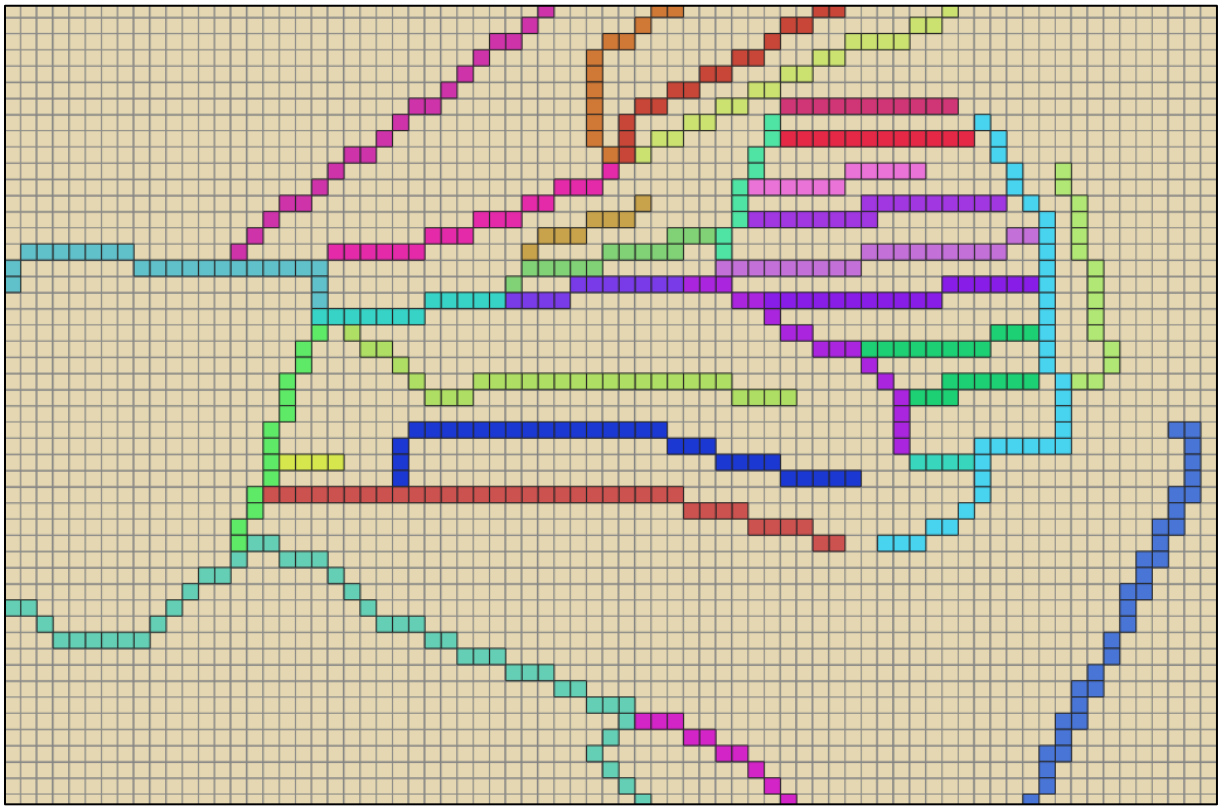


Abbildung 9-8: Beispieldarstellung der RFLU.shp in einem GIS und Symbolisierung nach NAME

9.3.3.3 Ausgabe der Brunnenrandbedingungen in der Datei RBRU.dbf

Für jede Brunnenrandbedingung eines PCGEOFIM-Modells, dazu werden auch Horizontalfilterbrunnen gezählt, werden zunächst die Ergebnisse der Lokal- und anschließend der Globaldaten in der Datei {proj}rbru.dbf ausgegeben (Struktur siehe Tabelle 9-11). Beim Globaldatensatz entspricht der Volumenstrom Q der Summe der Lokaldatensätze. Über die Sohle und die Filterlängen der Lokaldatensätze kann die Anbindung eines Brunnens kontrolliert werden. Für Globaldatensätze wird das Feld *MG* mit Null belegt und kein IDX ausgegeben (bzw. Null). Damit lassen sich Global- und Lokaldaten auf einfache Weise filtern.

Ist für die PCGEOFIM-Lizenz die SHAPE-Option aktiviert, wird eine Point-Shape-Datei ausgegeben, deren Attributtabelle dann die Datei {proj}rbru.dbf entspricht. Die Verortung in der Point-Shape-Datei erfolgt dann analog zu den Koordinaten der Felder *XM* und *YM*.

Derzeit wird das Feld COM noch nicht mit Werten belegt.

Tabelle 9-11: Struktur der Datei RBRU.dbf

Feld	Typ	Länge	Erläuterung
DATUM	D		Zeitpunkt
XM	N	11.3	Koordinaten des Brunnens (aus brun.dbf, x/y in rast.dbf oder Elementmittelpunkt) in m
YM	N	11.3	
NAME	Z	3	Bezeichnung des Brunnens als Randbedingung
NAME_EXT	Z	16	Externer Name der Randbedingung (aus brun.dbf oder name_ext in rast.dbf)
LUPE	Z | N	1 | 2	Lupennummer oder -bezeichnung
IS	N	3	Index in x-Richtung des Ziels
JZ	N	3	Index in y-Richtung des Ziels
MG	N	2	Index in z-Richtung des Ziels
HZ	Z	1	Steuerung zum Ausgabezeitpunkt (h oder q)
KFK	N	3.1	Kolmation KFK · 10^{KEK} in m/s
KEK	N	3	
D_R	N	4.2	Dicke der Kolmationsschicht in m
FL	N	7.2	Filterlänge des Brunnens in m
SOHLE	N	7.2	Filterunterkante des Brunnens in m
H	N	7.2	Grundwasserstand im gekoppelten Element in m
HB	N	7.2	Brunnenwasserstand in m
Q	N	10.5	Volumenstrom in Q_MASS[9] (Globaldatensatz stellt Summe dar); NB ist im Wert enthalten
Q_RABE	N	9.3	Volumenstrom der rabe.dbf in Q_MASS[9] bei Brunnen mit Q-Steuerung (nur Globaldatensatz); NB ist im Wert enthalten
NB	N	2	Anzahl Brunnen (nb aus rabe.dbf)
LTWT	N	3.1	Leitwert zwischen Brunnen und Grundwasserleiter (nicht für Globaldatensatz): Leitwert = LTWT · 10^{LTWTE}
LTWTE	N	3	
IDX	N	10	Index berechnet aus Lupe, IS, JZ, MG (nicht für Globaldatensatz)
COM	Z	15	Kommentar aus rast.dbf

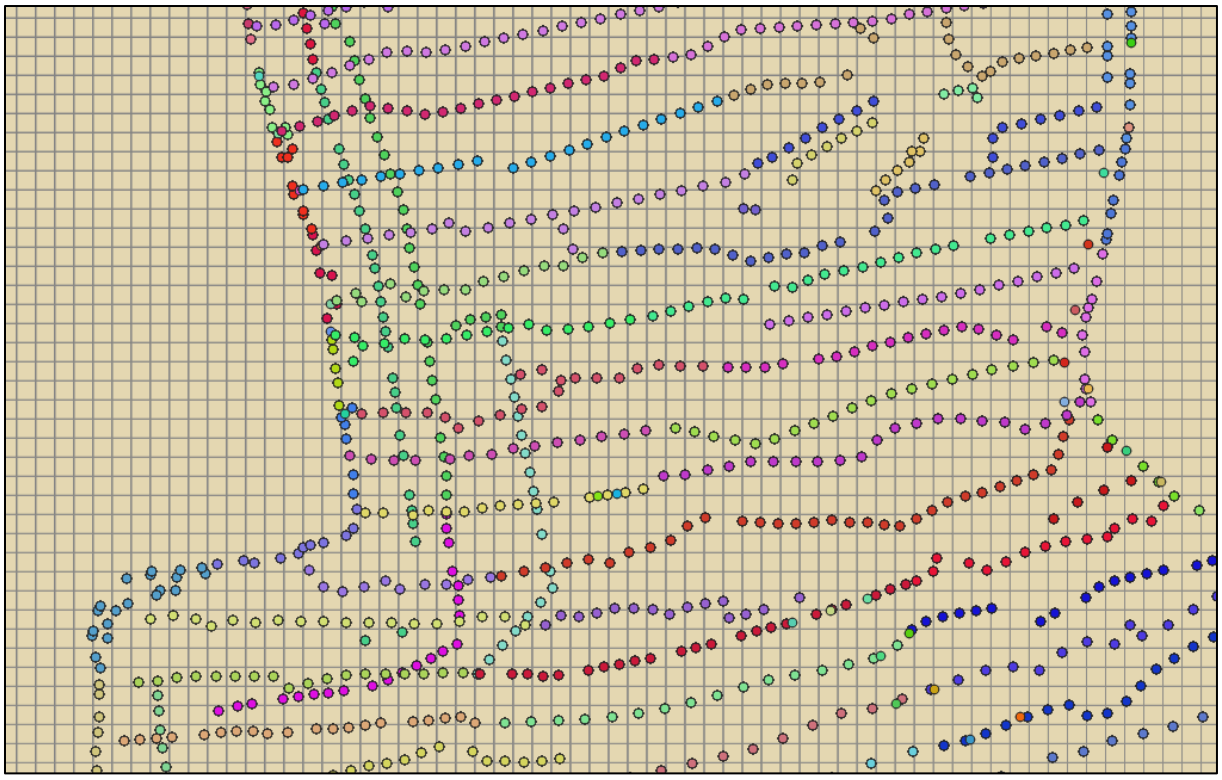


Abbildung 9-9: Beispieldarstellung der RBRU.shp in einem GIS und Symbolisierung nach NAME

9.3.3.4 Ausgabe der Gewässerüberläufe in der Datei RGEW.dbf

Zum Ausgabezeitpunkt werden die in der Datei {proj}gewa.dbf definierten und aktiven Gewässerkopplungen erfasst und in der Datei RGEW.dbf gespeichert. Die Ausgabe in Form einer Shape-Datei ist nicht umgesetzt, da für einige Einträge keine Geometrieinformationen generiert werden können. Die Struktur ist in Tabelle 9-12 aufgeführt und orientiert sich an den Eingabedaten der Struktur {proj}gewa.dbf.

Tabelle 9-12: Struktur der Datei RGEW.dbf

Feld	Typ	Länge	Erläuterung
DATUM	D	8	Zeitpunkt
VON	Z	3	Bezeichnung Quelle der Kopplung (Brunnen, See, Fluss)
NACH	Z	3	Bezeichnung Ziel der Kopplung (See, Fluss, Flusselement)
LUPE	Z | N	1 | 2	Lupe des Ziels (nicht bei Seen)
IS	N	3	Index IS des Ziels (nicht bei Seen)
JZ	N	3	Index JZ des Ziels (nicht bei Seen)
MG	N	2	Index MG des Ziels (nicht bei Seen)
XMVON	N	11.3	Koordinaten des Elementmittelpunkts oder Verortung der Quelle in m (nicht bei Seen)
YMVON	N	11.3	
XMNACH	N	11.3	Koordinaten des Elementmittelpunkts oder Verortung des Ziels in m (nicht bei Seen)
YMNACH	N	11.3	
HUEBER	N	7.2	Definierte Überlaufhöhe in der gewa.dbf
Q	N	13.6	Volumenstrom des Überlaufs in Q_MASS[9]
IDX	N	11	Index des Ziels, berechnet aus Lupe, IS, JZ, MG (nicht bei Seen)
COM	Z	20	Eintrag des COM-Felds aus der gewa.dbf

Lister (baseview) - [e:\pcgeofim\altlast\result\db200007.15\altlrgew.dbf]

Datei Bearbeiten Optionen Codierung Hilfe

DATUM	VON	NACH	LUPE	IS	JZ	MG	XMVON	YMVON	XMNACH	YMNACH	HUEBER	Q	IDX	COM
15.07.2000	bac	see					2050	1850				0,376989		
15.07.2000	gra	flu		8	29	1	750	2850	750	2850		0	802901	
15.07.2000	see	gra		16	21	1			1550	2050	40,85	0	1602101	
15.07.2000	bri	flu		1	18	1	2690	840	50	1750		-0,1	101801	
15.07.2000	bra	flu		1	18	1	1250	2450	50	1750		0,1	101801	

Abbildung 9-10: Beispieldarstellung der Einträge aus der RGEW.dbf

9.3.4 Projektionsinformation für die Shapefile-Ausgabe

Bei der Ausgabe von Shape-Dateien über die Option RMAS werden optional auch Projektionsinformationen für jede Shape-Datei gespeichert. Dazu ist in der Steuerdatei der Eintrag #EPSGIS zu ergänzen bzw. zu aktivieren (*JNR* = „j“) und ein entsprechender EPSG-Code zu definieren. Derzeit unterstützt Geofim folgende Codes:

Tabelle 9-13: Im Programm Geofim unterstützte EPSG-Codes

EPSG-Code	Erläuterung
3396	Gauß-Krüger-Zone 3, Datum **Potsdam,** 1983
3397	Gauß-Krüger-Zone 4, Datum **Potsdam,** 1983
3398	Gauß-Krüger-Zone 4, Datum **Rauenberg,** 1983
3399	Gauß-Krüger-Zone 5, Datum **Rauenberg,** 1983
25832	UTM-Zone 32N, ETRS89
25833	UTM-Zone 33N, ETRS89
31467	Gauß-Krüger-Zone 3, Datum **DHDN**
31468	Gauß-Krüger-Zone 4, Datum **DHDN**
31469	Gauß-Krüger-Zone 5, Datum **DHDN**

Ist die Option in der Steuerdatei aktiviert, wird zusätzlich zu den Dateien *.shp, *.shx und *.dbf noch die Datei *.prj ausgegeben, in der die Projektionsinformationen für das Koordinatenreferenzsystem enthalten sind. Bei der Darstellung in einem GIS (z.B. ArcGIS, QGIS) erfolgt durch das GIS dann automatisch eine Transformation in das Referenzsystem des GIS-Projektes und der Lagebezug wird hergestellt.

9.4 Ausweisen von Bilanzen im Programmsystem PCGEOFIM

9.4.1 Bilanzklassen

Das Programmsystem PCGEOFIM löst auf Grund der Anwendung der finiten Volumenmethode die Strömungsgleichung bilanztreu für jedes Volumenelement. Man kann deshalb Klassen bilden und für diese Klassen den Grundwasservorrat, die über die Kanten der Volumenelemente fließenden Wassermengen und die durch Quellen eingebrachten bzw. durch Senken entnommenen Wassermengen exakt ausweisen.

Dazu werden im Parametermodell Bilanzklassen definiert (siehe Tabelle 3-1). Finite Volumina, welche dieselbe Klassenbezeichnung besitzen, werden aggregiert, d. h. die Grundwasservorräte werden summiert, das über die Berandung zu- bzw. abfließende Grundwasser wird addiert, die Grundwasserneubildung wird summiert und die inneren Quellen und Senken werden als Randbedingungen (inklusive Fließgewässer), Brunnen und Standgewässer ausgewiesen.

Außerdem können Volumen- und Stoffströme ausgewiesen werden, die über eine vorgegebene Berandung strömen. Definiert werden die Bilanzen in der Datei {proj}bila.dbf. Die Struktur zeigt die Tabelle 9-14.

Tabelle 9-14: Struktur der Datei geobila.dbf zum Ausweis von Volumen- und Stoffströmen → home/database/{proj}bila.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
NAME	Z	12	Name der Bilanz zwischen Klassen
BILVON	Z	4	Name der "Von"-Bilanz
BILNACH	Z	4	Name der "Nach"-Bilanz
COM	Z	20	

An einem Beispiel soll die Vorgehensweise erläutert werden. Zu bestimmen ist der Zustrom zu einer Brunnengalerie mit einer Wasserhebung von 1 m^3/min. Die Galerie besteht aus drei Brunnen, die jeweils 0,333 m^3/min Wasser heben. Die Abbildung 9-11 zeigt das Gitternetz und fünf Bilanzklassen. Die Klasse **br** beschreibt den Brunnenriegel und mit Hilfe der Klassen **bw, bn**, **bo** und **bs** kann der Zustrom von Westen, Norden, Osten und Süden ermittelt werden.

Von PCGEOFIM wurden für die Klasse br die folgenden Zahlenwerte ermittelt (s. auch Tabelle 9-15). Die sieben finiten Volumina der Bilanzklasse br enthalten 495638 m^3 Wasser. Über den Rand des Bilanzgebietes (insgesamt zwanzig Kanten) fließen 0,999 m^3/min, die von den drei Brunnen gehoben werden.

Tabelle 9-15: Bilanz der Klasse br

Vorrat in m^3	Volumenstrom in m^3/min	
	über Begrenzung	Entnahme durch Brunnen
495638	0,999	-0,999

Über welche Kante das Wasser in das Gebiet der Brunnengalerie strömt, kann mit Hilfe der Bilanzen **bw → br**, **bn → br**, **bo → br** und **bs → br** ermittelt werden**.** Sie beschreiben den

Zustrom von Westen, Norden, Osten und Süden in das Bilanzgebiet **br**. Die Bilanz **bw** → **br** summiert sieben Volumenströme in x-Richtung und zwei Volumenströme in y-Richtung (immer von blau nach rot). Die Bilanz **bn** → **br** beschreibt den nördlichen Zustrom über eine Kante (von grün nach rot). Neun Volumenströme werden bei der östlichen Bilanz **bo** → **br** summiert. Der Anstrom von Süden erfolgt über nur eine Kante. Alle Bilanzen wurden ausgewertet und sind in Abbildung 9-11 mit eingetragen. Im Falle der Transportmodellierung werden auch die Stoffströme ausgewiesen.
Neben den hier vorgestellten Bilanzen können für Standgewässer limnologische Bilanzen berechnet werden. Dazu erhalten alle Kopplungen des Standgewässers mit dem Aquifer einen Namen, der in der Datei {proj}rast.dbf entweder im Feld *STEU* oder im Feld *BILG* festgelegt wird (s. Abschnitt 4.1). Kopplungen mit gleichem Namen werden summiert. Auf diese Art und Weise ist es möglich bei entsprechender Wahl der Namen die Volumenströme zwischen dem Standgewässer und dem Aquifer zu klassifizieren. So können die Zu- und Abflüsse zu verschiedenen Grundwasserleitern und Kippen gesondert ausgewiesen werden. Zusammen mit den auch in der limnologischen Bilanz enthaltenen oberirdischen Zu- und Abflüssen (Niederschlag, Zehrung, Fließgewässer, ...) wird für den Limnologen eine Excel-Tabelle erstellt, die es ihm gestattet die zukünftige Seequalität zu prognostizieren.

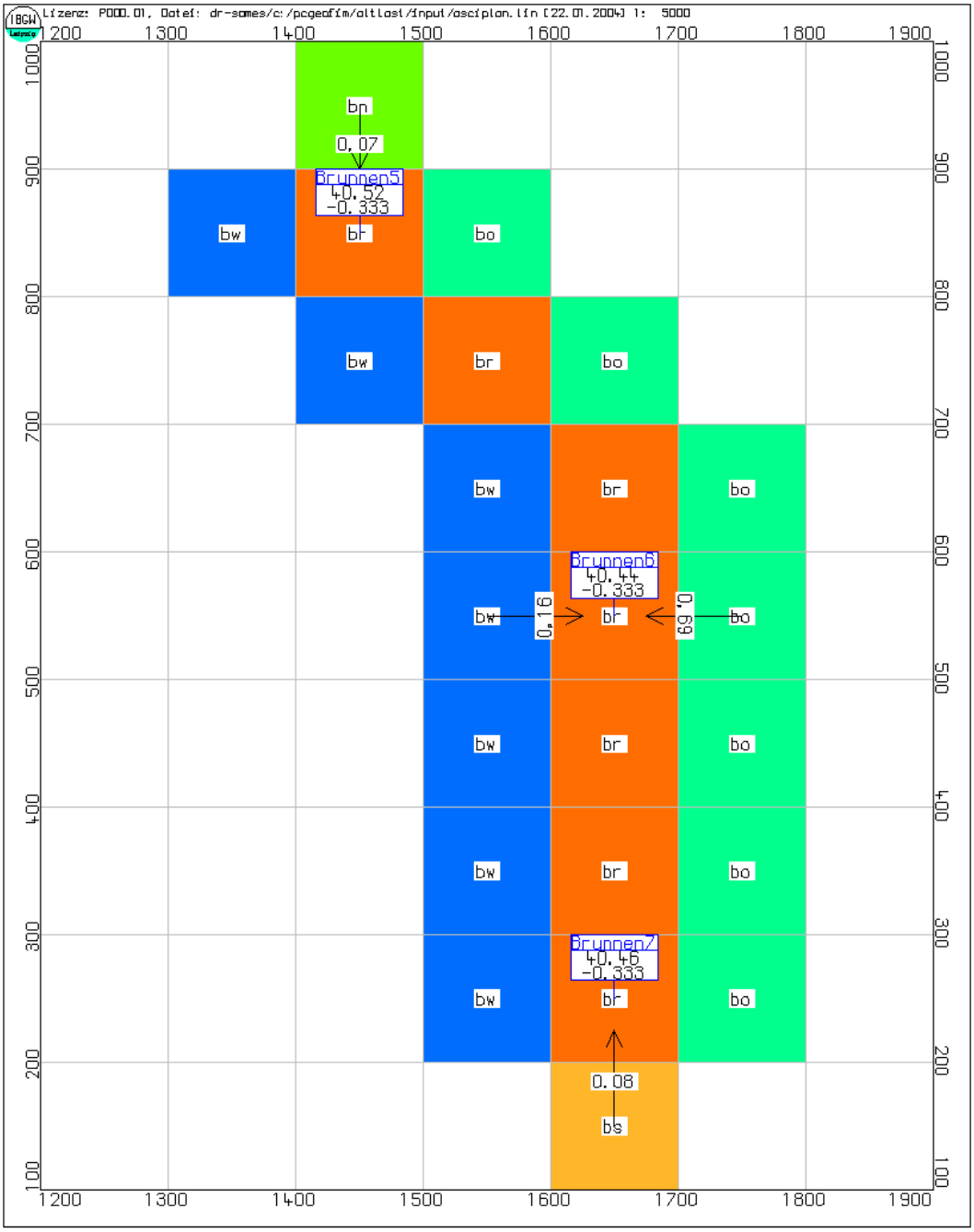


Abbildung 9-11: Zur Definition von Bilanzklassen

Die Abbildung 9-12 zeigt ein Beispiel für die Klassifizierung der Kopplungen des Sees an den Aquifer:

- see-1: horizontale Kopplung an den MGWL 1
- see-2: horizontale Kopplung an den MGWL 2
- see-3: horizontale Kopplung an den MGWL 3
- sees3: vertikale Kopplung an den MGWL 3

Definiert werden diese Klassen in der Datei {proj}para.dbf.

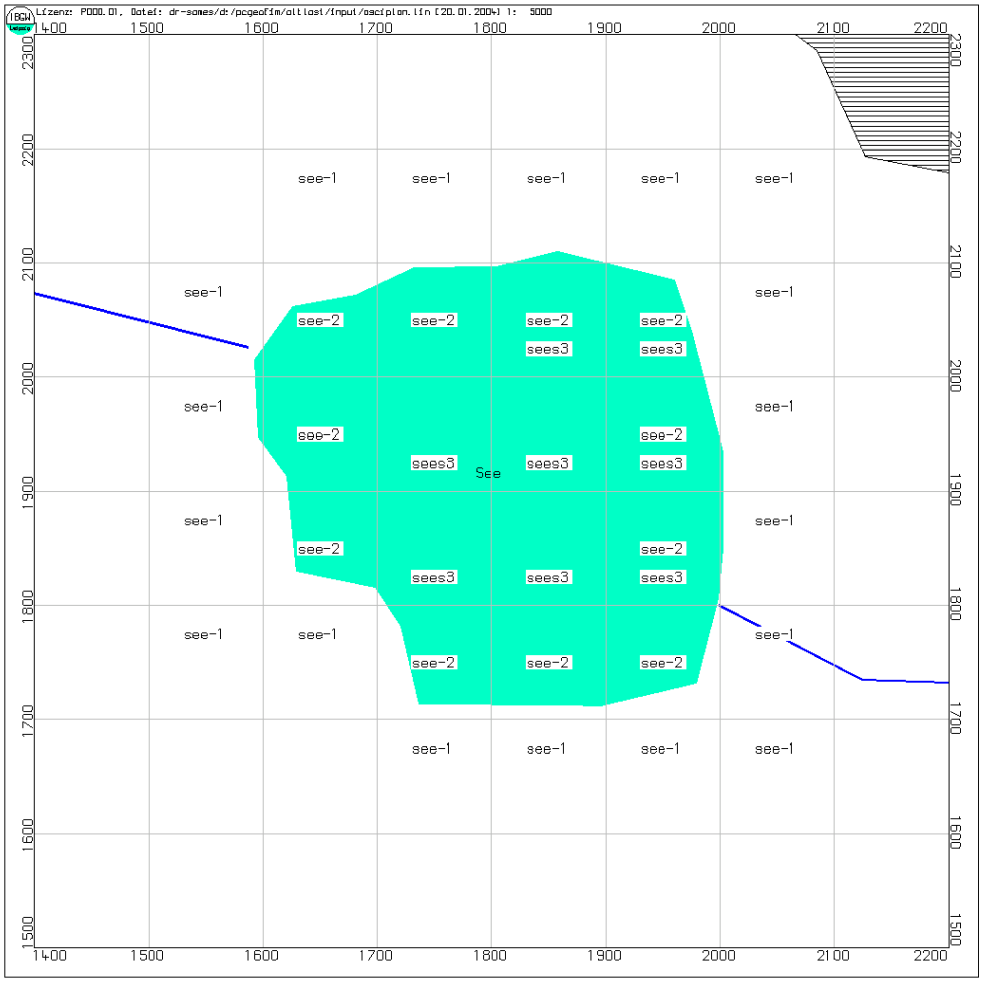


Abbildung 9-12: Limnologische Bilanzklassen, Einführungsbeispiel Altlast

In der Tabelle 9-16 sind die Zu- und Abflüsse für einen Zeitpunkt ausgewiesen. Es zeigt sich, dass vom MGWL 1 92 l/min in den See gelangen und dass der See 124 l/min in den MGWL 3 einspeist. Das Defizit gelangt über einen Graben zum See.

Tabelle 9-16: Bilanz der Zu- und Abflüsse zum Standgewässer "see"

qzu_see_1	qab_see_1	qzu_see_2	qab_see_2	qzu_see_3	qab_see_3
0,099	0,007	0,000	0,000	0,000	0,124

Angemerkt sei noch, dass die von PCGEOFIM ausgewiesene Bilanz alle den Limnologen interessierenden Zu- und Abflüsse enthält und die Tabelle 9-16 nur den hier für die Bilanzklassen interessierenden Teil enthält.

9.4.2 Ausgabe von Massenbilanzen

Im Falle der Migrationssimulation werden zum Berechnungsende die Massenbilanzen der berechneten Zeitschritte in eine ASCII-Datei ausgegeben. Die Daten werden in der Datei home\result\balance.txt abgelegt und sind in Tabelle 9-17 näher erläutert. Die Angaben beziehen sich jeweils auf das Datum bzw. den Zeitschritt.

Tabelle 9-17: Erläuterungen zum Inhalt der Datei balance.txt

Spalte in der Datei	**Bedeutung**
Datum bzw. Zeit	Datum bzw. Zeitangabe zum Zeitschritt
Masse in kg	Gesamtmasse im Aquifer
Quelle in kg	Masseneintrag durch Stoffquellen (Randbedingungen usw.)
Senke in kg	Massenaustrag über Randbedingungen
Abbau in kg	Massenverlust durch Abbauprozesse
Verlust kg	Masse, die den für die Migrationsrechnung definierten Aus-schnitt verlässt (siehe Tabelle 5-10)
Verl.stg.Ph	Massenverlust an die stagnierende Phase

9.5 Ausgabe von Isolinien während der Geofim-Berechnung

Zur Erhöhung der Bearbeitungseffektivität können Isolinienpläne während der Geofim-Simulation für ausgewählte Grundwasserleiter im PCGEOFIM-Grafik-Format ausgegeben werden und auch ein Export in das Surfer-Grid-Format wurde realisiert. Für den Export zu GIS steht das Tool Pcgspool zur Verfügung. Pcgspool konvertiert PCG-Files u. a. in DXF- und Shape-Files. Die Steuerung der Isolinienausgabe während der Geofim-Berechnung erfolgt über die Dateien {proj}imas.dbf und isoline.cfg.

Tabelle 9-18: Struktur der Datei {proj}imas.dbf

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
DATUM	Datum	8	Datum des Ausgabezeitpunkts; gleiche Angaben zulässig (bei Verwendung von FNAME obligatorisch)
MGWL	N	2	Modellgrundwasserleiter
ISOTHEMA	N	2	Isolinienthema (entweder MGWL oder Isothema vorgeben)
FNAME	Z	24	Name der Ausgabedatei; alle unter einer Ausgabedatei angegebenen MGWL oder Isothemen werden als Topview im Isolinienplan dargestellt (entspricht der aufsteigenden Auswahl mehrerer MGWL oder Isothemen im Tool Geoisol).
XMIN	N	7	Koordinatenausschnitt; keine Angabe zulässig
XMAX	N	7	
YMIN	N	7	
YMAX	N	7	
HMIN	N	6.2	Isolinienwerte; keine Angabe zulässig
HMAX	N	6.2	
DH	N	6.2	
GRD	N	1	Ausgabe als Surfer-Grid (1 aktiviert Option)
PCG	N	1	Ausgabe als PCGeofim-Grafik-Datei (1 aktiviert Option)
LIN	N	1	Ausgabe als lin-Datei (1 aktiviert Option)
COM	Z	26	Kommentar

Wenn im Feld „FNAME“ keine Vorgabe erfolgt, wird der Name der Ausgabedatei nach folgendem Prinzip erstellt: h{jjjj}{mm}{dd}{m | i}{mg | is}.{grd | lin | pcg}. Die Speicherung erfolgt immer in das Verzeichnis home\isoline (Hinweis: {m | i} und {mg | is}: MGWL oder ISOTHEMA).

Tabelle 9-19: Ein Beispiel für die Datei imas.dbf

Lister (baseview) - [e:\pcgeofim\altlast\database\altlimas.dbf]

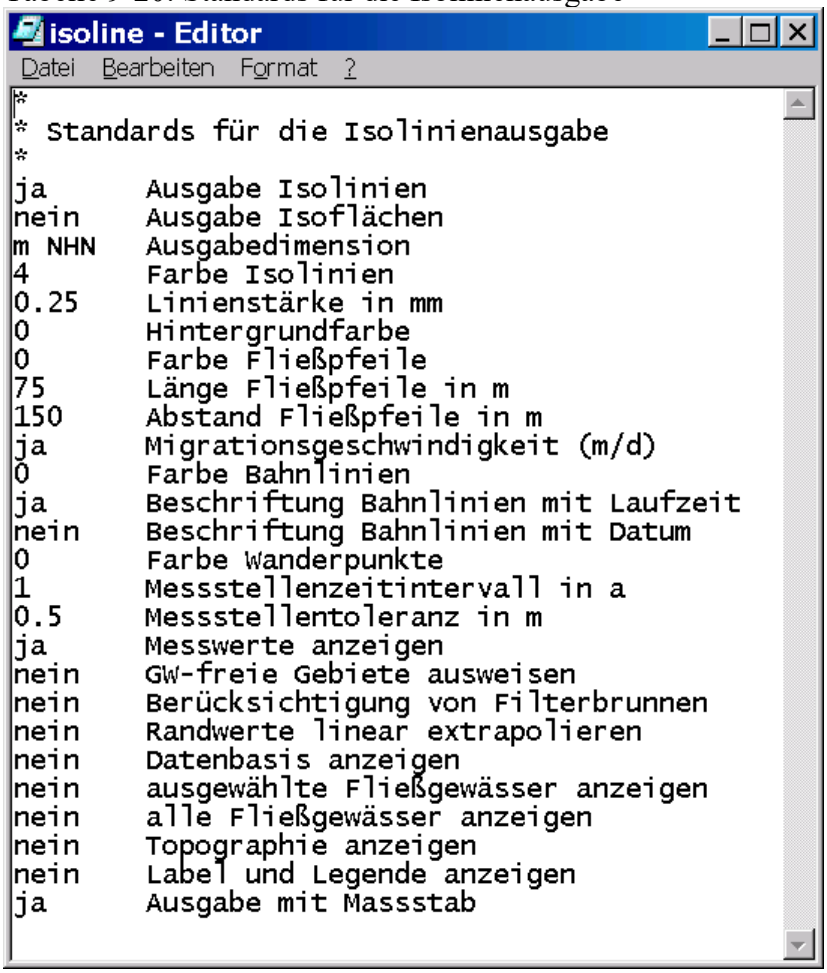
Datei Bearbeiten Optionen Codierung Hilfe 5 %

DATUM	MGWL	ISOTHEMA	FNAME	XMIN	XMAX	YMIN	YMAX	HMIN	HMAX	DH	GRD	LIN	PCG
01.02.1995		1										1	
01.04.1999	3	0										1	
01.07.1999	3	0										1	
01.01.2000	2	0										1	
01.01.2001	3							39	41	0,05	1	1	
01.01.2002	3	0						39	41	0,1	1	1	
01.02.2004	3	0						39	41	0,1	1	1	
01.05.2004	3	0						39	41	0,1	1		
01.01.2005	3	0						39	41	0,1	1		
01.01.2006	3	0						40	41	0,1	0		
01.01.2007	3	0						40	41	0,1			
01.01.2008	3	0									0	1	
01.01.2009	3	0										1	
01.01.2010	3	0										1	
01.01.2011	3	0										1	
01.01.2003	2							39	42	0,05	0	1	
01.07.2003	2							39	42,5	0,05	0	1	1
01.06.2000	1											1	
01.01.2005		12	altlast					34	44	0,1	1	1	
01.01.2005		14	altlast										
01.01.2005		25	altlast										

muster 1:22

Die Form der Isolinienausgabe wird mit Hilfe der Datei home\isoline\isoline.cfg festgelegt. Diese Datei ist identisch mit der vom Tool Geoisol benutzten Datei. Wenn isoline.cfg noch nicht existiert, wird sie von Geofim erzeugt. In der Tabelle 9-20 sind die Standards für die Isolinienausgabe zu sehen. Die Datei isoline.cfg kann vom Anwender auch editiert werden, solange die Struktur der Datei erhalten bleibt.

Tabelle 9-20: Standards für die Isolinienausgabe




```
*
* Standards für die Isolinienausgabe
*
ja      Ausgabe Isolinien
nein    Ausgabe Isoflächen
m NHN   Ausgabedimension
4       Farbe Isolinien
0.25    Linienstärke in mm
0       Hintergrundfarbe
0       Farbe Fließpfeile
75      Länge Fließpfeile in m
150     Abstand Fließpfeile in m
ja      Migrationsgeschwindigkeit (m/d)
0       Farbe Bahnlinien
ja      Beschriftung Bahnlinien mit Laufzeit
nein    Beschriftung Bahnlinien mit Datum
0       Farbe Wanderpunkte
1       Messstellenzeitintervall in a
0.5     Messstellentoleranz in m
ja      Messwerte anzeigen
nein    GW-freie Gebiete ausweisen
nein    Berücksichtigung von Filterbrunnen
nein    Randwerte linear extrapolieren
nein    Datenbasis anzeigen
nein    ausgewählte Fließgewässer anzeigen
nein    alle Fließgewässer anzeigen
nein    Topographie anzeigen
nein    Label und Legende anzeigen
ja      Ausgabe mit Massstab
```

Eine Änderung der Eintragungen 'Ausgabe Isoflächen', 'Berücksichtigung von Filterbrunnen bei der Isolinienkonstruktion' und 'Label und Legende anzeigen' wird nicht übernommen.

Weitere Informationen zur Gestaltung des Isolinienplans können als Levelfile, Lintypfile und Colorzonenfile vorgegeben werden, wobei die Vorgabe global bzw. für jeden gewählten MGWL bzw. Isolinienthema erfolgen kann. Abgelegt werden diese Dateien im Verzeichnis home\isoline. Die folgenden Tabellen beschreiben die Namenswahl und das Dateiformat.

Tabelle 9-21: Dateien zur Steuerung der Isolinienberechnung

Dateiname	**Bedeutung**
{projekt}.lvl	Wert der Isolinien
{proj}{ll}.lvl	Wert der Isolinien für MGWL bzw. Isothema ll
{projekt}.ltp	Linientyp der Isolinien
{proj}{ll}.ltp	Linientyp der Isolinien für MGWL bzw. Isothema ll
{projekt}.czn	Farbe der Isolinien
{proj}{ll}.czn	Farbe der Isolinien für MGWL bzw. Isothema ll
{proj}{ll}.sto[1]	die bei der Isolinienkonstruktion zu berücksichtigenden Störungen für MGWL bzw. Isothema ll

[1]Störungen werden als Linien im PCGEOFIM-Grafikformat vorgegeben.

Tabelle 9-22: Levelfile {proj}{ll}.lvl bzw. {projekt}.lvl[1]

Inhalt	Bedeutung	Beispiel
level_1	Wert der Isolinien	82 82.5
level_2	Vorgabe formatfrei,	83 83.5 83.75
...	auch mehrere Werte pro Zeile	...
level_n		115

[1]Bei Vorhandensein eines Levelfiles werden die Vorgaben *HMIN*, *HMAX* und *DH* ignoriert.

Tabelle 9-23: Linetypefile {projekt}.ltp[1]

Inhalt	Bedeutung	Beispiel
level_1 lintyp_1	Linientyp der Isolinien,	82 1
level_2 lintyp_2	Vorgabe formatfrei	82.5 2
...	lintyp=1: voll	...
level_n lintyp_n	lintyp=2: unterbrochen	115 1

[1]Der Linientyp sollte für jede Isolinie definiert werden.

Tabelle 9-24: Colorzonefile {projekt}.czn[1]

Inhalt	Bedeutung	Beispiel
level_1 color_1	Farbe der Isolinien	82 4
level_2 color_2	Vorgabe formatfrei	85 3
...	1: schwarz 2: rot 3: grün 4: blau	90 1
level_n color_n	5: gelb 6: zyan 7: magenta 8: braun 9: grau	

[1]Die Farbe gilt, bis ein neuer Wert gefunden wird.

9.6 Ausgabe von Randbedingungsganglinien im PCGEOFIM-Grafik-Format während der Geofim-Simulation

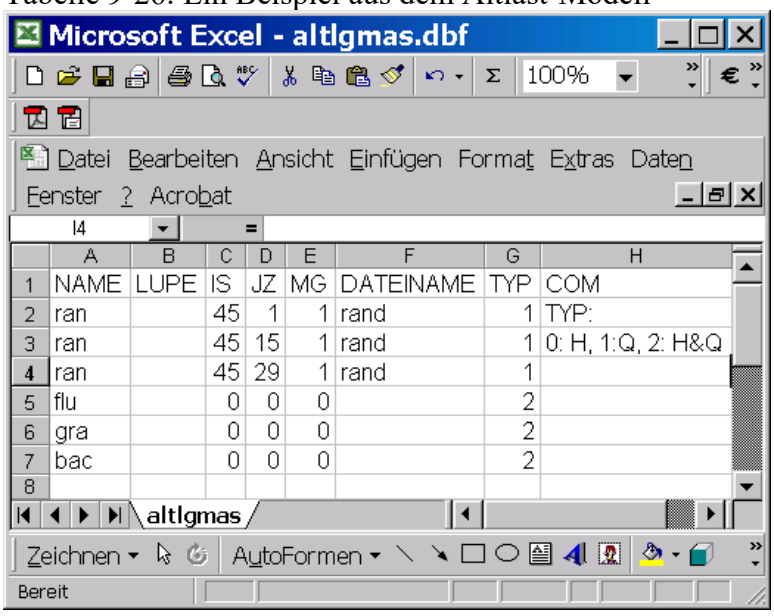
Zur Erhöhung der Bearbeitungseffektivität können Randbedingungsganglinien während der Geofim-Simulation im PCGEOFIM-Grafik-Format ausgegeben werden. Die Steuerung erfolgt über die Datei {proj}gmas.dbf.

Tabelle 9-25: Struktur der Datei {proj}gmas.dbf

Feldname	Typ	Länge
NAME	Z	3
LUPE	Z	1 | 2
IS	N	3
JZ	N	3
MG	N	2
DATEINAME	Z	12
TYP	N	1
COM	Z	20

Dabei bezeichnen *NAME*, *LUPE*, *IS*, *JZ* und *MG* den vollständigen Namen der auszugebenden Randbedingung, Brunnen oder Gewässer und *TYP* den Ganglinientyp (0: H-Ganglinie, 1: Q-Ganglinie, 2: H und Q in einem Diagramm). Bis zu acht Randbedingungen werden in einem Diagramm gezeigt, wenn bei H- bzw. Q-Ganglinien der gleiche *DATEINAME* gewählt wird. Weitere Ganglinien mit gleichem *DATEINAMEN* werden nicht ausgegeben. Wenn der *DATEINAME* nicht vorgeben wird, erhält die Ganglinie den Namen *NAME//LUPE//IS//JZ//MG*. Enthält *DATEINAME* das Zeichen „/“ (Slash) oder „\“ (Backslash), wird dieses durch das Zeichen „_“ (Unterstrich) ersetzt. Der Name *NAME* bleibt davon unberührt.

Tabelle 9-26: Ein Beispiel aus dem Altlast-Modell



	A	B	C	D	E	F	G	H
1	NAME	LUPE	IS	JZ	MG	DATEINAME	TYP	COM
2	ran		45	1	1	rand	1	TYP:
3	ran		45	15	1	rand	1	0: H, 1:Q, 2: H&Q
4	ran		45	29	1	rand	1	
5	flu		0	0	0		2	
6	gra		0	0	0		2	
7	bac		0	0	0		2	
8								

9.7 Ausgabe von Messstellen- und Gruppenganglinien im PCGEOFIM-Grafik-Format während der Geofim-Simulation

Auch Messstellen- und Gruppenganglinien können während der Geofim-Simulation im PCGEOFIM-Grafik-Format ausgegeben werden. Die Steuerung erfolgt über die Datei {proj}mmas.dbf.

Tabelle 9-27: Struktur der Datei {proj}mmas.dbf

Feldname	Typ	Länge
NAME	Zeichen	16
DATEINAME	Zeichen	max. 100
TYP	Numerisch	1
MGOUT	Numerisch	1
HQ	Numerisch	1
MIG1	Numerisch	1
MIG2 … MIG15	Numerisch	1
COM	Zeichen	20

Dabei bezeichnet *NAME* den Namen der auszugebenden Messstelle, Gruppe oder Bilanz und *TYP* den Ganglinientyp (0: Messstellen-Ganglinie, 1: Gruppen-Ganglinie, 2: Bilanz-Ganglinien). Das Feld HQ wird derzeit nicht ausgewertet und bleibt zukünftigen Anwendungen vorbehalten. Für die Ausgabe von Konzentrationen können die Spalten *MIG1* bis *MIG15* belegt werden. Die Migrationsganglinie wird dann ausgegeben, wenn in der entsprechenden Spalte eine 1 als Eintrag vorhanden ist.

Ab Programmversion 16.2.0 des Simulators Geofim wird zusätzlich das Feld MGOUT ausgewertet. Wird das Feld mit einem Wert von 1 belegt, wird für Messstellen des Typs 0 der jeweilige Modellgrundwasserleiter in der Legende der Gangliniendatei mit angegeben.

Bis zu acht Messstellen und Gruppen sowie eine Bilanz können in einem Diagramm gezeigt werden, indem der gleiche *DATEINAME* gewählt wird. Weitere Ganglinien mit gleichem *DATEINAMEN* werden nicht ausgegeben. Wenn der *DATEINAME* nicht vorgeben wird, erhält die Ganglinie den Namen *NAME.* Die vorgegebenen Dateinamen werden durch Geofim um ein Kürzel ergänzt, um eine eindeutige Unterscheidung des Inhalts zu gewährleisten:

- [*Dateiname*]_h.lin: Ganglinie für Spiegelhöhen
- [*Dateiname*]_q.lin: Ganglinie für q-Messstellen
- [*Dateiname*]_m[i].lin: Ganglinie für Migrationsmessstellen mit Mig [i]

Enthält *DATEINAME* das Zeichen „/“ (Slash) oder „\“ (Backslash), wird dieses durch das Zeichen „_“ (Unterstrich) ersetzt. Der Name *NAME* bleibt davon unberührt.

NAME	DATEINAME	TYP	HQ	MIG1	MIG2	MIG3	MIG4	MIG5
pegel1	mess_1	0	1	1	1	1	1	1
pegel2	mess_1	0	1		0		1	
pegel3	mess_1	0	1		0	1		
pegel8	mess_1	0	1	1	1		1	
pegel9	mess_1	0						
see	mess_s	0						
brunnen	gruppen	1						
fluss	gruppen	1						
fliessgw	gruppen	1						
over_all		2						
bil1		2						
bilanz12		2						
bilanz23		2						

Abbildung 9-13: Beispiel für eine Eingabedatei {proj}mmas.dbf

Hinweis: Es erfolgt sowohl bei der Randbedingungs- als auch bei der Messstellenausgabe eine Synchronisation zwischen den Programmen Geofim und PCGEOFIM mit Hilfe der Dateien home\gangline\geofim.inf und home\gangline\pcgeofim.inf, so dass ein gleichzeitiger Zugriff beider Programme auf Gangliniendateien unmöglich ist.

9.8 Ausgabe von Messwerten am Ende der Berechnung in die Dateien {proj}mess.dbf, {proj}rand.dbf, {proj}brun.dbf und {proj}gewa.dbf

Die Aktivierung dieser Ausgabe erfolgt durch die Zeile

#GANGLINE save (im Feld *UNIT*)

bzw.

#GANGLINE s_all (im Feld *UNIT*)

in der Geofim-Steuerdatei {projekt}.dbf. Die Option „save“ bewirkt, dass Berechnungswerte nur zu den Zeitpunkten gespeichert werden, wenn auch Messwerte vorhanden sind. Beim Setzen der Option „s_all“ werden alle berechneten und gemessenen Werte gespeichert. Das Setzen einer der beiden Optionen führt dazu, dass jede Zeitstützstelle in den Messstellenbewegungsdaten zu einem Berechnungszeitpunkt wird. Auf diese Art und Weise wird gewährleistet, dass alle berechneten Werte zum gegebenen Zeitpunkt mit den gemessenen Werten verglichen werden können. Die Ausgabe der Dateien erfolgt im Ordner home\result. Die Tabelle 9-28 zeigt die Struktur dieser Datei und die Abbildung 9-14 einen Ausschnitt aus der dbf-Datei altlrand.dbf.

Die Dateien können mit dem Tool Projgang eingelesen und als Ganglinie angezeigt werden. Darüber hinaus ist eine Verwendung in einem GIS sinnvoll.

Tabelle 9-28: Struktur der dbf-Dateien mess.dbf, rand.dbf, brun.dbf und gewa.dbf

Feldname	Typ	Länge
NAME_EXT	Z	16
NAME_INT	Z	13
X	N	11.3
Y	N	11.3
IDX	N	10
ISOTH	N	2
MG	N	2
DATUM | ZEIT	D | N	8 | 11
HB	N	6.2
QB	N	8.3
MIG1B	N	5.3
MIG1EB	N	3
HM	N	6.2
QM	N	8.3
MIG1M	N	5.3
MIG1EM	N	3
BEW	Z	1
BQ	Z	1
GWLOK	N	6.2
GWLUK	N	6.2
FIUK	N	6.2
FIOK	N	6.2
GWSTOCK	Z	4
FELD1	Z	6
FELD2	Z	6
FELD3	Z	6
FELD4	Z	6
TEXT	Z	16
COM	Z	16

Lister (baseview) - [e:\pcgeofim\altlast\result\altlmess.dbf]

Datei Bearbeiten Optionen Codierung Hilfe 0 %

NAME_EXT	NAME_INT	X	Y	IDX	ISOTH	MG	DATUM	HB	QB	MIG1B	MIG1EB	HM	QM	MIG1M	MIG1E
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.09.2001	41,91	0			41,69			
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	06.09.2001	41,91	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.10.2001	41,85	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	06.10.2001	41,83	0			41,68			
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	22.10.2001	41,79	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.11.2001	41,76	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	06.11.2001	41,75	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	07.11.2001	41,75	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.12.2001	41,7	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	06.12.2001	41,71	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	22.12.2001	41,76	0			41,67			
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.01.2002	41,79	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	06.01.2002	41,79	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	22.01.2002	41,82	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.02.2002	41,83	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	06.02.2002	41,82	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	10.02.2002	41,82	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.03.2002	41,79	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	07.03.2002	41,8	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.04.2002	41,83	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	07.04.2002	41,83	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.05.2002	41,83	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	07.05.2002	41,83	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	23.05.2002	41,81	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.06.2002	41,8	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	07.06.2002	41,8	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.07.2002	41,77	0						
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	07.07.2002	41,77	0			41,75			
pegel1	mes 22 10 1	2120	950	2201001	0	1	01.08.2002	41,79	0						

pegel1

1:852

Abbildung 9-14: Ausschnitt aus Datei altlmess.dbf

9.9 Ausgabe von ASCII-Ganglinien am Ende der Berechnung

Am Ende einer Geofim-Berechnung wird die Datei {home}\gangline\boundary.txt ausgegeben, wenn die Datei {proj}amas.dbf (siehe Tabelle 9-29) in der Geofim-Steuerdatei aktiviert wurde. Diese Datei enthält die Namen von ausgewählten Randbedingungen und Brunnen. Die Datei boundary.txt enthält die Ganglinien als ASCII-Tabelle.

Tabelle 9-29: Struktur der Datei {proj}amas.dbf

Feldname	Typ	Länge
NAME	Zeichen	3
LUPE	Zeichen	1|2
IS	Numerisch	3
JZ	Numerisch	3
MG	Numerisch	2
COM	Zeichen	20

11 Berechnung der Modellgüte

Die in Tabelle 9-2 aufgeführten Dateien error.dbf und error.txt können seit Geofim-Version 17.3.0 in zwei verschiedenen Gütefunktionen ausgegeben werden. Version 1 gibt zur Standardabweichung noch den prozentualen Anteil der Messstelle am Gesamtgütefunktional aus. In Version 2 wird statt der Standardabweichung der Root Mean Squared Error (RMSE) sowie statt des prozentualen Anteils das multiple Bestimmtheitsmaß pro Messstelle ausgegeben. Die Standardeinstellung ist Version 2. Um Version 1 zu aktivieren, muss in der Steuerdatei das Schlüsselwort „#OLDSTA“ mit „j“ eingetragen werden (siehe Tabelle 2-1).

11.1 Version 1 der Messstellengüteberechnung

Für jeden Modellgrundwasserleiter werden die Anzahl der Messstellen und deren Messwerte, die Mittelwerte für berechnete und gemessene Wasserstände ausgegeben. Zusätzlich erfolgt die Ausgabe von Summenwerten über alle Modellgrundwasserleiter. Des Weiteren wird für das Gesamtmodell die Standardabweichung der Durchflüsse an Pegeln ausgegeben. In der Datei home\result\error.dbf erfolgt ebenfalls die Ausgabe der messstellenspezifischen Statistiken.

Die Berechnung der Standardabweichung erfolgt über die Zuordnung durch eine Messstelle und Vorgabe der entsprechenden Messwerte in der {proj}pebe.dbf. Die Ausgabe der berechneten Standardabweichung erfolgt am Ende der Simulationsrechnung.

11.2 Version 2 der Messstellengüteberechnung

Grundsätzlich erfolgen die Berechnung und Ausgabe der Modellgüte analog zur oben beschriebenen Version 1. Statt der Standardabweichung wird jedoch der Root Mean Squared Error (RMSE, Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers) und zusätzlich das multiple Bestimmtheitsmaß R^2 in Prozent ausgewiesen. Dafür entfällt der prozentuale Anteil der Messstelle. Der RMSE berechnet sich anhand folgender Gleichung:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_1^n (Obs_i - H_i)^2}{n}}$$

mit

Obs_i Messwert i (Wasserstand, Konzentration Abfluss)
H_i Berechneter Wert i (Wasserstand, Konzentration, Abfluss)

11.2.1 Normalisierter RMSE

Lizenzabhängig werden zusätzlich zum RMSE zwei normalisierte RMSE berechnet und ausgegeben. Die Normalisierung erfolgt in diesen Fällen zum einen durch den Mittelwert der Messwerte, und zum anderen wird die Max-Min-Differenz der Beobachtungen als Normierung herangezogen. Die Berechnung erfolgt anhand der beiden nachfolgenden Gleichungen:

Normalisierung durch den Mittelwert (Average) der Beobachtungen

$$NRMSE_A[\%] = \frac{RMSE}{\overline{Obs}} \cdot 100$$

Normalisierung durch die Max-Min-Differenz der Beobachtungen

$$NRMSE_M[\%] = \frac{RMSE}{Obs_{max} - Obs_{min}} \cdot 100$$

11.2.1.1 Numerische Eigenschaften des normalisierten RMSE

Da die Normalisierung durch die Größe im Nenner erfolgt, kann es unter bestimmten Umständen zu numerischen Problemen kommen, auf die an dieser Stelle kurz hingewiesen werden sollen.

Beim $NRMSE_A$ kann der Nenner für folgende Szenarien sehr kleine Werte erreichen:

- Messwerte schwanken um den Nullpunkt
- Fallende Grundwasserstände im Zuge von Entwässerungsmaßnahmen mit Vorzeichenwechsel können bei der Mittelwertbildung gegen Null gehen
- Steigende Grundwasserstände nach Beendigung von Entwässerungsmaßnahmen mit Vorzeichenwechsel können bei der Mittelwertbildung gegen Null gehen

Beim $NRMSE_M$ wird der Nenner für folgende Szenarien sehr klein:

- Grundwasserstände sind weitestgehend stationär
- Schwankungsbreite der Messwerte ist generell sehr gering, z.B. GWM im Grundwasserstauer
- Es ist nur ein Messwert im Zeitintervall vorhanden

Um potenziell sehr hohe Werte bei der Berechnung des NRMSE zu vermeiden, ist programmintern ein Mindestschwellwert von 0,01 m für den Nenner definiert, unterhalb dessen der NRSME = 0 gesetzt wird. Diese Maßnahme verhindert jedoch nicht, dass trotzdem Werte $\gg$ 100% für den NRMSE entstehen, da auch der Zähler eine Rolle spielt. Ein Beispiel aus dem Altlast-Modell kann Abbildung 11-3 entnommen werden.

11.2.2 Bestimmtheitsmaß

Das Bestimmtheitsmaß kann als Quadrat des Kreuzkorrelationskoeffizienten zwischen Messwert und Modellwert einer multiplen linearen Regression betrachtet werden und gilt als ein Maß zur Abbildung der Dynamik. Die Berechnung in Geofim erfolgt entsprechend der folgenden Gleichung:

$$R^2 = \frac{\left[\sum_i \left(Obs_i - \overline{Obs}\right) \cdot \left(H_i - \overline{Obs}\right)\right]^2}{\left[\sum_i \left(Obs_i - \overline{Obs}\right)^2\right] \cdot \left[\sum_i \left(H_i - \overline{Obs}\right)^2\right]} \cdot 100$$

mit

Obs_i	Messwert i
$\overline{Obs}$	Mittelwert der Beobachtungen
H_i	Berechneter Wert i

R^2 überstreicht einen Wertebereich von 0% - 100%, wobei 100% für eine perfekte Anpassung an die Modelldynamik stehen. Aus der Berechnungsvorschrift ergeben sich 2 Einschränkungen:

a) Ist nur ein Messwert vorhanden, wird kein R^2 ausgewiesen, da der der Nenner sich zu Null ergibt

b) Liegen Messwerte ausschließlich zeitlich unveränderlich vor, ergibt sich ebenfalls der Nenner zu Null und es wird kein R^2 ausgewiesen

11.3 Zeitabhängige Messstellengüte

Zur Berechnung einer zeitabhängigen Messstellengüte müssen entsprechende Zeitabschnitte definiert werden. Vorgegeben werden die Zeitabschnitte über die dbf-Datei {proj}tsta.dbf mit der Struktur aus Tabelle 11-1 oder Tabelle 11-2. Es können beliebig viele Zeitabschnitte, auch überlappend, vorgegeben werden. Falls keine Messwerte im Zeitraum vorhanden sind, erfolgt keine Ausgabe einer Standardabweichung. Ist nur 1 Messwert vorhanden, wird ein Hinweis für die entsprechende Messstelle ausgegeben.

Tabelle 11-1: Struktur der Datei {proj}tsta.dbf für Zeiteinheit „Datum“

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
STARTDATUM	Datum	8	Beginn des Zeitabschnitts
ENDDATUM	Datum	8	Ende des Zeitabschnitts
COM	Zeichen	10	Kommentar

Tabelle 11-2: Struktur der Datei {proj}tsta.dbf für alle anderen Zeiteinheiten

Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
STARTZEIT	Numerisch	8.1	Beginn des Zeitabschnitts
ENDZEIT	Numerisch	8.1	Ende des Zeitabschnitts
COM	Zeichen	10	Kommentar

Da die Dateien über die Zuordnung des Spaltennamens eingelesen werden, können die Spaltenlängen auch variiert werden (gilt nicht für Datumsfelder). Über das Schlüsselwort „#TSTA“ in der Geofim-Steuerdatei kann das Einlesen der Datei gesteuert werden (hinter „#SMASKE“, „r“ in Spalte „JNR“). Die Ausgabe der berechneten zeitabhängigen Statistiken erfolgt in den Dateien

error_JJJJMMDD_JJJJMMDD.txt

error_JJJJMMDD_JJJJMMDD.dbf

im Ordner home\result, wobei JJJJMMDD die Angabe „Jahr/Monat/Tag“ darstellt und den Start- sowie Endzeitpunkt des jeweiligen Statistikzeitraumes im Dateinamen beschreibt. Der Inhalt der Ausgabedateien entspricht dem Inhalt der o.g. error.txt bzw. error.dbf bezogen auf den jeweiligen Statistikzeitraum.

```
Statistiken fuer 01.02.2002 bis 01.02.2003

 MGWL          Anzahl                Mittelwert in m NHN          Standardabweichung
               Pegel     Messwerte      gemessen     berechnet          in m
    0            2          8          39.945          40.443           0.652
    1            6         21          41.475          41.988           0.935
    2            0          0           0.000           0.000           0.000
    3            4         13          40.571          39.710           1.847
 alle MGWL      12         42          40.904          40.989           1.228

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

       Anzahl                 Standardabweichung
   Pegel     Messwerte          in m3/min
      6          57               6.769

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

 Messstelle              x           y     Gitterpunkt lnv  Anzahl Mittelwert in m NHN  Standard-  Anteil
                                                            Messw. gemessen berechnet  abweichung    in %

 pegel2              1325.000     650.000    14   7  1        4     41.872    41.807     0.248      0.398
 pegel3              2475.000    2525.000    25  26  1        3     41.253    42.167     0.915      4.051
 pegel4              4250.000    2025.000    43  21  1        2     43.630    42.667     0.963      2.996
 pegel5               450.000    1265.000     5  13  1        5     41.528    41.784     0.347      0.972
 pegel6              2495.000     610.000    25   7  1        3     40.490    42.100     1.614     12.613
 pegel7              2150.000     305.000    22   4  3        4     40.583    39.644     0.953      5.861
 pegel8               810.000    1675.000     9  17  1        4     40.838    41.868     1.058      7.224
 pegel9              1575.000    2020.000    16  21  3        5     40.510    41.106     0.614      3.039
 pegel10             4025.000    2150.000    41  22  3        3     40.780    37.409     3.432     57.060
 see                 1800.000    1900.000                     1     40.590    42.200     1.610      4.185
 flu                   50.000    1550.000     1  16  1        1     41.490    41.199     0.291      0.137
 Brunnen1            1350.000    2650.000    14  27           7     39.853    40.192     0.341      1.312
 peglupe             2574.000     970.000 c   2   4  3        1     40.200    39.893     0.307      0.152

 Summe:                                                      43     40.917    40.994     1.214    100.000
```

Abbildung 11-1: Beispielausgabe der error.txt für Projekt Altlast für einen Zeitabschnitt (Version 1)

```
Statistiken vom 01.01.2005 bis 01.01.2016

 MGWL            Anzahl            Mittelwert in m NHN       RMSE
             Pegel   Messwerte      gemessen   berechnet      in m
    0          3          4          41.300     41.477      0.784
    1          5         31          42.128     42.422      1.184
    2          0          0           0.000      0.000      0.000
    3          3         21          40.785     41.829      1.045
alle MGWL     11         56          41.565     42.132      1.109

---------------------------------------------------------------

 Gruppe          Anzahl            Mittelwert in m NHN       RMSE
             Pegel   Messwerte      gemessen   berechnet      in m
 normal        8         52          41.586     42.182      1.130
 rb            3          4          41.300     41.477      0.784
 see           1          1          40.700     42.200      1.500
 fluss         2          3          41.500     41.237      0.264
 rand          0          0           0.000      0.000      0.000
 brunnen       0          0           0.000      0.000      0.000

---------------------------------

    Anzahl                 RMSE
 Pegel   Messwerte       in m3/min
     4         11          1.956

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

Messstelle              x           y     Gitterpunkt lnv  Anzahl Mittelwert in m NHN   RMSE    R² mult
                                                           Messw. gemessen berechnet    in m     in %

pegel2               1325.00      650.00    14   7  1        6    42.713    43.036     0.359    0.363
pegel4               4250.00     2025.00    43  21  1        7    43.987    42.700     1.292    0.001
pegel5                450.00     1265.00     5  13  1        7    41.833    41.744     0.138   14.103
pegel6               2495.00      610.00    25   7  1        5    40.694    42.972     2.280    0.000
pegel7               2150.00      305.00    22   4  3        7    40.764    41.771     1.007    0.006
pegel8                810.00     1675.00     9  17  1        6    40.915    41.814     0.903    0.108
pegel9               1575.00     2020.00    16  21  3        8    40.623    41.693     1.071    0.001
```

Abbildung 11-2: Ausgabe der error.txt für das Modell Altlast für einen Zeitabschnitt (Version 2), inkl. Messstellengruppierung

```
Statistiken fuer den gesamten Zeitraum

 MGWL            Anzahl            Mittelwert in m NHN       RMSE     NRMSE_A    NRMSE_M
             Pegel   Messwerte      gemessen   berechnet      in m       in %       in %
    0          6         64          40.140     40.340      1.066      2.656     30.553
    1          5        107          41.806     42.113      0.850      2.034     23.044
    2          0          0           0.000      0.000      0.000      0.000      0.000
    3          4         72          40.686     40.904      1.291      3.173    107.596
alle MGWL     15        243          41.035     41.288      1.054      2.570     24.184

-------------------------------------------------------------------------------------------------------------

    Anzahl                 RMSE      NRMSE_A    NRMSE_M
 Pegel   Messwerte       in m3/min      in %       in %
     6         47          0.970     35.826      2.666

-------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Messstelle              x           y     Gitterpunkt lnv  Anzahl Mittelwert in m NHN   RMSE    NRMSE_A   NRMSE_M   R² mult
                                                           Messw. gemessen berechnet    in m      in %      in %      in %

pegel2               1325.00      650.00    14   7  1       22    42.163    42.171     0.862     2.043    83.645    15.230
pegel4               4250.00     2025.00    43  21  1       20    43.755    43.370     0.491     1.121    86.063     0.709
pegel5                450.00     1265.00     5  13  1       25    41.635    41.660     0.273     0.656    41.401     1.634
pegel6               2495.00      610.00    25   7  1       16    40.558    42.238     1.699     4.189   514.811     2.463
pegel7               2150.00      305.00    22   4  3       18    40.641    40.743     1.007     2.478   387.281    41.358
pegel8                810.00     1675.00     9  17  1       24    40.864    41.402     0.584     1.428   389.114     0.710
pegel9               1575.00     2020.00    16  21  3       28    40.556    41.315     1.033     2.548   543.772     2.820
pegel10              4025.00     2150.00    41  22  3       24    40.863    40.567     1.730     4.234   494.308    36.065
see                  1800.00     1900.00                     4    40.645    42.200     1.556     3.827  1414.250     0.000
flu                    50.00     1550.00     1  16  1        4    41.495    41.226     0.270     0.650     0.000     0.182
```

Abbildung 11-3: Auszug aus der error.txt mit zusätzlicher Angabe des NRMSE

Hinweis: Mit dem Programm Isohypse kann die Datei error.dbf direkt geöffnet und über die Option „Messstellen anzeigen“ visualisiert werden.

12 Erreichen vorgegebener Entwässerungsziele mit minimaler Wasserhebung

Die Schutzziele werden als Messstelle vorgegeben, die den maximalen Grundwasserstand an dieser Stelle beschreibt. Im Feld *NAMKOP* wird vermerkt, dass sich am Ort *X*, *Y* ein Schutzziel befindet (*NAMKOP* = "schutzziel", siehe Tabelle 7-2). Das Schutzziel (Wert im Feld *H*) muss in der Datei {proj}pebe.dbf ohne Datum eingetragen werden. Die Abbildung 12-1 zeigt die Schutzziele zusammen mit den geplanten Maßnahmen: den Vertikalfilterbrunnen M 1 und die beiden Horizontalfilterbrunnen M 2/1 und M 2/2.

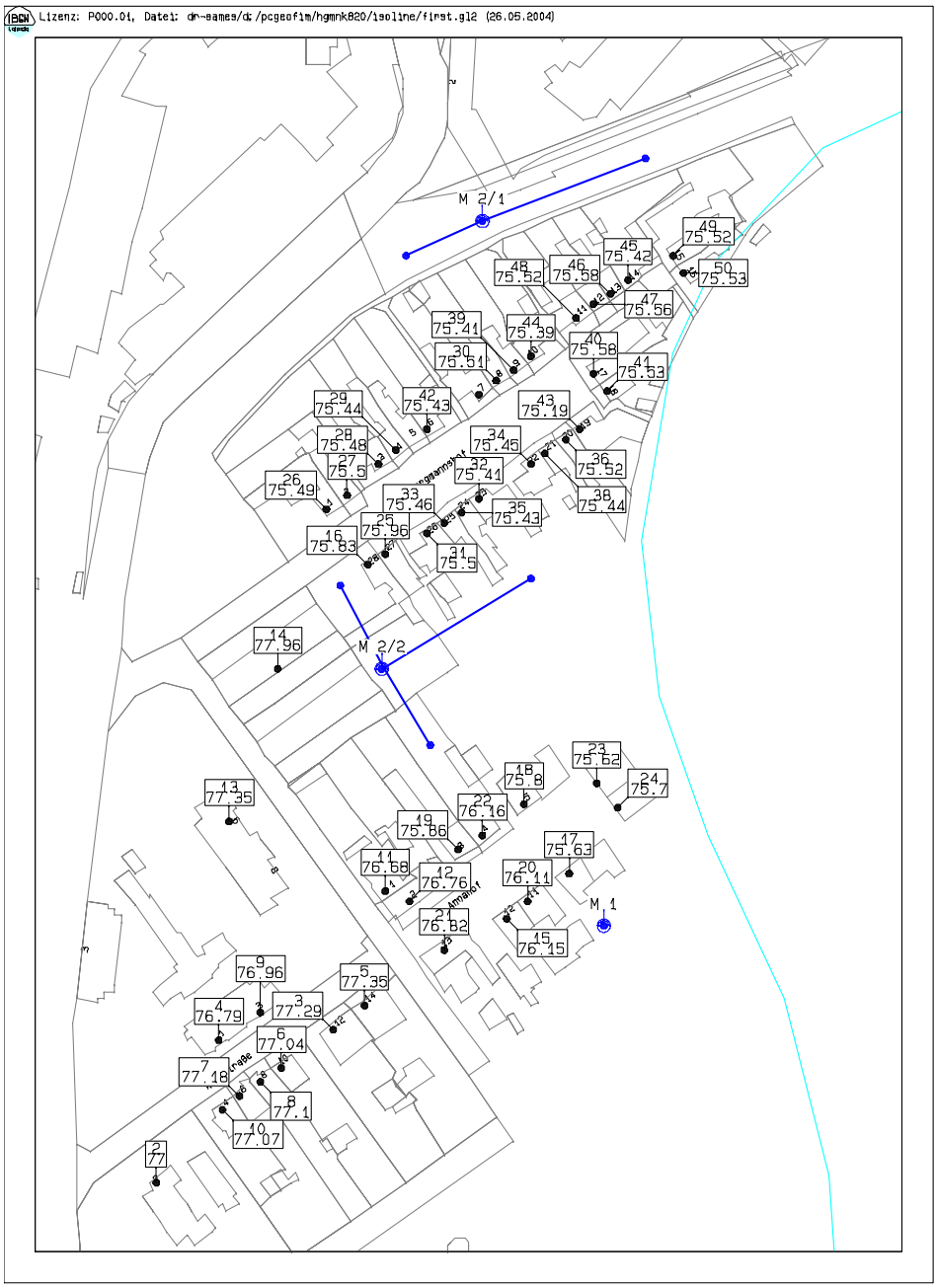


Abbildung 12-1: Definition der Entwässerungsziele und der Standorte der Filterbrunnen

Erst wenn eine stationäre Lösung ohne Einsatz der Maßnahmen vorliegt, kann die Brunnenoptimierung gestartet werden. Alle Filterbrunnen, deren Fahrweise optimiert werden soll, müssen Q-gesteuert und zeitabhängig definiert sein. Ebenso sollten die Vorgaben für *HMIN* und *HMAX* ausgefüllt werden. Welche Filterbrunnen dies sind und mit welcher Förderrate die Optimierung beginnen soll, wird in der Datei {proj}opti.dbf festgelegt. Die Tabelle 12-1 zeigt die Struktur.

Tabelle 12-1: Struktur der Datei geoopti.dbf → home/database/{proj}opti.dbf

Feld	Feldname	Typ	Länge	Erläuterung
1	*NAME_EXT*	Z	12	Externer Name des Filterbrunnens (definiert in Tabelle 7-1)
2	*QBRUN*	N	8.3	Förderrate zu Beginn der Optimierung in *Q-MASS*
3	*QBRUMIN*	N	8.3	Maximale Förderrate in *Q-MASS* (Förderung negativ !)
3	*COM*	Z	20	Kommentar

In der Datei {proj}opti.dbf kann eine Förderrate zu Beginn der Optimierung vorgegeben werden. Im Allgemeinen sollte *QBRUN* = 0 gesetzt werden. Um eine Optimierung fortsetzen zu können, aktualisiert der Simulator Geofim das Feld *QBRUN* der Datei {proj}opti.dbf bei regulärem Abbruch und bei Beendigung der Optimierung.

Um zu ermitteln, mit welcher Leistung die Horizontal- und Vertikalfilterbrunnen betrieben werden müssen, wird eine Einflussmatrix berechnet. Diese Matrix gibt Auskunft über die Verringerung des Grundwasserstandes am Ort x_s, y_s, mg_s, wenn die Förderrate des Filterbrunnens j um $\Delta Q_{E,j}$ erhöht wird. Zur Bestimmung der Matrix Δh_s / $\Delta Q_{E,\,HFB}$ wird das lineare Gleichungssystem genutzt, mit dem die Grundwasserstände ermittelt wurden. In dem Gleichungssystem wird für jeden Horizontalfilterbrunnen HFB die Förderrate um $\Delta Q_{E,\,HFB}$ erhöht. Für Vertikalfilterbrunnen ist die Vorgehensweise analog. Die h-Änderung wird ausgewertet und die Einflussmatrix aufgestellt.

Tabelle 12-2: Einflussmatrix und Schutzzielverletzung

Schutzziel	M 1	M 2/1	M 2/2	Verletzung
	in m/(m³/s)			in m
2	0,087	0,063	0,228	0,05
4	0,146	0,096	0,385	0,23
11	0,885	0,172	0,805	0,30
12	1,102	0,177	0,840	0,22
15	1,670	0,187	0,925	0,84
16	0,225	0,542	1,401	1,06
...				
50	0,052	0,709	0,248	1,24
Summe:	17,932	24,189	34,690	45,77

Die optimale Fahrweise wird nach der folgenden Optimierungsstrategie ermittelt: Für das am stärksten verletzte Schutzziel wird die Förderrate des wirksamsten Filterbrunnens um

$$\Delta Q_{E,\,FB} = (\Delta Q_{FB}/\Delta h_{FB})\ \Delta h_{opt} \qquad (\Delta h_{opt} = 0{,}25 \text{ m (Vorgabewert)})$$

erhöht. Die Auswirkung auf die übrigen Schutzziele wird mit Hilfe der Einflussmatrix ermittelt. Wenn noch Schutzziele existieren, die nicht signifikant beeinflusst werden, wird die Förderrate für weitere Filterbrunnen nach dem gleichen Algorithmus ermittelt. Die Schutzzielmatrix wird für jeden Optimierungsschritt in einer separaten Textdatei schumXXXX.txt im Ordner *RESULT* ausgegeben. Die Zeichenfolge XXXX ist der Platzhalter für den aktuellen Optimierungsschritt.

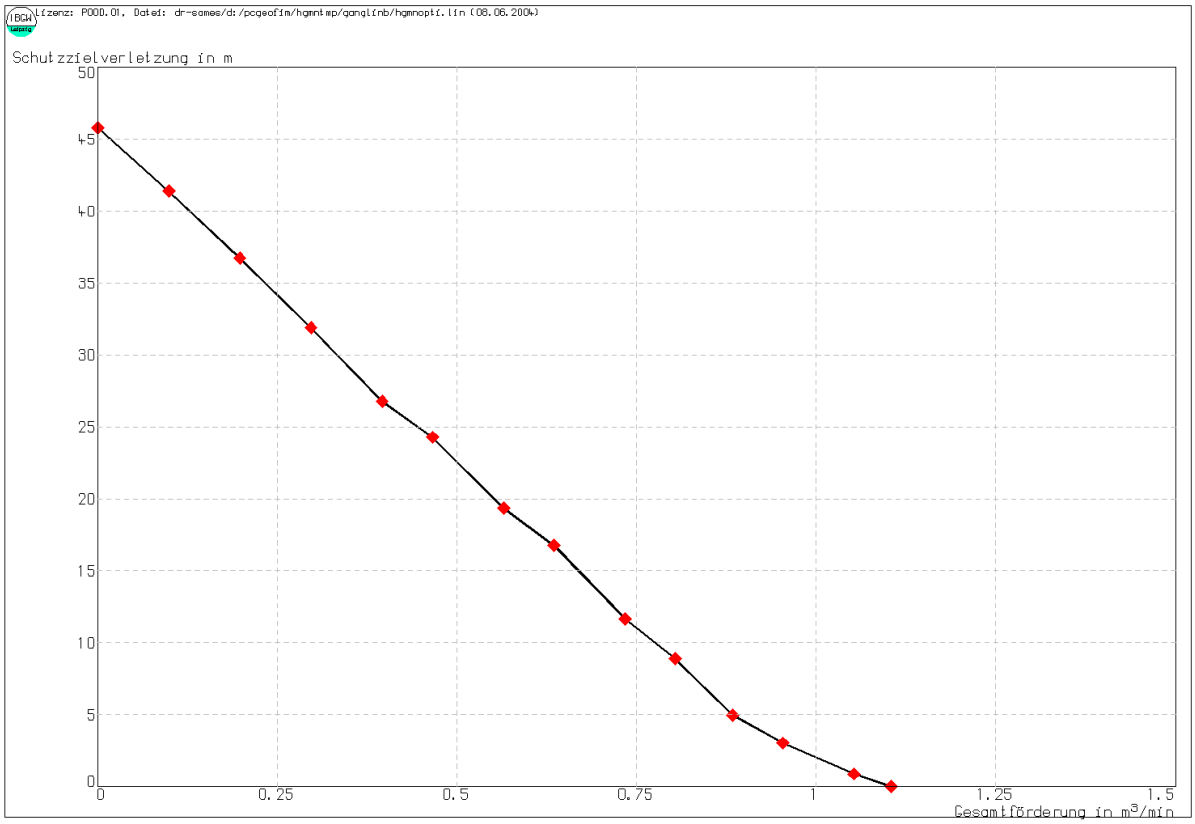


Abbildung 12-2: Iterative Ermittlung der optimalen Förderrate

Nach Abschluss der Optimierung wird die Datei {proj}optq.dbf im Ordner *RESULT* ausgegeben. Darin werden die Förderraten jedes Brunnens zeitabhängig aufgeführt.

13 Verweise

Glugla, G., Enderlein, R. und Eyrich, A. 1976. Das Programm RASTER - ein effektives Verfahren zur Berechnung der Grundwasserneubildung im Lockergestein. *Wasserwirtschaft - Wassertechnik.* 1976, 11, S. 377-382.

Hennig, Gerd. 1966. *Hydrogeologische Tabellen.* Berlin : VEB Projektierungs- und Konstruktionsbüro Kohle (Ministerium für Grundstoffindustrie), 1966.