

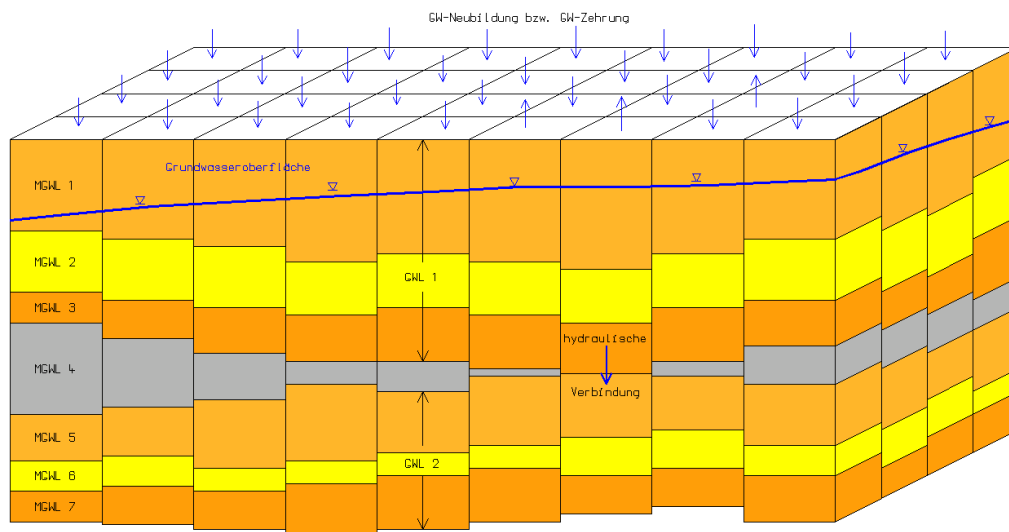
# PCGEOFIM-Anwenderdokumentation

## Teil Theorie

Physikalische und mathematische Grundlagen

Version 2023, 29.11.2023

**D. Sames, R. Blankenburg**



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Modellierung der Geofiltration</b>	<b>3</b>
1.1	Physikalische Grundlagen	3
1.1.1	Anfangs- und Randbedingungen	6
1.2	Die numerische Lösung der Strömungsgleichung	7
1.2.1	Hydraulische Verbindungen zwischen Nachbarn und Störungen	8
1.2.2	Regionale Netzverfeinerung	9
1.2.3	Lokale Netzverfeinerung	10
1.2.4	Spezielle Randbedingungen	10
1.3	Kopplung zwischen Grund- und Oberflächenwasser	12
1.3.1	Vertikalfilterbrunnen	12
1.3.2	Horizontalfilterbrunnen / HDD-Brunnen / Drainagen	12
1.3.3	Fließgewässer	16
1.3.4	Standgewässer	19
<b>2</b>	<b>Modellierung der Geomigration</b>	<b>22</b>
2.1	Physikalische Grundlagen	22
2.1.1	Mobile wässrige Phase	22
2.1.2	Stagnierende wässrige Phase	24
2.2	Allgemeine Transportgleichung	27
2.3	Stromlinien	29
2.4	Das Random-Walk-Verfahren	31
2.5	Die numerische Lösung der Migrationsgleichung	32
2.5.1	Anfangsbedingungen	34
2.5.2	Randbedingungen	34
<b>3</b>	<b>Parameteridentifikation</b>	<b>35</b>
3.1	Mathematische Grundlagen	36
3.2	Parameteridentifikation für die Migration	37
<b>4</b>	<b>Verifizierung</b>	<b>39</b>
4.1	Eindimensionale Grundwasserströmung (Verify1)	39
4.2	Eindimensionaler Transport (Verify2)	40
4.3	Zeitlich begrenzter Störfall in paralleler Grundwasserströmung (2D, $v_y = 0$ , Verify3)	41
4.4	Zeitlich begrenzter Störfall in paralleler Grundströmung (2D, $v_x = -v_y$ , Verify4)	43
<b>5</b>	<b>Literatur</b>	<b>45</b>

# 1 Modellierung der Geofiltration

## 1.1 Physikalische Grundlagen

Grundwasser ist das Wasser, welches Hohlräume im Gestein ausfüllt. Es unterliegt der Schwerkraft und den aus der Bewegung herrührenden Reibungskräften. Als Grundwasserleiter (Aquifer) bezeichnet man einen Gesteinskörper, der Hohlräume enthält und so eine Wasserbewegung und Wasserspeicherung erlaubt. Er kann auch geschichtet sein, d.h. verschieden durchlässige Materialien lagern übereinander.

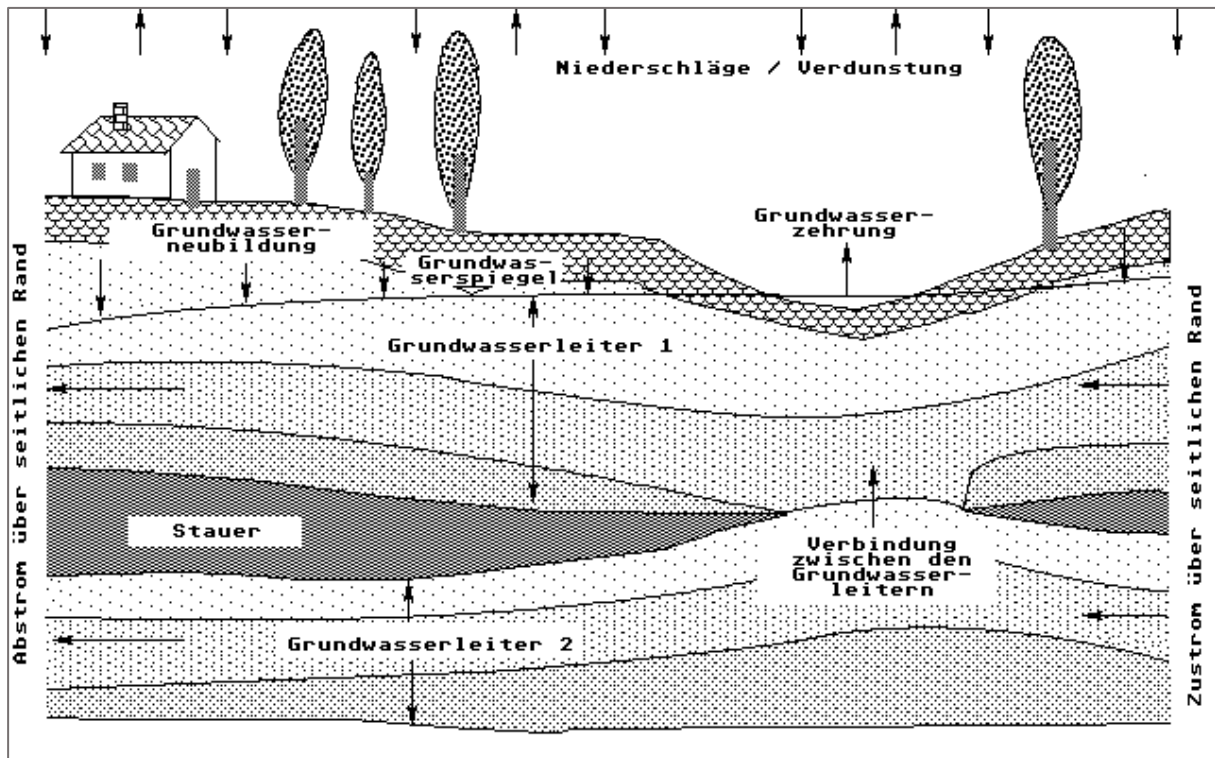


Abbildung 1: Schematische Darstellung eines Grundwasserstockwerkes mit zwei geschichteten Grundwasserleitern

Mehrere Grundwasserleiter können durch schlecht leitende Schichten voneinander getrennt sein. Man spricht dann von Grundwasserstockwerken. Die Eigenschaften der Grundwasserleiter werden mit Hilfe der Durchlässigkeit ( $k_f$ -Wert) und dem Speichervermögen ( $S_0$ -Wert) charakterisiert. Der Grundwasserstand wird in Pegeln beobachtet, die im Grundwasserleiter verfiltriert und mit einem Standrohr versehen sind. Es stellt sich im Standrohr ein Wasserspiegel ein, den man als Standrohrspiegelhöhe bezeichnet. Man unterscheidet den freien bzw. ungespannten und den gespannten Spiegel. Im ersten Fall ist die obere Berandung des Strömungsraumes durch den wassergefüllten Bereich gegeben. Die Standrohrspiegelhöhe beschreibt die Lage des wassergefüllten Bereichs im Aquifer. Im zweiten Falle begrenzt eine undurchlässige Schicht den Strömungsraum. Die Standrohrspiegelhöhe ist dann ein Maß für den im Grundwasser herrschenden Druck. In unserem Beispiel ist der Grundwasserleiter 1 bis auf das Zehrungsgebiet ungespannt und der Grundwasserleiter 2 bis auf den Bereich der Verbindung immer gespannt.

Ausgangspunkt für die Modellierung von Strömungsvorgängen in porösen Medien im unterirdischen Reservoir ist die bekannte Kontinuitätsgleichung

$$\partial \rho n_w / \partial t + \operatorname{div} \rho v_{\text{Dar}} = m_v \quad (1)$$

mit  $\rho$  - Dichte in  $\text{kg/m}^3$ ,  $n_w$  - volumetrischen Phasengehalt der wässrigen Phase,  $v_{\text{Dar}}$  - Darcy-Geschwindigkeit in  $\text{m/s}$  und  $m_v$  - Massenstromdichte in  $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ . Der französische Ingenieur Henry d'Arcy entdeckte 1856 für poröse Medien das nach ihm benannte Gesetz

$$v_{\text{Dar}} = -k/\mu (\operatorname{grad} p - \rho g) \quad (2)$$

mit  $k$  - Durchlässigkeit in  $\text{m}^2$ ,  $\mu$  - dynamische Viskosität des Fluids in  $\text{Pa s}$ ,  $p$  - Druck in  $\text{Pa}$  und  $g$  - Erdbeschleunigung ( $|g| = g = 9,80665 \text{ m/s}^2$ ).

In der Regel beschränkt man sich bei der Behandlung von Strömungsvorgängen in porösen Medien auf isotherme Bedingungen. In diesem Falle lautet die Zustandsgleichung der kompressiblen Flüssigkeit

$$\rho(p) = \rho_0 \exp[\chi_{\text{Fl}} (p - p_0)] \quad (3)$$

mit  $\chi_{\text{Fl}}$  - Flüssigkeitskompressibilität in  $\text{Pa}^{-1}$ ,  $p_0$  - Bezugsdruck in  $\text{Pa}$  und  $\rho_0$  - Dichte der Flüssigkeit beim Bezugsdruck  $p_0$ . Auch die Porosität ist druckabhängig:

$$n_e(p) = n_{w0} \exp[\chi_F (p - p_0)] \quad (4)$$

mit  $\chi_F$  - Porenraumkompressibilität in  $\text{Pa}^{-1}$  und  $n_{w0}$  - Porosität der wässrigen Phase beim Bezugsdruck. Durch Differentiation erhält man

$$\partial \rho n_e / \partial t = \rho_0 n_{w0} \partial / \partial t \exp[(\chi_{\text{Fl}} + \chi_F)(p - p_0)] = \rho n_w (\chi_{\text{Fl}} + \chi_F) \partial p / \partial t = \rho n_w \chi \partial p / \partial t. \quad (5)$$

Für Berechnungen der Strömung in porösen Medien wird normalerweise nicht der Druck  $p$  berechnet, sondern die Standrohrspiegelhöhe

$$h = p/(\rho g) + z \quad (6)$$

als Variable eingeführt, so dass

$$\rho n_w \chi \partial p / \partial t = \rho n_w \chi g \{ (h - z) \partial p / \partial t + \rho \partial h / \partial t \} = S(h - z) \partial p / \partial t + S_0 \rho \partial h / \partial t. \quad (7)$$

Weil  $\chi \rho g (h - z) \ll 1$  ist, gilt näherungsweise

$$\partial \rho n_w / \partial t \approx S_0 (h - z) \partial p / \partial t + S_0 \rho \partial h / \partial t, \quad (8)$$

$$S_0 = \rho_0 n_{w0} \chi g. \quad (9)$$

$S_0$  wird hier als spezifischer Speicherkoeffizient mit der Einheit  $[\text{m}^{-1}]$  bezeichnet (lt. Langguth und Hölting mit der Bezeichnung „ $S_s$ “, in Busch/Luckner/Tiemer „ $S_0$ “). Zu beachten ist, dass die Angabe in den Modelleingabedateien hingegen als dimensionsloser Speicherkoeffizient „ $S$ “ erfolgt. Im Programmsystem PCGEOFIM wird die sogenannte Boussinesq-Approximation benutzt. Sie besagt: Dichteabhängigkeiten werden nur im Auftriebsterm des Darcy-Gesetzes berücksichtigt. Diese Näherung kann angewendet werden, wenn die Dichteänderungen nicht zu groß sind. Bei Anwendung der Boussinesq-Approximation kann der Term  $S_0 (h - z) \partial p / \partial t$  in (8) vernachlässigt werden und  $\rho$  eliminiert werden, so dass die Kontinuitätsgleichung in der Form

$$S_0 \partial h / \partial t + \operatorname{div} v_{\text{Dar}} = V_V \quad (10)$$

geschrieben werden kann. Es wurde die Volumenstromrate  $V_V = m_V / \rho$  in  $\text{s}^{-1}$  definiert.

Das Darcy-Gesetz in Abhängigkeit von der Standrohrspiegelhöhe hat die Form

$$v_{\text{Dar}} = - \rho g k / \mu (\operatorname{grad} h + (h-z)/\rho \operatorname{grad} \rho). \quad (11)$$

Für die homogene Grundwasserströmung mit  $\rho_{G0} = 1000 \text{ kg/m}^3$  und  $\mu = 1,31 \text{ mPa s}$  bezeichnet man die Größe

$$k_f = \rho_{G0} g k / \mu \quad (12)$$

als  $k_f$ -Wert. Für die dichteabhängige Strömung ergibt sich folgende partielle Differentialgleichung:

$$S_0 \frac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div} k_f \left( \operatorname{grad} h + \frac{h-z}{\rho_0} \operatorname{grad} \rho \right) = V_V \quad (13)$$

mit  $S_0^* = S_0 \rho_0 / \rho_{G0}$  und  $k_f^* = k_f \rho_0 / \rho_{G0}$ . Im Falle der homogenen Grundwasserströmung mit  $\rho_{G0} = 1000 \text{ kg/m}^3$  erhält man die bekannte Grundwasserströmungsgleichung

$$S_0 \partial h / \partial t + \operatorname{div} k_f \operatorname{grad} h = V_V. \quad (14)$$

Die Gleichungen 13 und 14 beinhalten das physikalische Gesetz der Massenerhaltung: Die zeitliche Änderung des Grundwasservorrates wird hervorgerufen von der Grundwasserströmung (mathematisch beschrieben durch die Divergenz) und von Quellen ( $V_V > 0$ ) und Senken ( $V_V < 0$ ). Am Beispiel eines finiten Volumenelementes soll der physikalische Hintergrund der Kontinuitätsgleichung erläutert werden. In Abbildung 2 ist ein solches Element dargestellt. Es wurde ein Element mit freier Oberfläche ausgewählt. Die Vorratsänderung im finiten Volumenelement, die sich im Ansteigen oder Sinken des Grundwasserspiegels ausdrückt, wird hervorgerufen durch Flüsse zu den Nachbarn im gleichen Grundwasserleiter, durch einen Zu- oder Abfluss zu einem darunter liegenden Grundwasserleiter, durch die Grundwasserneubildung und durch innere Quellen bzw. Senken. Ein Beispiel für innere Quellen sind Infiltrationsbrunnen, Förderbrunnen sind innere Senken. Die Kontinuitätsgleichung enthält implizit die Standrohrspiegelhöhe  $h(x,y,z,t)$  als abhängige Variable, da die Dichte, das Speichervermögen und die Darcy-Geschwindigkeit als Funktion von  $h$  dargestellt werden können. Je nachdem ob der Grundwasserspiegel gespannt oder ungespannt ist, erhält man zwei verschiedene partielle Differentialgleichungen zur Berechnung der Standrohrspiegelhöhe. Sie sind Grundlage für alle Grundwassermodellierungen [2].

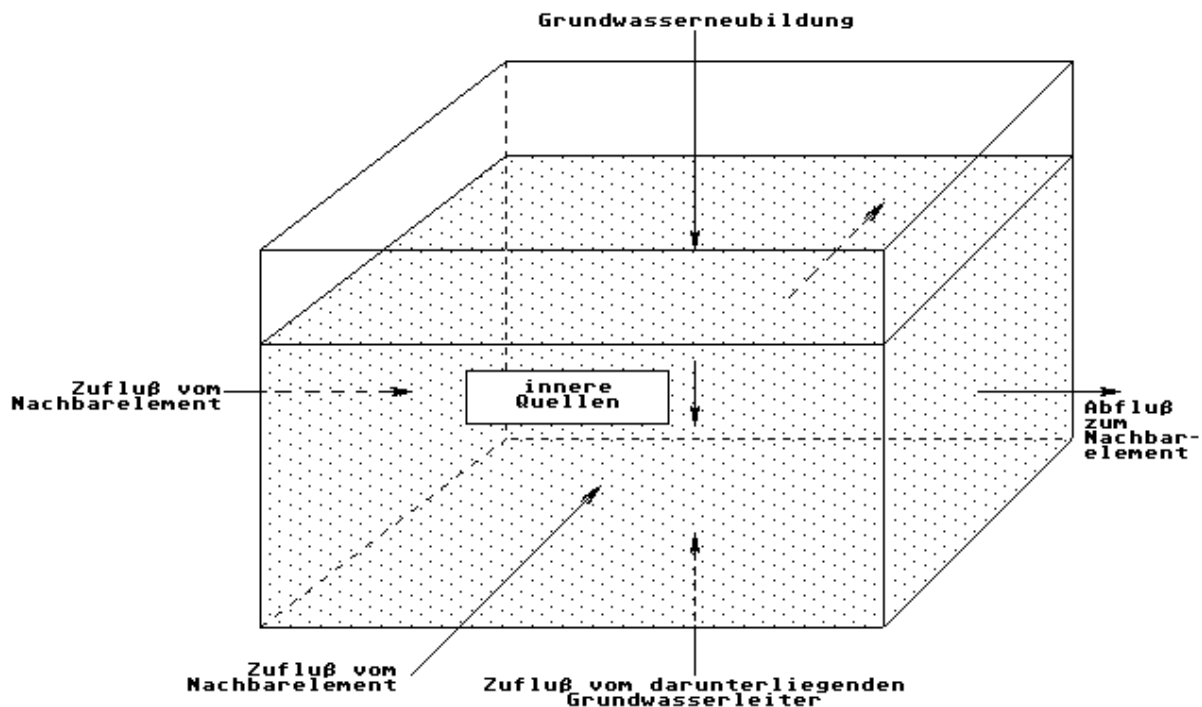


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Grundwasserbilanz in einem finiten Volumenelement

Aus der Mathematik ist bekannt, dass die Lösung einer partiellen Differentialgleichung nur möglich ist, wenn neben den Parametern der Differentialgleichung auch die Anfangs- und die Randbedingungen bekannt sind.

### 1.1.1 Anfangs- und Randbedingungen

Die Modellierung der Grundwasserströmung ist nur möglich, wenn im gesamten Untersuchungsgebiet die Standrohrspiegelhöhe als Funktion des Ortes zu Beginn der Berechnung bekannt ist. Die bei einer Stichtagsmessung ermittelten Spiegelhöhen werden im Allgemeinen als Linien gleicher Grundwasserstände (Isolinien, Isohypsen) dargestellt und gehen als Anfangsbedingung in die Berechnung ein.

Randbedingungen stellen die Kenntnis der Standrohrspiegelhöhe oder des jeweiligen Randzu- bzw. -abflusses oder eine Kombination von beiden an den Rändern des Aquifers dar. Ohne die Kenntnis dieser Randbedingungen als Funktion der Zeit ist die Lösung der Grundwasserströmungsgleichung nicht möglich. Die Randbedingungen beeinflussen die Lösung ganz wesentlich, so dass die Randbedingungen besonders sorgfältig zu formulieren sind. Man unterscheidet:

- Randbedingungen 1. Art (Vorgabe der Standrohrspiegelhöhe), beispielsweise Wasserspiegel von Oberflächengewässern, die vom Grundwasser unbeeinflusst bleiben, weit entfernte Ränder, die von der Grundwasserströmung im zu modellierenden Gebiet unwesentlich beeinflusst werden, künstlich gestützte Potentiale durch Infiltration oder Entnahme;

- Randbedingungen 2. Art (Vorgabe einer Zu- oder Abströmung), beispielsweise ein von außen eingespeister Grundwasserstrom und die undurchlässige Barriere;
- Randbedingungen 3. Art (gemischte Randbedingung), beispielsweise kolmatierte Oberflächengewässer.

Die Ränder werden im Allgemeinen so gewählt, dass sich einfache Randbedingungen formulieren lassen, diese bekannt sind oder gemessen werden können und von der Grundwasserströmung möglichst nicht verändert werden.

Im Programmsystem PCGEOfIM sind neben den hier aufgeführten Randbedingungen weitere spezielle Randbedingungen implementiert worden, um die zeitliche und örtliche Entwicklung des Grundwasserstandes in einem vom Bergbau beeinflussten Gebiet modellieren zu können.

## 1.2 Die numerische Lösung der Strömungsgleichung

Nur für sehr einfache Problemstellungen existieren analytische Lösungen der partiellen Differentialgleichung der Grundwasserströmung. Im Allgemeinen werden komplexe Problemstellungen numerisch gelöst. Die im Programmsystem PCGEOFIM verwendete numerische Lösung basiert auf der Finite-Volumen-Methode, einem sehr modernen numerischen Lösungsverfahren, das sich durch Bilanztreue und relativ flexible Gitterstruktur auszeichnet. Die Vorgehensweise soll an dem im Abschnitt 1.1 dargestellten Beispiel erläutert werden. Das gesamte zu untersuchende Gebiet wird in finite Volumen unterteilt. Die Größe der finiten Volumen wird so gewählt, dass die Geometrie, die hydrogeologischen Eigenschaften der Grundwasserleiter und die Randbedingungen genügend genau erfasst werden. In Abbildung 3 ist die Diskretisierung des Eingangs vorgestellten Beispiels zu sehen.

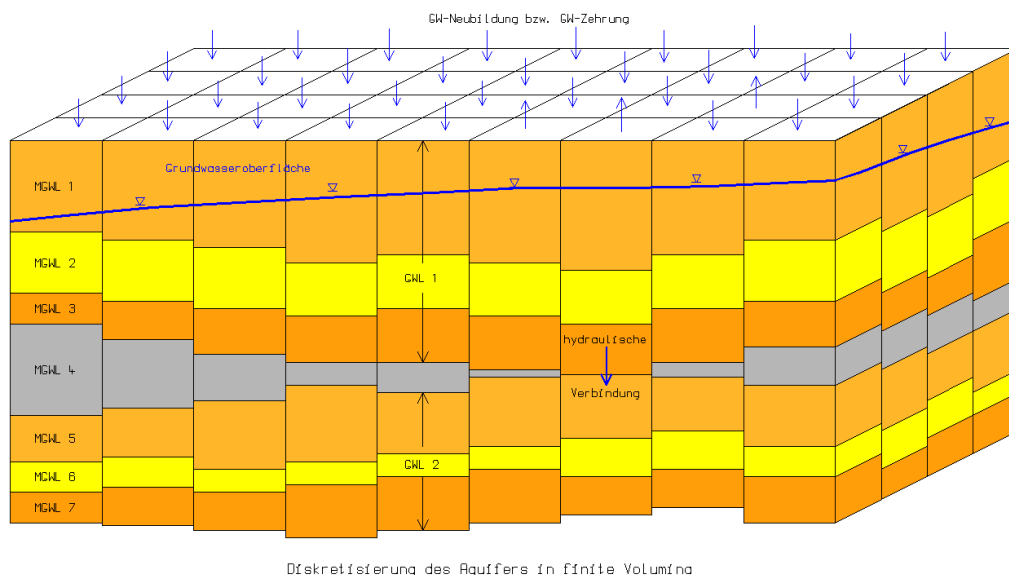


Abbildung 3: Diskretisierung des Grundwasserstockwerkes in finite Volumen

Für jedes Volumenelement sind der Schwerpunkt, die Abmessungen, die Durchlässigkeit, die entwässerbare Porosität, der spezifische Speicherkoeffizient, die Grundwasserneubildung, innere Quellen bzw. Senken, der Anfangswasserstand und eventuell wirkende Randbedingungen vorzugeben. Die zu untersuchenden Gebiete erstrecken sich im Allgemeinen über viele Quadratkilometer und verfügen über mehrere, teilweise gekoppelte Grundwasserleiter, so dass oft mehr als 100.000 finite Volumenelemente benötigt werden, um das Geschehen im Aquifer mit ausreichender Genauigkeit beschreiben zu können.

Für jedes finite Volumenelement  $ijk$  wird die Grundwasserbilanz aufgestellt. Die Abbildung 4 zeigt ein solches Element und die Verknüpfungen zu den Nachbarn in positiver und negativer  $x$ - und  $y$ -Richtung und zum darunter liegenden Grundwasserleiter. In jedem finiten Volumenelement wird der Grundwasserstand zur Zeit  $t$  durch die Variable  $h(i,j,k,t)$  repräsentiert. Durch die Verknüpfung zu den benachbarten, den darüber und den darunter liegenden finiten Volumenelementen entsteht so ein sehr großes Gleichungssystem zur Berechnung der Standrohrspiegelhöhe  $h(i,j,k,t+dt)$ , wenn der Zustand zur Zeit  $t$  und die Standrohrspiegelhöhen auf dem Rand bekannt sind. Ausgehend von dem Anfangszustand können so die Standrohrspiegelhöhen für jeden beliebigen Zeitpunkt danach berechnet werden.

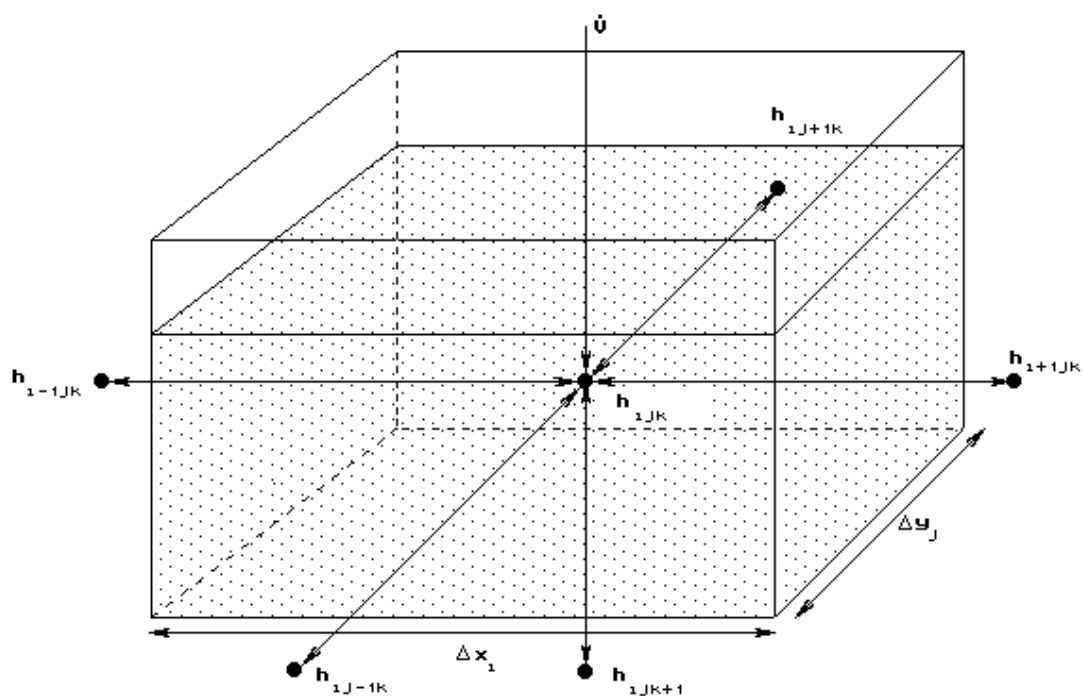


Abbildung 4: Das finite Volumenelement  $ijk$  mit den Verbindungen zu den Nachbarn

### 1.2.1 Hydraulische Verbindungen zwischen Nachbarn und Störungen

Bei der Aufstellung des Gleichungssystems werden die hydraulischen Verbindungen (Leitwerte) der Finiten Volumina zu den jeweiligen Nachbarn in der Außendiagonalen der Koeffizientenmatrix gespeichert. Dabei gehen folgende Größen in die Berechnung ein:

- Harmonischer  $k_f$ -Wert aus beiden benachbarten Volumina
- Hydraulische Kontaktfläche
- Faktor der Störung



Betrachtet man den in positiver x-Richtung liegenden Nachbarn, berechnet sich der Leitwert folgendermaßen:

### 1.2.2 Regionale Netzverfeinerung

Im Programmsystem PCGEOFIM ist eine regionale Netzverfeinerung realisiert worden, um die finiten Volumenelemente den praktischen Gegebenheiten besser anpassen zu können. In Abbildung 5 sind drei 2D-Lupen mit verschiedenen Unterteilungen definiert und wichtige Gründe für eine regionale Netzverfeinerung dargestellt:

- 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 Oberflächengewässer geprägt, so dass eine genaue Abbildung dieser Kontur unbedingt erforderlich ist.

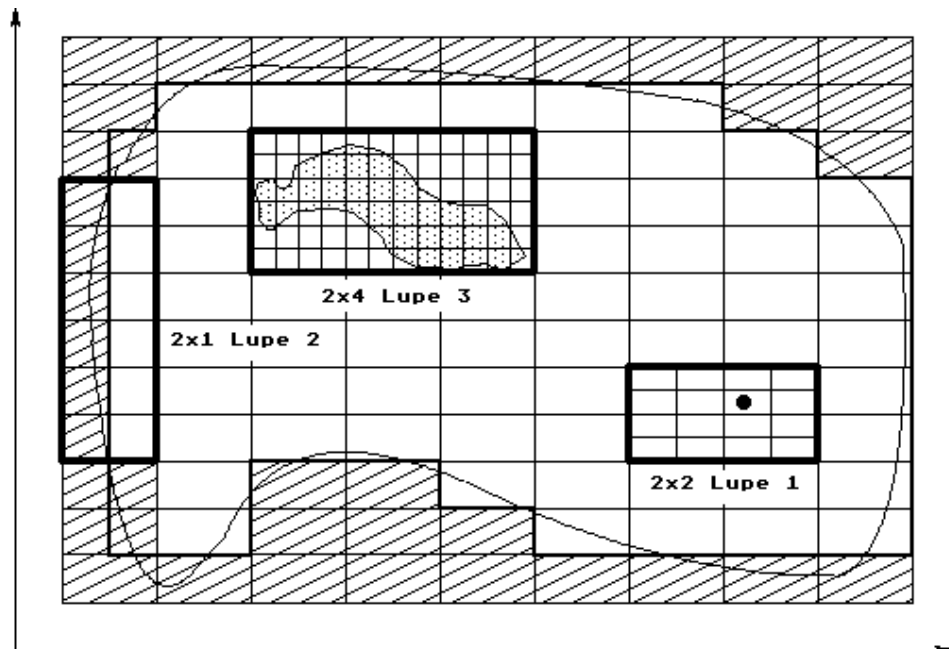


Abbildung 5: Regionale Netzverfeinerung (Lupe 1: zur genaueren Lokalisierung des Brunnenstandortes, Lupe 2: zur exakteren Modellierung der Randbedingungen, Lupe 3: zur besseren Berücksichtigung der Seekontur)

Insbesondere für den Stofftransport wurde im Programmsystem PCGEOFIM die 3D-Lupe realisiert (Abbildung 6). Zusätzlich zur horizontalen Teilung können die Modellgrundwasserleiter vertikal geteilt werden. Es ist so möglich, eingelagerte Schluffe, welche die Retardation des Modellgrundwasserleiters wesentlich erhöhen, besser nachzubilden.

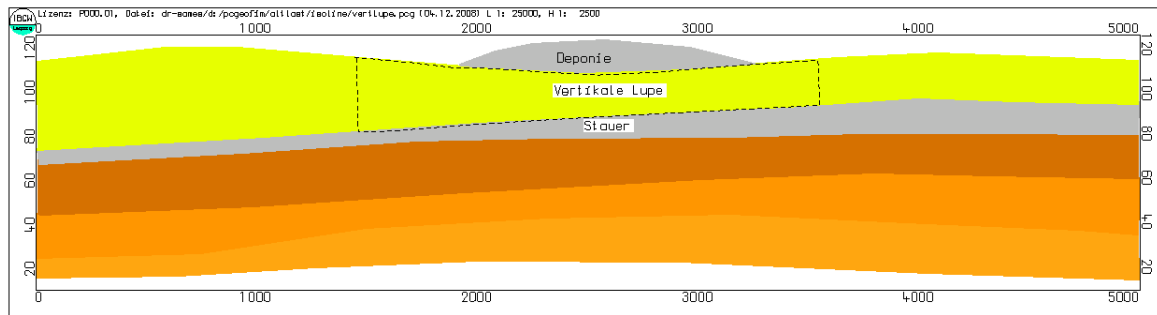


Abbildung 6: 3D-Lupe unter einer Deponie

### 1.2.3 Lokale Netzverfeinerung

Im Programmsystem PCGEOFIM ist außerdem eine lokale Netzverfeinerung realisiert worden. Ausgewählte finite Volumenelemente können horizontal in 9, 25, 49 oder 81 finite Volumina unterteilt werden, um z. B. die Brunnenabsenkungen genauer berechnen zu können.

### 1.2.4 Spezielle Randbedingungen

Im Programmsystem PCGEOFIM wurden eine ganze Reihe spezieller Randbedingungen implementiert, um die großräumige Modellierung der Grundwasserströmung in vom Bergbau beeinflussten Gebieten zu ermöglichen. Alle Randbedingungen können sowohl zeitkonstant als auch zeitabhängig vorgegeben werden. Zusätzlich möglich ist die Vorgabe von Beschränkungen. Am Beispiel der Vorgabe einer Randbedingung 1. Art soll die Realisierung von Beschränkungen erläutert werden.

Durch Infiltration soll der Grundwasserspiegel auf einem bestimmten Niveau gehalten werden. Die dazu benötigte Wassermenge wird bei der Simulation berechnet. Aus technologischen Gründen ist aber die Einspeiserate beschränkt. Wird diese maximal mögliche Einspeisemenge erreicht, schaltet PCGEOFIM 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 7 zeigt.

Brunnen und Gewässer können sowohl H- als auch Q-gesteuert werden. Das bedeutet: Bei Vorgabe der Standrohrspiegelhöhe im Brunnen bzw. des Gewässerspiegels wird die Ein- bzw. Auspeisemenge berechnet, die notwendig ist, um den Wasserstand zu realisieren. Im anderen Falle wird der Wasserstand vorgegeben und die Infiltrations- bzw. Förderrate des Brunnens bzw. die oberirdischen Zu- bzw. Abflüsse der Gewässer berechnet. Auch in diesem Falle können Beschränkungen vorgegeben werden und analog zu den Randbedingungen erfolgt bei Verletzung der Beschränkungen ein Umschalten von der H- in die Q-Steuerung und umgekehrt.

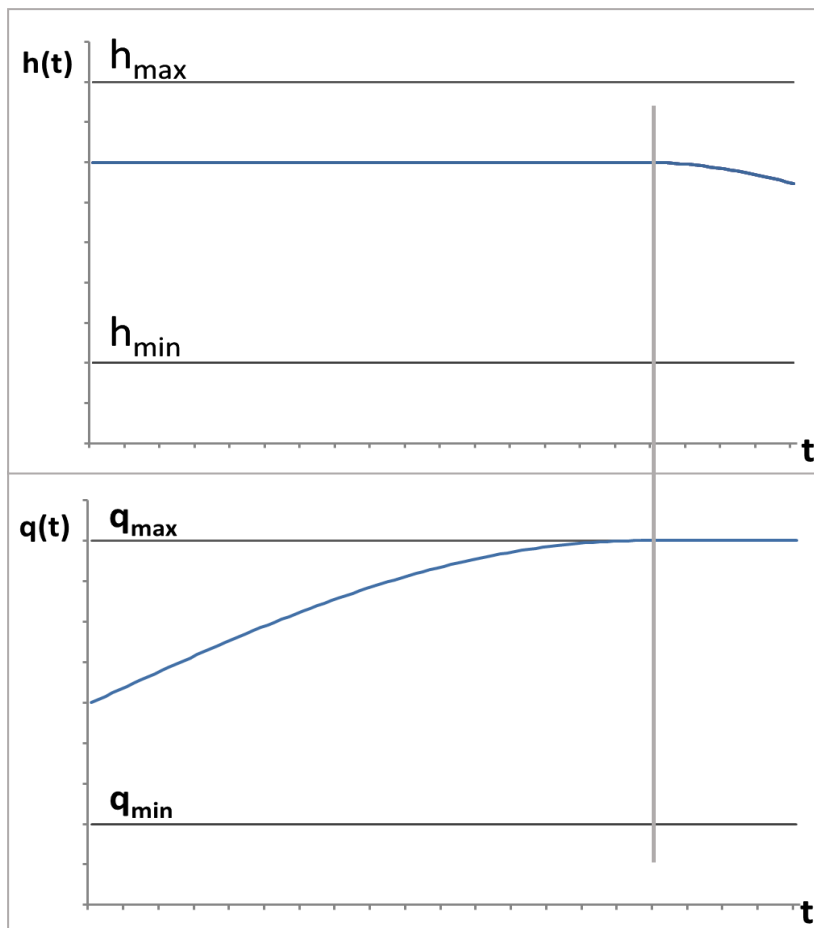


Abbildung 7: Übergang von einer Randbedingung 1. Art zu einer Randbedingung 2. Art, wenn zum Zeitpunkt  $t$  der berechnete Randwert  $q(t)$  die obere Grenze  $q_{\max}$  erreicht

Die Spezialität „Gekoppelte Randbedingungen 3. Art“, mit denen Brunnen, Restlöcher und Fließgewässer sehr effektiv in die Modellierung mit einbezogen werden können, werden im nächsten Abschnitt ausführlich vorgestellt.

**Zeitabhängige Parameter:** Im Programmsystem PCGEOFIM wurden auch zeitabhängige Parameter realisiert, um den Tagebaufortschritt, das Verkippen der Abraummassen und sonstige Veränderungen der Landschaft simulieren zu können. Es können sowohl die geohydraulischen Parameter als auch die Geometrie zeitlich verändert werden.

### 1.3 Kopplung zwischen Grund- und Oberflächenwasser

Vertikalfilterbrunnen, HDD-Brunnen (Horizontalfilterbrunnen), Fließgewässer und Standgewässer werden im Programmsystem PCGEOFIM mit Hilfe von gekoppelten Randbedingungen 3. Art modelliert:

$$Q_{R\ i,j} = L_{r\ i,j} (h_{R\ i,j} - h_{ij}). \quad (15)$$

Dabei bezeichnen  $Q_{R\ i,j}$  den Volumenstrom von der gekoppelten Randbedingung  $i$ , Element  $j$  zum finiten Volumenelement  $ij$  im Grundwasser,  $h_{R\ i,j}$  und  $h_{ij}$  den Wasserstand im Randelement und im Grundwasser. Die Index  $ij$  weist auf ein spezielles finites Volumen im Grundwasser hin und wird bei der Eingabe durch die Lupenzuordnung und den Index  $i, j, k$  spezifiziert.

#### 1.3.1 Vertikalfilterbrunnen

Die analytische Lösung für eine stationäre Anströmung des Vertikalfilterbrunnens hat die Form [1]:

$$Q_{B\ i,k} = L_{B\ i,k} (h_{B\ i} - h_{ik}) = [2\pi k_{f\ i,k} h_{eff\ i,k} / \ln(r_{f\ i} / r_{B\ i,k})] (h_{B\ i} - h_{ik}) \quad (16)$$

mit  $k_{f\ i,k}$  -  $k_f$ -Wert im brunnennahen Raum,  $h_{eff\ i,k}$  - effektive Überströmhöhe im Brunnen,  $r_{f\ i}$  - Einflussradius des Brunnens,  $r_{B\ i,k}$  - Brunnenradius im Grundwasserleiter  $k$ ,  $h_{B\ i}$  - Brunnenwasserspiegel,  $h_{ik}$  - Grundwasserstand im zugehörigen finiten Volumen. Die Summe dieser Volumenströme ergibt die Förderrate bzw. Infiltrationsmenge je nach Vorzeichen von  $Q_{B\ i}$ :

$$\sum_k L_{B\ i,k} (h_{B\ i} - h_{ik}) = Q_{B\ i}(t). \quad (17)$$

Die Leitwerte werden explizit, d.h. mit den Grundwasserständen vom vorangegangenen Teilschritt berechnet, die Beziehung (17) selbst jedoch mit allen Gleichungen des finite Volumen-Schemas gelöst. Bei Vertikalfilterbrunnen ist dies möglich, da der Vertikalfilterbrunnen in allen Grundwasserleitern  $k$  den gleichen Wasserstand  $h_{B\ i}$  hat.

#### 1.3.2 Horizontalfilterbrunnen / HDD-Brunnen / Drainagen

Die analytische Lösung für eine stationäre Anströmung des HDD-Brunnens hat die Form [1]:

$$Q_{B\ ijk} = L_{B\ ijk} (h_{B\ ijk} - h_{ijk}) = [2\pi k_{f\ ijk} l_{ijk} / \ln(\Delta z_{ijk} / d_{B\ ijk})] (h_{B\ ijk} - h_{ijk}) \quad (18)$$

mit  $k_{f\ ijk}$  -  $k_f$ -Wert im brunnennahen Raum,  $l_{ijk}$  - Länge des Brunnenabschnittes im finiten Volumen  $ijk$ ,  $\Delta z_{ijk}$  Mächtigkeit dieses Elementes und  $d_{B\ ijk}$  - Durchmesser. Anders als bei den Vertikalfilterbrunnen hat jeder Brunnenabschnitt einen unterschiedlichen Wasserstand  $h_{B\ ijk}$ , die sich vom Ein- bzw. Auslaufwasserstand des HDD-Brunnens unterscheiden.

Im Brunnen bildet sich eine Gerinneströmung oder eine Druckrohrströmung aus, je nachdem wie viel Wasser vom HDD-Brunnen „eingesammelt“ wird bzw. wie hoch der Wasserstand am Auslauf ist.

Die Gerinneströmung kann zum einen mit der Manning-Strickler-Fließformel

$$Q_B = M F R_{hy}^{2/3} I^{1/2}, \quad R_{hy} = F / U, \quad M = 26 / k^{1/6} \quad (19)$$

und zum anderen mit der universellen Fließformel nach Colebrook/White

$$Q_B = \pi R_{hy}^2 \left\{ -4 \lg \left[ \frac{2,51 \sqrt{k}}{(8 R_{hy} \sqrt{2 g R_{hy} I})} + \frac{k}{(4 R_{hy} 3,71)} \right] \sqrt{2 g R_{hy} I} \right\} \quad (20)$$

berechnet werden. Dabei bezeichnen  $M$  – den Geschwindigkeitsbeiwert nach Strickler in  $m^{1/3}/s$ ,  $F$  – die durchflossene Fläche,  $U$  – den benetzten Umfang,  $R_{hy}$  – den hydraulischen Radius,  $I$  – das Sohlgefälle und  $k$  – die Rohrrauigkeit.

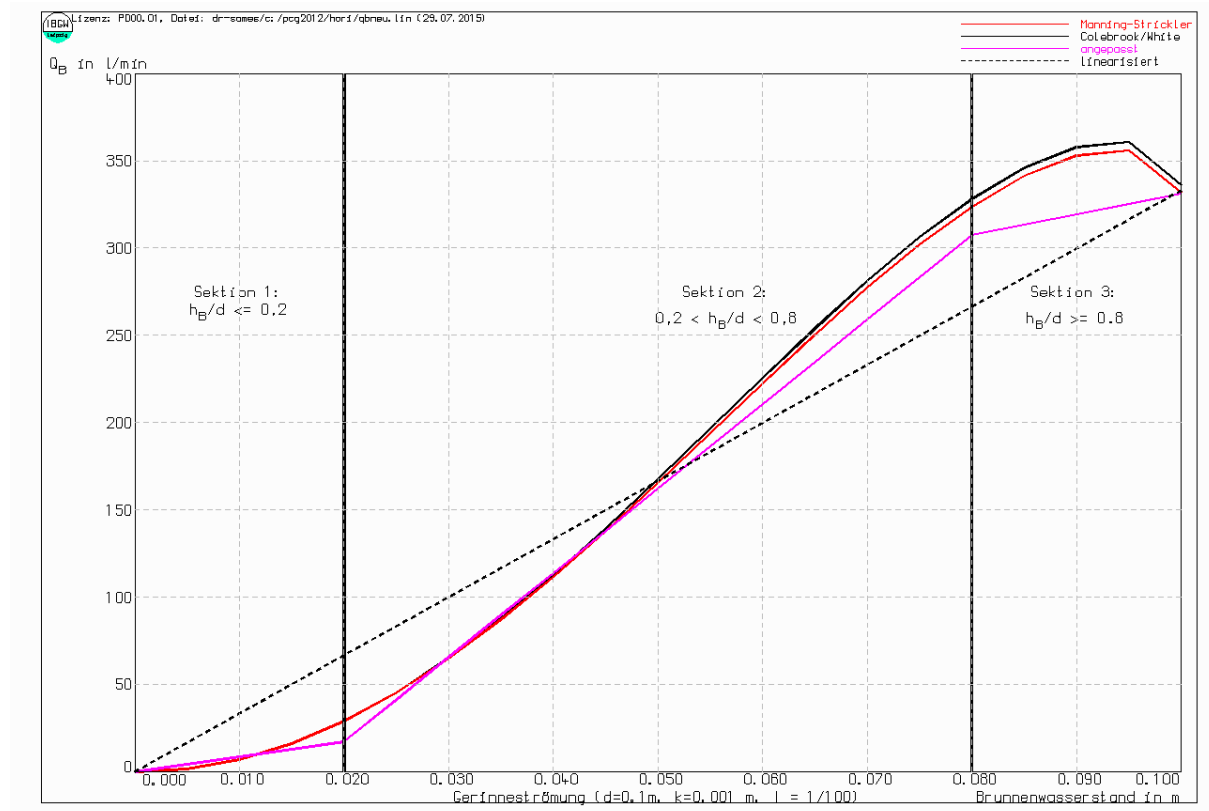


Abbildung 8: Gerinneströmung

Abbildung 8 zeigt für ein spezielles Beispiel eine grafische Darstellung beider Formeln. Es fällt auf, dass bei Annäherung des Wasserstandes an den Rohrdurchmesser der Volumenstrom wieder abnimmt. Dies liegt an der Zunahme der Wandreibung ab  $h_B / d > 0,83$ . Eine numerische Berechnung dieser nicht eindeutigen Lösung führt zu Schwierigkeiten. In [8] wurde deshalb vorgeschlagen, für die Berechnung der Gerinneströmung folgende Formeln zu verwenden:

Tabelle 1: Die angepassten Formeln zur Berechnung der Gerinneströmung

	$Q_B \text{ voll } (0,26 h_B / d)$	für $h_B / d \leq 0,2$
$Q_B =$	$Q_B \text{ voll } (1,46 h_B / d - 0,24)$	für $0,2 < h_B / d < 0,8$
	$Q_B \text{ voll } (0,36 h_B / d + 0,64)$	für $h_B / d \geq 0,8$

bzw.

	$d (3,846150 Q_B / Q_B \text{ voll})$	für $Q_B / Q_B \text{ voll} \leq 0,052$
$h_B =$	$d (0,684932 Q_B / Q_B \text{ voll} + 0,164384)$	für $0,052 < Q_B / Q_B \text{ voll} < 0,928$
	$d (2,777778 Q_B / Q_B \text{ voll} - 1,777778)$	für $Q_B / Q_B \text{ voll} \geq 0,928$

mit

$$Q_{B \text{ voll}} = M\pi r^2 R_{hy}^{2/3} I^{1/2}. \quad (21)$$

Neben den verschiedenen Formeln sind die drei Bereiche (siehe Tabelle 1) zusätzlich eingetragen. Der Wasserstand im HDD-Brunnen steigt nun stetig, so dass die Gerinneströmung mit Hilfe der angepassten Formeln ohne mathematische Schwierigkeiten berechnet werden kann.

Die Druckrohrströmung wird mit Hilfe der universellen Fließformel nach Colebrook/White berechnet:

$$Q_B = \pi R_{hy}^2 \{-2,0 \lg [2,51 \sqrt{v / (d \sqrt{2 g d I})} + k / (3,71 d)] \sqrt{2 g d I}\} \quad (22)$$

Dabei ist zu beachten, dass die Volumenströme für die Gerinne- und für die Druckrohrströmung bei vollem Rohr nicht übereinstimmen. Aus diesem Grund wird für den Bereich  $Q_{B \text{ voll}}$  bis  $1,1 Q_{B \text{ voll}}$  eine Ausgleichsrechnung ausgeführt: Wenn  $Q$  kleiner als  $1,1 Q_{B \text{ voll}}$  ist, wird zwischen  $h_B = d$  und  $h_B(1,1 Q_{B \text{ voll}})$  linear interpoliert:

$$h_B(Q) = d + 10 \cdot (h_B(1,1 Q_{B \text{ voll}}) - d) \cdot (Q / Q_{B \text{ voll}} - 1). \quad (23)$$

In der Abbildung 9 ist die Abhängigkeit des Druckverlustes von dem Volumenstrom im HDD-Brunnen dargestellt. 330 l/min können bei den angegebenen Brunnenparametern im Gerinne abfließen. Danach setzt die Druckrohrströmung ein.

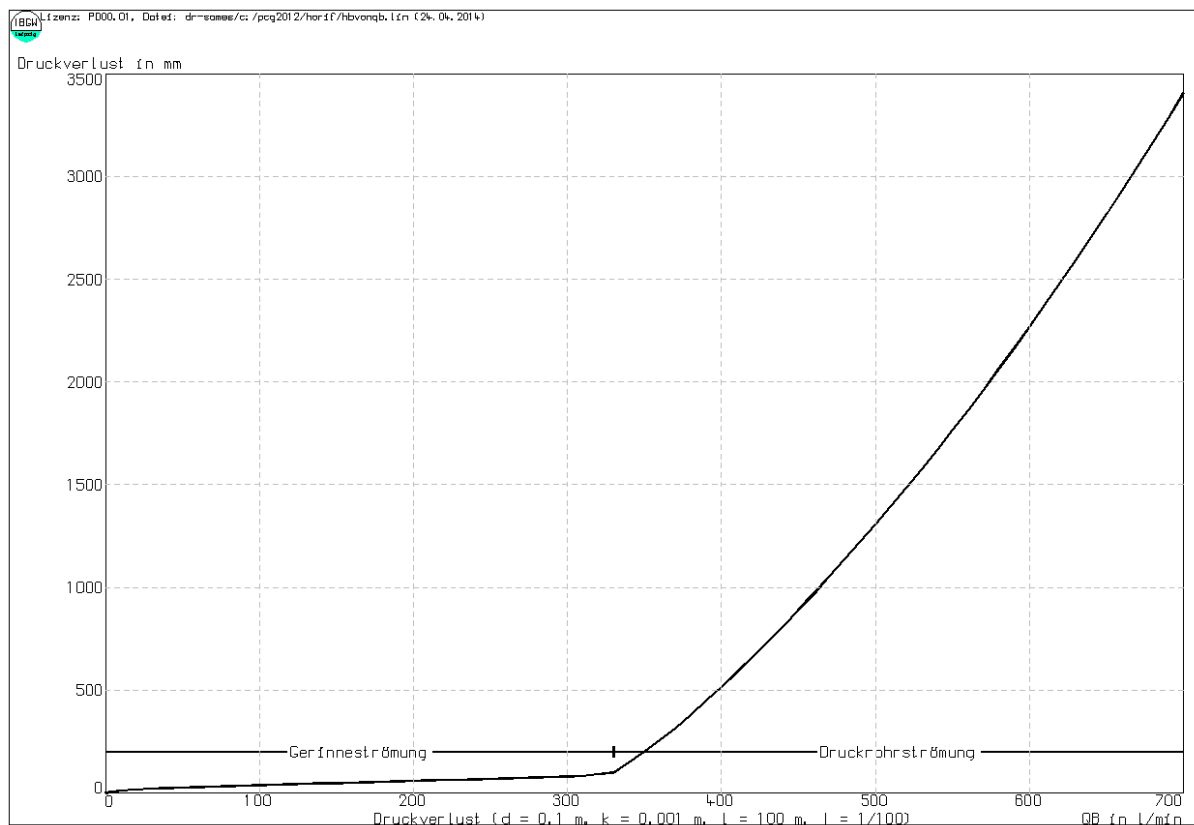


Abbildung 9: Übergang von der Gerinne- zur Druckrohrströmung

Die oben angegebenen Formeln gelten für jeden Abschnitt des HDD-Brunnens. Es müssen daher alle Volumenströme  $Q_{B \text{ ijk}}$  und alle Brunnenwasserstände  $h_{B \text{ ijk}}$  ermittelt werden.

Abschnitt:	1	2	3	4	5	nabs
Horibrunnen:	-----	-----	-----	-----	-----	...  -----
h <sub>B</sub> , Q <sub>B</sub> :	1	2	3	4	5	6 nabs nabs+1

Abbildung 10: Nummerierung der Elemente des HDD-Brunnens (nabs – Anzahl Brunnenabschnitte)

In nullter Näherung werden

$$Q_{B\ i} = Q_{B\ voll}, i = 1, nabs \text{ und } q_{B\ nabs+1} = 0 \quad (24)$$

$$h_{B\ i} = d_i, \quad i = 1, nabs \text{ und } h_{B\ nabs+1} = 0 \quad (25)$$

gesetzt. Das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} Q_{B\ nabs} &= L_{B\ nabs} (h_{B\ m\ nabs} - h_{nabs}) \\ Q_{B\ nabs-1} &= Q_{B\ nabs} + L_{B\ nabs-1} (h_{B\ m\ nabs-1} - h_{nabs-1}) \\ Q_{B\ nabs-2} &= Q_{B\ nabs-1} + L_{B\ nabs-2} (h_{B\ m\ nabs-2} - h_{nabs-2}) \\ &\dots \\ Q_{B\ 1} &= Q_{B\ 2} + L_{B\ 1} (h_{B\ m\ 1} - h_1) \\ L_{B\ i} &= 2\pi k_{f\ i} l_i / \ln(\Delta z_i / d_i) \\ h_{B\ m\ i} &= (h_{B\ i} + h_{B\ i+1})/2 \end{aligned} \quad (26)$$

muss iterativ gelöst werden. Dabei bezeichnen  $k_{f\ i}$  -  $k_f$ -Wert im brunnennahen Raum,  $l_i$  - Länge des Brunnenabschnittes,  $\Delta z_i$  - Mächtigkeit und  $d_i$  – Durchmesser.

Alle Brunnenwasserstände sind näherungsweise bekannt, so dass mit Hilfe obiger Formeln auch alle Volumenströme berechnet werden können. Nun folgt die Ermittlung der Brunnenwasserstände  $h_{B\ i}(Q_{B\ i})$ . Im Falle der Gerinneströmung ( $h_{B\ m\ i} \leq d_i$ ) können die Formeln aus Tabelle 1 verwendet werden. Ansonsten ergibt sich der Brunnenwasserstand im  $i$ -ten Element aus der universellen Fließformel nach Colebrook/White.

Im Fall der Vorgabe des Wasserstandes am HDD-Brunnen-Auslauf ist  $h_{B\ 1}$  vorgegeben. Alle weiteren Brunnenwasserstände werden berechnet. Die Iteration wird fortgesetzt bis die Änderung der Brunnenwasserstände kleiner als  $\min(d_i)/1000$  ist.

Im Fall der Vorgabe des Volumenstromes am HDD-Brunnen-Auslauf kommt eine weitere Iteration hinzu. Zuerst wird ein Intervall  $Q_{B\ u} < Q_B < Q_{B\ o}$  bestimmt. Die zugehörigen Wasserstände sind  $h_{B\ u}$  und  $h_{B\ o}$ . Nun wird nach obigem Verfahren für den HDD-Brunnen-Wasserstand  $h_B = (h_{B\ u} + h_{B\ o}) / 2$  die Förderrate bestimmt und die untere bzw. die obere Grenze korrigiert. Wenn das neu berechnete  $Q_B$  mit dem zuvor berechneten genügend genau übereinstimmt, kann die Iteration abgebrochen werden.

Dieser Algorithmus wird sowohl bei der Vorbereitung (Ermittlung der Leitwerte zu Beginn eines Teilzeitschrittes) als auch bei der Auswertung der Lösung des Gleichungssystems angewendet. Im Gleichungssystem wird für den HDD-Brunnen die Diagonale Eins und die rechte Seite gleich  $h_{B\ 1}$  gesetzt. Für die gekoppelten Elemente gilt (D – Diagonale, R – rechte Seite Gleichungssystem):

$$D_{ijk} = D_{ijk} + L_{B\ ijk}, R_{ijk} = R_{ijk} + L_{B\ ijk} h_{B\ ijk}, \quad (27)$$

so dass der Volumenstrom

$$Q_{B\ ijk} = L_{B\ ijk} (h_{B\ ijk} - h_{ijk}) \quad (28)$$

ein- bzw. ausgespeist wird.

### 1.3.3 Fließgewässer

Zeitabhängige Vorgänge in Fließgewässern laufen um Größenordnungen schneller ab als im Grundwasser. Das Ziel der Kopplung zwischen Oberflächenwasser und Grundwasser ist nicht die Aufstellung eines Oberflächenwassermodells, sondern die Nachbildung des Einflusses der Oberflächengewässer auf das Grundwasser. Aus diesem Grunde ist es legitim, die Oberflächengewässer quasistationär zu behandeln, d.h. das Speichervermögen der Fließgewässer braucht in den Bilanzgleichungen der Fließgewässer nicht berücksichtigt zu werden. Als Abflussgleichung in den Vorflutern kann die Manning-Formel [5]:

$$Q_F = M F R^{2/3} I^{1/2} \quad (29)$$

benutzt werden. Dabei bezeichnen  $Q_F$  - Gewässerabfluss in  $m^3/s$ ,  $M$  - Rauigkeitsbeiwert für das Fließgewässer in  $m^{1/3}/s$ ,  $F$  - durchflossene Querschnittsfläche in  $m^2$ ,  $R = F/U$  - hydraulischer Radius in  $m$ ,  $U$  - Benetzungslinie in  $m$  und  $I$  - Sohlgefälle. Die Gleichung (29) stellt einen Zusammenhang zwischen dem Abfluss  $Q_F$  und dem Wasserstand  $w_a$  im Fluss her, da sowohl  $F$  als auch  $R$  vom Wasserstand abhängen. Grafisch dargestellt wird die Funktion (29) in der Form  $w_a(Q_F)$  als Abflusskurve (Schlüsselkurve). Die Abbildung 11 zeigt ein Trapezgerinne. Wenn man mit  $s_b$  die Sohlbreite und mit  $b_n$  die Böschungsneigung bezeichnet, gilt.

$$F = (s_b + b_n w_a) w_a, \quad U = s_b + 2 (1 + b_n^2)^{1/2} w_a. \quad (30)$$

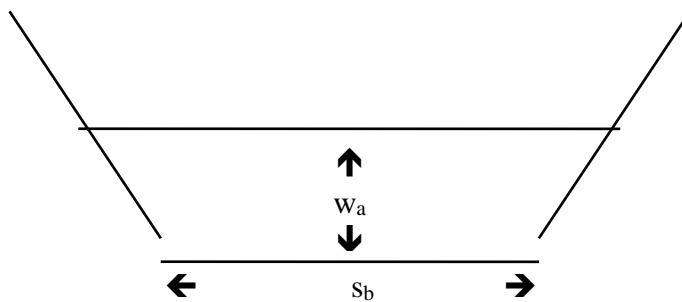


Abbildung 11: Schematische Darstellung eines Trapezgerinnes

Für einen Graben von der Breite 0,5 m, einer Böschungsneigung von 1:2 und einem Sohlgefälle von 1:1000 ergibt sich bei einem Rauigkeitsbeiwert von  $20 m^{1/3}/s$  die in Abbildung 12 dargestellte Abflusskurve.



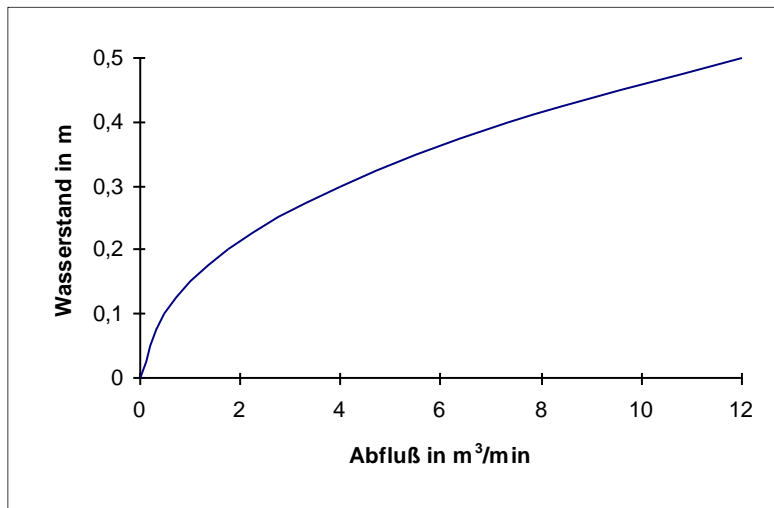


Abbildung 12: Abflusskurve für einen Graben (Parameter s. Text)

Noch besser ist es, wenn die Abflusskurve gemessen wurde, da die Manning-Formel nur eine Näherung darstellt. Im Teil GeofimDB der Dokumentation ist die Abflusskurve für den Pegel Thekla grafisch dargestellt.

Wenn der Abfluss  $Q_{Fij}$  für den Fluss  $i$ , Abschnitt  $j$  bekannt ist, kann mit Hilfe der Abflusskurve der Randwert aus der Summe von Sohle und Wassertiefe berechnet werden:

$$h_{Rij} = S_{ij} + w_{a ij} \quad (31)$$

Der Leitwert  $L_{Rij}$ , der den Flussabschnitt mit dem Grundwasser verbindet, hängt sowohl vom Fluss- als auch vom Grundwasserstand ab. Es sind nun prinzipiell folgende Fälle zu unterscheiden:

**Infiltration** ( $h_{Rij} > h_{ij}$ ): Die vom Fluss in das Grundwasser eingetragene Wassermenge ist abhängig vom Leitwert der Kolmationsschicht und der Durchlässigkeit des Untergrundes:

$$\begin{aligned} Q_{Rij} &= L_{Rij} (h_{Rij} - h_{ij}), \\ L_{Rij} &= L_{Fij} L_{u ij} / (L_{Fij} + L_{u ij}), \\ L_{Fij} &= k_{f ij} A_{ij} / d_{ij}, \\ DF_{ij} &= (\Delta x_i \Delta y_j - A_{ij}) / \ln(\Delta x_i \Delta y_j / A_{ij}) \\ L_{u ij} &= k_{u ij} DF_{ij} k_{rw}(s_{ij} - h_{ij}) / (s_{ij} - z_{ij}), \end{aligned} \quad (32)$$

mit  $k_{f ij}$  und  $d_{ij}$  -  $k_f$ -Wert und Dicke der kolmatierten Schicht,  $k_{rw}$  - Funktion, welche die Verminderung des  $k_f$ -Wertes infolge fehlender Wassersättigung beschreibt,  $A_{ij}$  - Kontaktfläche zwischen dem Fluss und dem Grundwasser,  $\Delta x_i$  und  $\Delta y_j$  - Abmessung des finiten Volumenelementes,  $k_{u ij}$  - vertikale Durchlässigkeit des Untergrundes,  $s_{ij}$  - Sohle Fluss,  $z_{ij}$  - Unterkante des finiten Volumenelementes.

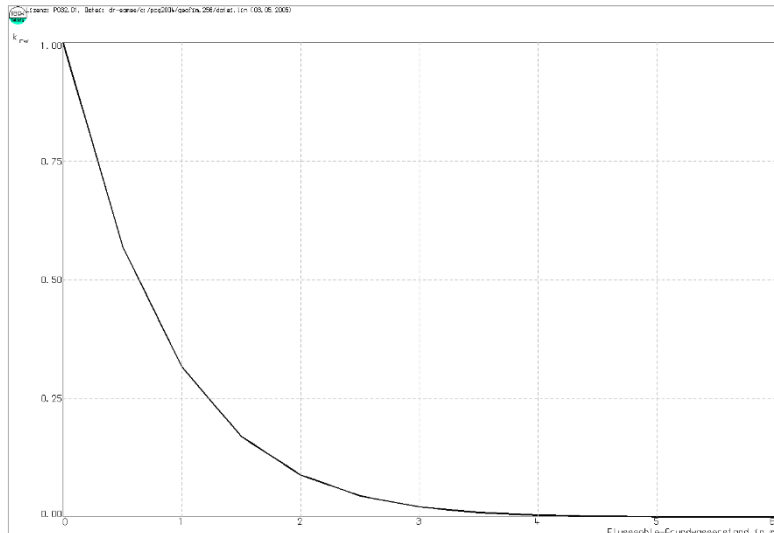
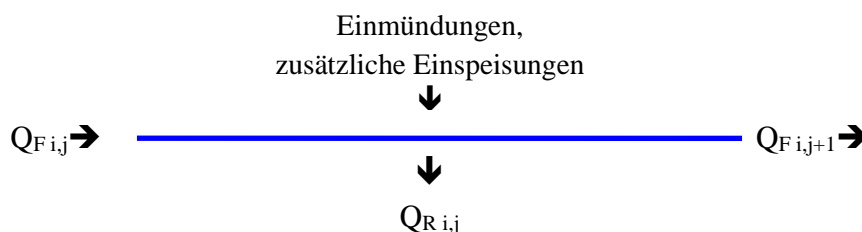


Abbildung 13: Verringerung der Infiltration bei abgerissener Strömung

**Exfiltration** ( $h_{R\ i,j} < h_{ij}$ ): Der Wasserstand im Fluss liegt unter dem Grundwasserstand. Das harmonische Mittel vom Leitwert der Kolmationszone multipliziert mit dem Exfiltrationsfaktor  $f_{\text{exf}\ i,j}$  (Verringerung der Kolmation bei Exfiltration) und dem Leitwert zwischen dem finiten Volumen und dem Fluss ergeben den Randleitwert:

$$\begin{aligned} Q_{R\ i,j} &= L_{R\ i,j} (h_{R\ i,j} - h_{ij}) \\ L_{R\ i,j} &= L_{F\ i,j} L_{u\ i,j} / (L_{F\ i,j} + L_{u\ i,j}), \\ L_{F\ i,j} &= k_{f\ i,j} f_{\text{exf}\ i,j} A_{i,j} / d_{i,j}, \\ DF_{i,j} &= (\Delta x_i \Delta y_j - A_{i,j}) / \ln(\Delta x_i \Delta y_j / A_{i,j}) \\ L_{u\ i,j} &= k_{u\ i,j} DF_{i,j} / (s_{i,j} - z_{i,j}), \end{aligned} \quad (33)$$

Nun kann die Bilanz für einen Flussabschnitt aufgestellt werden. Der Abfluss  $Q_{R\ i,j}$  bestimmt den Wasserstand im Flussabschnitt  $i,j$  und somit die Infiltration oder Exfiltration zum Grundwasser. Zu berücksichtigen sind auch zusätzliche Einspeisungen (Entnahmen) und Einmündungen anderer Fließ- und Standgewässer. Alle Volumenströme werden bilanziert und ergeben den Abfluss in den nachfolgenden Flussabschnitt  $i,j+1$ .

Abbildung 14: Bilanzierung für den Flussabschnitt  $i,j$ 

Im Programmsystem PCGEOFIM sind die Flussabschnitte von der Quelle zur Mündung geordnet vorzugeben. Wenn mehrere Flüsse im Einzugsbereich vorhanden sind, müssen sie hierarchisch geordnet vorgegeben werden, d.h. ein später eingegebener Fluss darf nur in einen schon eingegebenen Fluss münden. Für ein so geordnetes Strangnetz ist die Implementierung der

Kirchhoffschen Regel, Summe aller Zu- und Abflüsse an den Knotenpunkten, ohne großen Suchaufwand möglich.

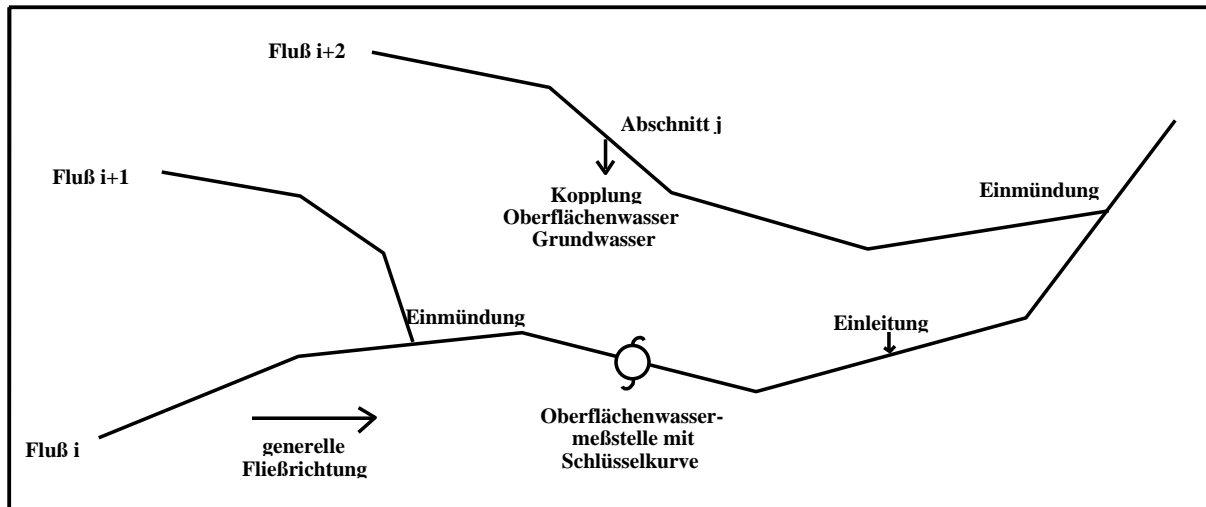


Abbildung 15: Kopplung der Flüsse zu einem Strangnetz (Die im Abschnitt j dargestellte Kopplung zwischen Oberflächengewässer und Grundwasser ist natürlich auch für alle anderen Flussabschnitte gegeben und wurde der Übersichtlichkeit halber nur einmal dargestellt)

Während gekoppelte Randbedingungen 3. Art für Vertikalfilterbrunnen und auch Standgewässer durch jeweils eine zusätzliche Gleichung zusammen mit den finite Volumenbilanzen berechnet werden können, ist ein solches Vorgehen für Fließgewässer nicht möglich. Trotzdem erfolgt die Berechnung der Fließgewässer im Programmsystem PCGEOFIM implizit. Beide Gleichungssysteme werden zwar getrennt gelöst, aber durch die Iteration (s. Abbildung 16) wird die Lösung des gesamten Gleichungssystems exakt bestimmt.

Oberflächenwasser		Grundwasser
Berechnung der Fließmengen, Bestimmung der Fluss-spiegelhöhen aus den Ab-flusskurven, Korrektur der Randleitwerte	Iteration bis Genauigkeit erreicht ist	Berechnung Mengenströmung unter Berücksichtigung von Randbedingungen 3. Art für die Flussabschnitte

Abbildung 16: Implizite Kopplung zwischen Grund- und Fließgewässern

### 1.3.4 Standgewässer

Wenn die gekoppelte Randbedingung ein Standgewässer ist, muss die Bilanz für das i-te Standgewässer

$$\sum_j Q_{Sij} + Q_{Si} - Z_i = dV(h_{Si}) / dt \quad (34)$$

erfüllt sein ( $Q_{S\ i}$  - oberirdische Zu- bzw. Abfluss,  $Z_i$  - Zehrung und  $V(h_{S\ i})$  - Standgewässervolumen beim Wasserstand  $h_{S\ i}$ ). Der Leitwert  $L_{S\ ij}$  ist vom Wasserstand im Standgewässer und im Grundwasser abhängig. Die Abbildung 17 zeigt, dass das Standgewässer sowohl horizontal als auch vertikal an den Aquifer angeschlossen sein kann. Im Falle der horizontalen Kopplung müssen 3 Fälle unterschieden werden:

- Wasserstand im Standgewässer liegt unter der Sohle des finiten Volumenelementes  $z_{ij}$ :

$$dh_{\text{über } ij} = \max(0, \min(dz_{ij}, h_{ij} - z_{ij})) / 2 \quad (35)$$

- Wasserstand im Standgewässer liegt unter der lokalen Gewässersohle  $s_{ij}$ :

$$dh_{\text{über } ij} = \max(0, \min(dz_{ij}, h_{R\ i} - s_{ij})) / 2 \quad (36)$$

- Wasserstand im Standgewässer bestimmt  $dh_{\text{über}}$ :

$$dh_{\text{über } ij} = \max(0, \min(h_{R\ i}, z_{ij} + dz_{ij}) - \max(z_{ij}, s_{ij})) \quad (37)$$

Der Leitwert für die horizontale Gewässerkopplung ergibt sich zu

$$L_{S\ ij} = k_{f\ ij} \cdot b_{ij} \cdot dh_{\text{über } ij} / l_{ij} \quad (38)$$

mit  $k_{f\ ij}$  –  $k_f$ -Wert der Kopplung,  $b_{ij}$  – Breite der Kopplung und  $l_{ij}$  Gradientenstrecke. Falls für die horizontale Kopplung eine Kolmation vorgegeben wurde, wird diese bei der  $k_f$ -Wert-Berechnung berücksichtigt.

Für die vertikalen Kopplungen ist die Berechnung einfacher:

$$L_{S\ ij} = k_{f\ ij} \cdot f_{ij} / d_{ij} \quad (39)$$

mit  $k_{f\ ij}$  – Kolmation,  $f_{ij}$  Fläche und  $d_{ij}$  – Dicke der kolmatierten Schicht.

Bei horizontaler Kopplung hängt der Leitwert auch vom Wasserstand im Grundwasser und im Standgewässer ab (Höhe der Kontaktfläche zwischen Standgewässer und dem Aquifer). Diese Abhängigkeiten werden explizit behandelt, d.h. der vorangegangene Teilzeitschritt bestimmt den Leitwert. Aus diesem Grunde sollte bei Vorhandensein von Standgewässern der Teilzeitschritt nicht größer als 10 Tage gewählt werden.

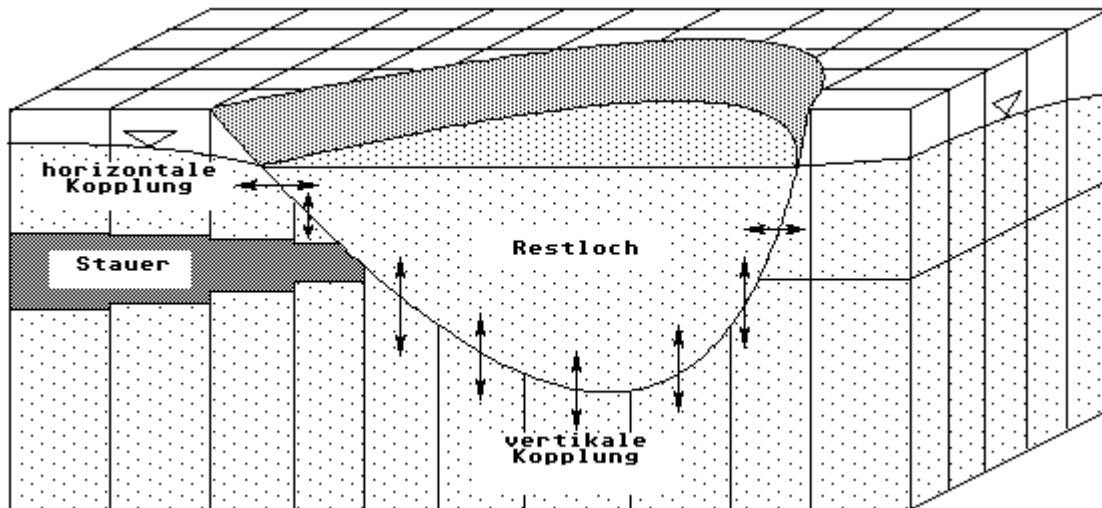


Abbildung 17: Kopplung eines Restloches an die finiten Volumenelemente

Die Zehrung und die Fläche, aus der sich das Volumen auf einfache Art und Weise berechnen lässt, werden als Polygonfunktion für die in Frage kommenden Wasserstände im Standgewässer vorgegeben. Gewonnen wird die Flächenkennlinie aus einer Digitalisierung der Standgewässerhohlform und einer sich daran anschließenden Triangulation und Berechnung von Dreiecksflächen.

Wie bei den Vertikalfilterbrunnen bestimmt eine Standgewässerhöhe den Wasserstand. Aus diesem Grunde enthält das Gleichungssystem für jedes Standgewässer eine Gleichung für  $h_{S i}$ .

$$[V(h_{S i}^{\text{old}})/dt] h_{S i} + \sum_j L_{S i j} (h_{S i} - h_{i j}) = [V(h_{S i}^{\text{old}})/dt] h_{S i}^{\text{old}} + Q_{S i} - Z_i \quad (40)$$

mit  $h_{S i}^{\text{old}}$  – Wasserstand zu Beginn des zu berechnenden Zeitschrittes,  $V(h_{S i}^{\text{old}})$  – Wasservolumen des  $i$ -ten Standgewässers beim Wasserstand  $h_{S i}^{\text{old}}$ ,  $L_{S i j}$  – Leitwert für die  $j$ -te Kopplung,  $h_{i j}$  – Standrohrspiegelhöhe im Aquifer,  $Q_{S i}$  – oberirdische Zu- bzw. Abfluss und  $Z_i$  – Zehrung.

## 2 Modellierung der Geomigration

Unter dem Begriff Migration versteht man den gekoppelten Prozess Stofftransport, Stoffspeicherung, Stoffaustausch und Stoffumwandlung in der Boden- und Grundwasserzone. Sie besteht aus

- der mobilen wässrigen Phase w (Phase, in der die Grundwasserströmung stattfindet),
- der stagnierenden wässrigen Phase s (am Feststoff gebundenes Grundwasser) und
- der Feststoffphase f (der Feststoffmatrix, die im Lockergestein vom Korngerüst gebildet wird).

### 2.1 Physikalische Grundlagen

#### 2.1.1 Mobile wässrige Phase

Stofftransportprozesse in der mobilen wässrigen Phase werden von der Konvektion, der Diffusion und der hydrodynamischen Dispersion geprägt.

Die *Konvektion* wurde im vorangegangenen Kapitel behandelt. Ein Partikel bewegt sich mit der Abstandsgeschwindigkeit  $v_{\text{Dar}}/n_m$  ( $n_m$  - die mit mobilem Wasser gefüllte Porosität, vorgegeben in PCGEOFIM als  $n_e$ ) im unterirdischen Strömungsraum.

Physikalische Ursache für die *molekulare Diffusion* ist die in jedem Fluid enthaltene thermische Energie, die sich in der Brownschen Molekularbewegung äußert. Diese Bewegung führt immer zu einem Ausgleich vorhandener Unterschiede in der Dichte bzw. Konzentration eines Stoffgemisches. Der Stofftransport ist also nur dann von Interesse, wenn durch äußere Einflüsse oder durch die Anfangsbedingungen im Untersuchungsgebiet in beliebiger Raumrichtung ein Konzentrationsgradient vorhanden ist. Das 1. Ficksche Gesetz gibt den Zusammenhang zwischen Diffusionsgeschwindigkeit  $v_{\text{Dif}}$  und dem Gradienten der Teildichte  $\rho_w$ :

$$\rho_w v_{\text{Dif}} = - n_m D \text{ grad } \rho_w. \quad (41)$$

Eine *hydrodynamische Dispersion* tritt in porösen Medien auf, da die konvektive Geschwindigkeit eines einzelnen Fluidteilchens im Grundwasserleiter eine statistische Verteilung aufweist. Gemessen wird die globale Abstandsgeschwindigkeit, die sich als Mittelwert der Bewegung aller Fluidteilchen einstellt. Manche Teilchen erreichen früher und andere später ihr Ziel, so dass es bei Vorhandensein von Konzentrationsunterschieden zur Dispersion kommt. Analog zur Diffusion definiert man die Dispersionsgeschwindigkeit  $v_{\text{Dis}}$  proportional zum Gradienten der Teildichte  $\rho_w$ :

$$\rho_w v_{\text{Dis}} = - D^* \text{ grad } \rho_w. \quad (42)$$

Dabei bezeichnet  $D^*$  den Dispersionstensor. Der tensorielle Charakter der hydrodynamischen Dispersion ergibt sich aus der Bewegung der Fluidteilchen. Die Geschwindigkeit in Strömungsrichtung ist bevorzugt, so dass die Dispersion in dieser Richtung wesentlich größer ist als in der dazu senkrechten. Die Komponenten der Dispersionstensors sind

$$D^* = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (43)$$

wobei die einzelnen Komponenten von der Darcy-Geschwindigkeit, der longitudinalen und der transversalen Dispersivität horizontal und vertikal abhängen (der Index 'Dar' wurde weggelassen):

$$\begin{aligned} D_{xx} &= [\delta_{Lh} v_x^2 + \delta_{Th} v_y^2 + \delta_{Tv} v_z^2] / |v|, \\ D_{yy} &= [\delta_{Th} v_x^2 + \delta_{Lh} v_y^2 + \delta_{Tv} v_z^2] / |v|, \\ D_{zz} &= [\delta_{Lv} v_z^2 + \delta_{Tv} v_x^2 + \delta_{Th} v_y^2] / |v|, \\ D_{xy} &= D_{yx} = (\delta_{Lh} - \delta_{Th}) v_x v_y / |v|, \\ D_{xz} &= D_{zx} = (\delta_{Lv} - \delta_{Tv}) v_x v_z / |v|, \\ D_{yz} &= D_{zy} = (\delta_{Lv} - \delta_{Tv}) v_y v_z / |v| \end{aligned} \quad (44)$$

mit  $\delta_{Lh}$  - longitudinale Dispersivität in horizontaler Strömungsrichtung,  $\delta_{Lv}$  - longitudinale Dispersivität in vertikaler Strömungsrichtung,  $\delta_{Th}$  und  $\delta_{Tv}$  - transversale Dispersivität senkrecht zur Strömungsrichtung horizontal und vertikal. Diese Koeffizienten sind Bodenkennwerte. Sie sind abhängig von den Inhomogenitäten, die auf dem Fließweg wirksam werden: je länger der Fließweg ist, desto größer sind die Dispersivitäten. Einen Anhaltspunkt liefert die häufig verwendete Näherung [3]  $\delta_{Lh} = 0.017$  Fließweg in m.

Die longitudinale Dispersivität horizontal kann ortsabhängig vorgegeben werden. Die anderen Kennwerte werden durch Faktoren beschrieben:  $\delta_{Lv} = \delta_{Lh} f_{Lv}$ ,  $\delta_{Th} = \delta_{Lh} f_T$  und  $\delta_{Tv} = \delta_{Lv} f_T$ . Die Faktoren liegen in der Größenordnung 0,1.

Der durch Molekulardiffusion bewirkte Stofftransport kann in sandig/kiesigen porösen Medien bei strömenden Grundwasser gegenüber dem durch Dispersion hervorgerufenen vernachlässigt werden.

Die Geschwindigkeit  $v_w$  eines Fluidteilchens in der mobilen wässrigen Phase  $w$  setzt sich additiv aus der Konvektions-, der Dispersions- und der Diffusionsgeschwindigkeit zusammen:

$$v_w = v_{Dar} + v_{Dis} + v_{Dif}. \quad (45)$$

Neben den bisher betrachteten Transportprozessen enthält die partielle Differentialgleichung für die Migration in der mobilen wässrigen Phase die Speicherung, den Austausch mit der stagnierenden wässrigen und mit der Feststoffphase und den Stoffabbau bzw. die Stoffproduktion. Mathematisch beschrieben werden diese gekoppelten Prozesse durch die Stoffbilanzgleichung. Für jede Komponente  $k$ , die am Migrationsprozess beteiligt ist, drückt diese Gleichung

$$n_m \partial \rho_w / \partial t + \text{div} \rho_w v_{Dar} - \text{div} (D^* + n_m D) \text{grad} \rho_w + \lambda_w n_m \rho_w = q_w - q_{w \rightarrow s} - q_{w \rightarrow f} \quad (46)$$

das Massenerhaltungsgesetz im Einheitsraum aus. Zur Vereinfachung der Schreibweise wurde der Index  $k$  weggelassen. Dabei bezeichnen  $n_m$  die mit mobilem Wasser gefüllte Porosität,  $\lambda_w$

den Abbaukoeffizienten,  $q_w$  die Quell-Senken-Belegungen und  $q_{w \rightarrow s}$  und  $q_{w \rightarrow f}$  die Austauschprozesse mit der stagnierenden wässrigen und der Feststoffphase.

### 2.1.2 Stagnierende wässrige Phase

In der stagnierenden wässrigen Phase sind die Darcy- und die Dispersiongeschwindigkeit Null, so dass die zu (46) analoge Beziehung die Form

$$n_s \partial \rho_s / \partial t - \text{div } n_s D \text{ grad } \rho_s + \lambda_s n_s \rho_s = q_s - q_{s \rightarrow w} - q_{s \rightarrow f} \quad (47)$$

hat, wobei  $n_s$  die mit stagnierender wässriger Phase gefüllte Porosität,  $\rho_s$  die Partialdichte in der stagnierenden wässrigen Phase,  $\lambda_s$  den Abbaukoeffizienten,  $q_s$  die Quell-Senken-Belegungen und  $q_{s \rightarrow w}$  und  $q_{s \rightarrow f}$  die Austauschprozesse mit der mobilen wässrigen und der Feststoffphase bezeichnen.

**Wässrige Phase:** Die beiden Massenerhaltungsgleichungen (46) und (47) sind raumbezogen formuliert und ermöglichen deshalb eine Superposition. Unter der Annahme, dass die Teildichten in den beiden wässrigen Phasen gleich sind ( $\rho_s = \rho_w$ ) und dass dies auch für die Abbaukoeffizienten gilt ( $\lambda_s = \lambda_w$ ), bekommt man

$$n_w \partial \rho_w / \partial t + \text{div } \rho_w v_{\text{Dar}} - \text{div } (D^* + n_w D) \text{ grad } \rho_w + \lambda_w n_w \rho_w = q_w + q_s - q_{s \rightarrow f} - q_{w \rightarrow f} \quad (48)$$

mit dem volumetrischen Phasengehalt der zusammenhängenden (konvektiven) wässrigen Phase

$$n_w = n_m + n_s. \quad (49)$$

Meist bezeichnet man die Gleichung (48) als Transportgleichung der wässrigen Phase. Diese Beziehung zeigt, dass sich ein Tracer in der konvektiven Phase mit der Geschwindigkeit  $v_{\text{Dar}}/n_w$  bewegt. Sie ist kleiner als die Abstandsgeschwindigkeit  $v_{\text{Dar}}/n_m$ , wenn  $n_s > 0$  gilt.

**Feststoffphase:** Die Kontinuitätsgleichung der Feststoffphase hat die Form

$$n_f \partial \rho_f / \partial t + \lambda_f n_f \rho_f = q_f - q_{f \rightarrow w} - q_{f \rightarrow s}. \quad (50)$$

Dabei bezeichnen  $\rho_f$  die Partialdichte in der Feststoffphase,  $n_f$  den Feststoffanteil ( $n_f = 1 - n_w$ ),  $\lambda_f$  den Abbaukoeffizienten,  $q_f$  die Quell-Senken-Belegungen und  $q_{f \rightarrow w}$  und  $q_{f \rightarrow s}$  die Austauschprozesse zwischen den entsprechenden Phasen. Die Beziehungen (48) und (50) können zu einer Gleichung zusammengefasst werden, wenn sich zwischen der wässrigen und der Feststoffphase ein Gleichgewicht einstellt. Das Programmsystem PCGEOFIM macht von dieser Annahme Gebrauch:

$$s_f = n_f \rho_f = \frac{k_{1d}^* \rho_b \rho_w^v}{1 + k_{2d} \rho_w} \quad \text{bzw.} \quad \rho_f = \frac{k_{1d} \rho_w^v}{(1 + k_{2d} \rho_w)} \quad (51)$$



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  $\text{kg}_k/\text{m}_R^3$ ,
- $n_f$  - volumetrischer Phasengehalt der Feststoffmatrix in  $\text{m}_f^3/\text{m}_R^3$ ,
- $\rho_f$  - Partialdichte des Stoffes  $k$  in der Feststoffmatrix in  $\text{kg}_k/\text{m}_f^3$ ,
- $\rho_w$  - Partialdichte des Stoffes  $k$  in der wässrigen Phase in  $\text{kg}_k/\text{m}_w^3$ ,
- $\rho_b$  - Rohdichte des Feststoffes (bulk density) in  $\text{kg}_f/\text{m}_R^3$ ,
- $\rho_0$  - Reindichte des Feststoffes in  $\text{kg}_f/\text{m}_f^3$ ,
- $k_{1d}^*$  - bei  $v = 1$  Verteilungskoeffizient in  $\text{m}_w^3/\text{kg}_f$ , sonst Größengleichung,
- $k_{1d}$  - bei  $v = 1$  Verteilungskoeffizient in  $\text{m}_w^3/\text{m}_f^3$ , sonst Größengleichung,
- $k_{2d}$  - Parameter in  $\text{m}_w^3/\text{kg}_k$ ;  $1/k_{2d}$  - Halbsättigungskonstante, d.h.  $\rho_w$ -Wert, für den  $s_f$  bzw.  $\rho_f$  gleich der Hälfte des Maximalwertes ist.

Die Indizes 0, k, f, w und  $\text{m}_R^3$  bedeuten: Normzustand, Stoff k, Feststoff, wässrige Phase und Gesamtvolumen.

Die im Programmsystem PCGEOFIM verwendete allgemeine Isotherme beinhaltet die drei bekanntesten Isothermen (s. Abbildung 18):

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

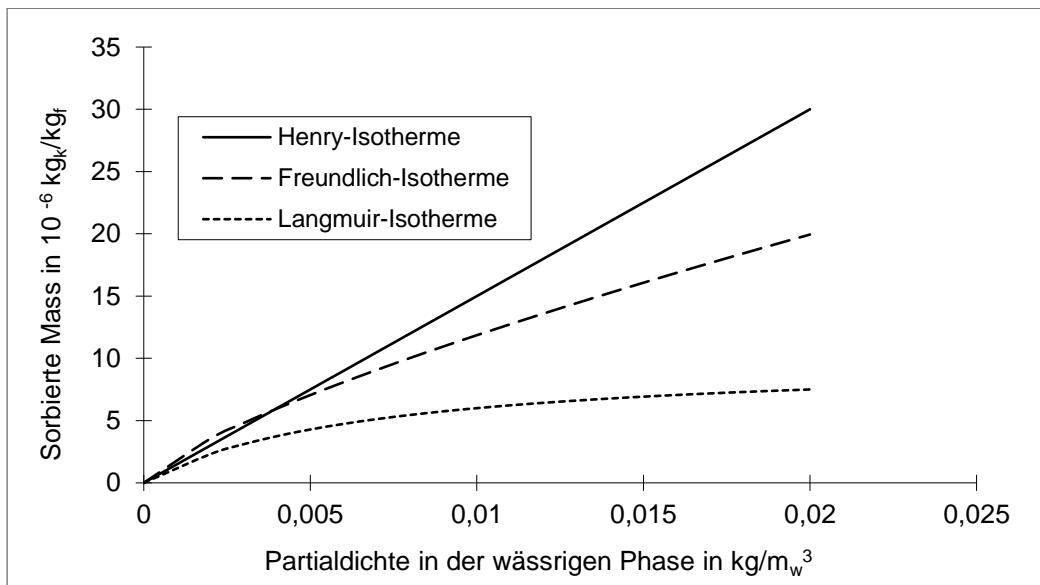


Abbildung 18: Henry-, Freundlich- und Langmuir-Isotherme zur Beschreibung der reversiblen Sorption eines Stoffes an der Feststoffmatrix. Ausgewiesen wird  $c_f = n_f \rho_f / \rho_b$ .

Parameter:

$\rho_b = 1600 \text{ kg}_f/\text{m}_R^3$ ,  $n_w = 0,4$ ,

Henry-Isotherme:  $k_{1d} = 4 \text{ m}_w^3/\text{m}_f^3$ ,

Freundlich-Isotherme:  $k_{1d} = 1$ ,  $e = 0,75$ ,

Langmuir-Isotherme:  $k_{1d} = 4 \text{ m}_w^3/\text{m}_f^3$ ,  $k_{2d} = 150 \text{ m}_w^3/\text{kg}_k$

**Stoffwandlung:** Eine Addition der Gleichungen (48) und (50) führt auf die Beziehung

$$\partial(n_w \rho_w + n_f \rho_f) / \partial t + \text{div } \rho_w v_{\text{Dar}} - \text{div}(D^* + n_w D) \text{grad } \rho_w + \lambda_w n_w \rho_w + \lambda_f n_f \rho_f = q \quad (52)$$

$$q = q_w + q_s + q_f - \text{summarische Quell-Senken-Belegung}$$

Diese Gleichung stellt die Basisgleichung der Stofftransportmodellierung mit dem Programmsystem PCGEOFIM dar. Die Wandlung des Stoffes  $k$  wird durch die beiden Terme  $\lambda_w n_w \rho_w$  und  $\lambda_f n_f \rho_f$  erfasst. Für den Abbau durch radioaktiven Zerfall gilt  $\lambda_w = \lambda_f > 0$ . Für mikrobielle Abbauprozesse wird gewöhnlich  $\lambda_f = 0$  gesetzt. Im Programmsystem PCGEOFIM sind neben einer Reaktionskinetik erster Ordnung, beschrieben durch  $\lambda = \text{const.}$ , weitere Ansätze mit  $\lambda = \lambda(\rho_w)$  implementiert worden. Die folgende Tabelle gibt eine Übersicht.

Tabelle 2: Definition der Abbaufunktion

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

Für relativ kleine  $\rho_w$ -Werte reflektiert die Michaelis-Menten-Kinetik einen Abbau 1. Ordnung und für relativ große  $\rho_w$ -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. Die Michaelis-Menten-Kinetik (MM) lautet in ihrer biologisch orientierten Schreibweise

$$\begin{aligned} \dot{s}_{\text{MM}} &= - \max \dot{s}_{\text{MM}} \rho_w / (K_{\text{MM}} + \rho_w) \\ &= - \max \dot{s}_{\text{MM}} / K_{\text{MM}} \{ \rho_w / (1 + (1/K_{\text{MM}}) \rho_w) \} = -\lambda_1 \{ \rho_w / (1 + \lambda_2 \rho_w) \} \end{aligned} \quad (53)$$

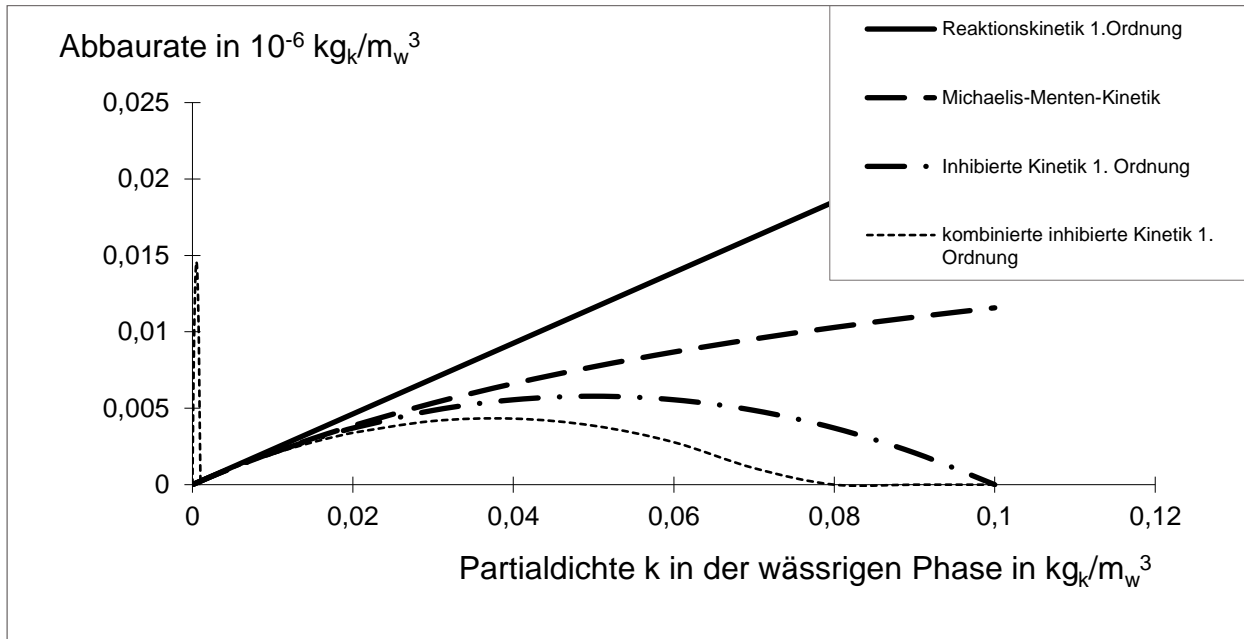
mit  $\dot{s}$  - Abbaurrate und  $K_{\text{MM}}$  - Halbwertkonstante. Ein Vergleich zeigt, dass  $\lambda_1 = \max \dot{s}_{\text{MM}}/K_{\text{MM}}$  und  $\lambda_2 = 1/K_{\text{MM}}$  entspricht.

Auch die toxische Inhibierung stellt für kleine  $\rho_w$ -Werte eine Kinetik erster Ordnung dar. Wenn aber die Partialdichte die Größenordnung der Grenzdichte  $\rho_{\text{wtox}}$  erreicht, wird die Abbaurrate 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 folgenden Tabelle zu finden. In der nachfolgenden Abbildung ist die Abbaurrate grafisch dargestellt.

Tabelle 3: Zahlenwerte zur Berechnung der Abbaufunktion (Beispiel)

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

Abbildung 19: Abhängigkeit der Abbauraten  $n_w^{-1} ds/dt$  vom Kinetikmodell

## 2.2 Allgemeine Transportgleichung

Unter Berücksichtigung der allgemeinen Isotherme (51) kann der Term  $n_w \rho_w + n_f \rho_f$  auch in der Form  $n_w \rho_w \{1 + (1 - n_w)/n_w k_{1d} \rho_w^{v-1}/(1 + k_{2d} \rho_w)\}$  geschrieben werden. Der in der geschweiften Klammer stehende Ausdruck stellt im Falle einer Henry-Isotherme den Retardationsfaktor<sup>1</sup> dar. Aus diesem Grunde wurde die Bezeichnung R gewählt. Unter Berücksichtigung des R-Faktors kann die Gl. (52) in folgender Form geschrieben werden:

$$\partial (n_w R \rho_w) / \partial t + \text{div} \rho_w v_{\text{Dar}} - \text{div} (D^* + n_w D) \text{grad} \rho_w + \lambda n_w R^* \rho_w = q, \quad (54)$$

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

$D^*$  - Dispersionstensor ( $D^* = \delta_L |v_{\text{Dar}}|$ ) 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  $m_R^2/s$ ,

<sup>1</sup> Definition des Retardationsfaktors:

$$\begin{aligned} R &= \partial(n_w \rho_w + n_f \rho_f) / \partial(n_w \rho_w) = 1 + (n_f/n_w) \partial \rho_f / \partial \rho_w \\ &= 1 + (1 - n_w)/n_w k_{1d} \rho_w^{v-1} / (1 + k_{2d} \rho_w) \{v - k_{2d} \rho_w / (1 + k_{2d} \rho_w)\} \end{aligned}$$

- $k_{1d}$  - Koeffizient zur Stoffverteilung k-te Komponente (bei  $v = 1$  in  $m_w^3/m_f^3$ ),
- $k_{2d}$  - Koeffizient zur Stoffverteilung in  $m_w^3/kg_k$
- $\lambda_1$  - Abbaukonstante k-te Komponente in  $1/s$ ,
- $\lambda_2$  - 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  $m_w^3/m_R^3$ ,
- $v$  - 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  $\lambda_f = 0$ :  $R^* = 1$ ,
- $\rho_w$  - Partialdichte k in der wässrigen Phase ( $kg_k/m_w^3$ ).

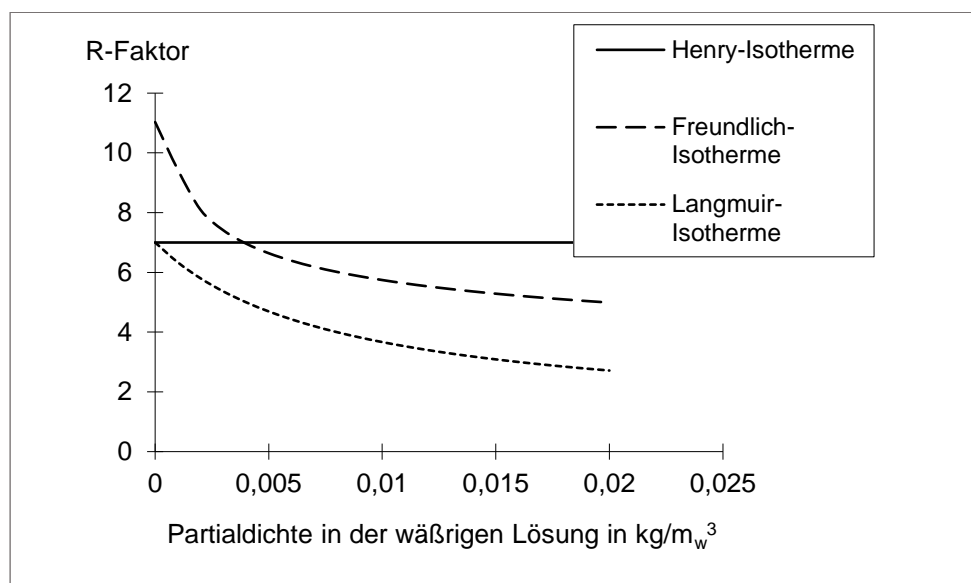


Abbildung 20: Abhängigkeit des R-Faktors von der Partialdichte in der wässrigen Phase für die in Abbildung 19 definierten Isothermen

Nach einer Berechnung der Strömungsgleichung ist die Darcy-Geschwindigkeit  $v_{Dar}$  bekannt, so dass auch der Dispersionstensor explizit bestimmt werden kann. Der Diffusionskoeffizient ist ein Stoffparameter. Die Koeffizienten der Isothermen und die Abbaukoeffizienten sind stoffabhängige Bodenkennwerte und werden deshalb als Funktion des Ortes  $k_{1d}(x,y,z)$ ,  $k_{2d}(x,y,z)$ , ... vorgegeben. Somit ermöglichen die obigen Stofftransportgleichungen die Ermittlung der Teildichten  $\rho_m(x,y,z,t)$  als Funktion von Ort und Zeit, wenn Anfangs- und Randbedingungen vorgegeben werden können.

Mathematisch ist die Lösung der Stofftransportgleichungen komplizierter als die der Strömungsgleichung, weil die partielle Differentialgleichung für den Transport vom hyperbolischen Typ, die für die Strömung hingegen vom parabolischen Typ ist.

Eine erste Näherung ergibt sich, wenn nur die Konvektion, der dominierende Transportprozess im Aquifer, betrachtet wird. Die Stofftransportgleichung besagt dann: Ein einzelnes Teilchen bewegt sich mit der Geschwindigkeit  $v_{Dar}(x,y,z,t)/(Rn_w)$  im Strömungsfeld. Im Folgenden wird

das im Programmsystem PCGEOFIM implementierte "Particle Tracking"-Verfahren vorge stellt.

## 2.3 Stromlinien

Voraussetzung für die Bestimmung von Stromlinien ist das Vorhandensein einer Lösung der Strömungsgleichung. Es kann sich hierbei um die stationäre Lösung oder die Lösung zu einem bestimmten Zeitpunkt handeln. Bekannt ist dann die Standrohrspiegelhöhe in jedem Netzknoten und daraus folgend die Darcy-Geschwindigkeiten an den sechs Oberflächen der finiten Volumenelemente. Zur Vereinfachung der Darstellung betrachten wir nur den zweidimensionalen Fall. Abbildung 21 zeigt die Situation: Ein Fluidteilchen befinde sich zurzeit  $t$  am Ort  $x(t)$ ,  $y(t)$  im Volumenelement  $i, j$ . Im Strömungsfeld bewegt sich dieses Fluidteilchen mit der Geschwindigkeit  $v_{\text{Dar}}(t)/(n_w R)$  zum Ort  $x(t+\Delta t)$ ,  $y(t+\Delta t)$  (Der Index 'Dar' wird wieder weggelassen):

$$\begin{aligned} x(t+\Delta t) &= x(t) + v_x(t) / (n_w R) \Delta t, \\ y(t+\Delta t) &= y(t) + v_y(t) / (n_w R) \Delta t. \end{aligned} \quad (55)$$

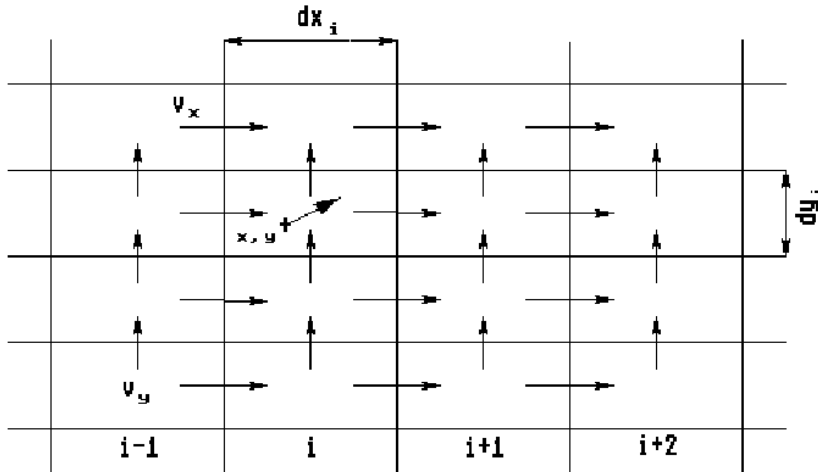


Abbildung 21: Zur Berechnung der Geschwindigkeit am Aufpunkt  $x, y$

Die Geschwindigkeit am Aufpunkt  $x, y$  wird durch bilineare Interpolation berechnet. Mit den in Abbildung 21 angegebenen Bezeichnungen kann die folgende Berechnungsvorschrift verifiziert werden:

$$\begin{aligned} v_{x \, i,j}(x) &= v_{x \, i-1/2,j} + (v_{x \, i+1/2,j} - v_{x \, i-1/2,j}) (x - x_{i-1/2}) / dx_i, \\ v_{y \, i,j}(y) &= v_{y \, i,j-1/2} + (v_{y \, i,j+1/2} - v_{y \, i,j-1/2}) (y - y_{j-1/2}) / dy_j. \end{aligned} \quad (56)$$

Dabei bezeichnet der Index  $1/2$  die linke oder rechte bzw. obere oder untere Kante des Volumenelementes. Je nachdem in welchem Quadranten sich der Aufpunkt befindet, erfolgt die Interpolation zum Nachbarelement, in unserem Falle:

$$\begin{aligned} v_{x \, i,j}(x,y) &= v_{x \, i,j-1}(x) + (v_{x \, i,j}(x) - v_{x \, i,j-1}(x)) (y - y_j - dy_{j-1/2}) / (dy_{j-1} + dy_j)/2, \\ v_{y \, i,j}(x,y) &= v_{y \, i-1,j}(y) + (v_{y \, i,j}(y) - v_{y \, i-1,j}(y)) (x - x_i - dx_{i-1/2}) / (dx_{i-1} + dx_i)/2. \end{aligned} \quad (57)$$

Der Zeitschritt  $\Delta t$  wird so klein gewählt, dass das Fluidteilchen mindestens 25 Zeitschritte benötigt, um ein finites Volumenelement zu durchqueren. Auf diese Weise ergeben sich glatte Stromlinien.

Wenn zu Beginn der Berechnung ein Schadstoffherd durch genügend viele Wanderpunkte eindeutig lokalisiert wird, kann durch Verfolgung der Stromlinien das vom Schadstoff beeinflusste Gebiet bestimmt werden und es ist auch möglich, den Zeitpunkt der Beeinflussung zu berechnen.

Im Falle einer stationären Strömung kann auch die umgekehrte Aufgabenstellung beantwortet werden: Welches Gebiet beeinflusst in welcher Zeit einen vorgegebenen Bereich? Um den zu schützenden Bereich werden wieder Wanderpunkte gesetzt, die Geschwindigkeiten mit -1 multipliziert und der Standort der Wanderpunkte zu vorgegebenen Zeiten gibt Auskunft über die Größe der Schutzzone.

Das Programmsystem PCGEOFIM ermittelt die Isochronen. Isochronen sind Linien gleicher Fließzeit bezogen auf den Anfangspunkt einer Stromlinie.

## 2.4 Das Random-Walk-Verfahren

Auch beim Random-Walk-Verfahren werden Stromlinien von Tracerteilchen ermittelt. Überall dort, wo infolge der Anfangsbedingungen die Teildichte verschieden von Null ist bzw. durch Einspeisung Stoff in den Aquifer eingetragen wird, werden Tracerteilchen eingesetzt. Die Tracerteilchen sind Träger der Eigenschaft und transportieren eine gewisse Menge. Die Konvektion wird durch die Wanderung der Partikel modelliert. Die Diffusion und die Dispersion ergeben sich aus einer den konvektiven Transport überlagernden Zufallsbewegung (random walk). Um das zu verstehen, lösen wir die Transportgleichung

$$D_L \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + D_T \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} = n_w R \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (58)$$

für die Einspeisung einer Schadstoffmenge  $m_s$  über einen im Vergleich zur Beobachtungszeit kleinen Zeitraum am Ort  $x_0, y_0, z_0$ . Zur Vereinfachung wurde angenommen, dass das Grundwasser in x-Richtung strömt. Nach [3, S.463] ist die Lösung dieses Problems für den Fall Anfangs- und Randbedingungen Null durch

$$\rho(x,y,z,t) = \frac{M_s}{8D_T t \sqrt{(\pi^3 D_L t / (n_w R))}} \exp \left[ - \frac{(x-x_0-v_x t / (n_w R))^2}{4D_L t / (n_w R)} \right] \exp \left[ - \frac{(y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}{4D_T t / (n_w R)} \right] \quad (59)$$

gegeben. Diese Lösung kann auch aufgefasst werden als eine Superposition von Normalverteilungen bezüglich  $x, y$  und  $z$  für eine feste Zeit  $t$ , in longitudinaler Richtung (in Richtung der Geschwindigkeit) um den Mittelwert  $x_m = x_0 - v_x t / (n_w R)$  mit der Standardabweichung  $\sigma_x = \sqrt{2D_L t / (n_w R)}$  und in transversaler Richtung (senkrecht zur Richtung der Geschwindigkeit) um die Mittelwerte  $y_m = y_0$  bzw.  $z_m = z_0$  mit der Standardabweichung  $\sigma_y = \sigma_z = \sqrt{2D_T t / (n_w R)}$ :

$$\rho(x,y,z,t) = \frac{m_s}{\sqrt{8\pi^3} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[ - \frac{(x-x_m)^2}{2\sigma_x^2} \right] \exp \left[ - \frac{(y-y_m)^2}{2\sigma_y^2} \right] \exp \left[ - \frac{(z-z_m)^2}{2\sigma_z^2} \right] \quad (60)$$

Eine solche Verteilung kann auch stochastisch erzeugt werden, indem man

$$x = x_0 + v_x t / (n_w R) + Z \sigma_x, \quad y = y_0 + Z \sigma_y, \quad z = z_0 + Z \sigma_z \quad (61)$$

für viele verschiedene normalverteilte Zufallszahlen  $Z$  mit dem Mittelwert Null und der Standardabweichung Eins bildet.

Das Random-Walk-Verfahren läuft nun wie folgt ab: In jedem finiten Volumenelement werden entsprechend der Anfangskonzentration und der Masse, die ein Tracerteilchen repräsentiert, Wanderpunkte gesetzt. Der gesamte Zeitraum wird in Teilzeitschritte  $\Delta t$  unterteilt. In jedem Teilzeitschritt werden Wanderpunkte entsprechend der eingespeisten Menge nachgesetzt. Dann erfolgt der "random walk". Die Gleichungen (61) haben im allgemeinen Falle die Form

$$\begin{aligned} x &= x_0 + v_x \Delta t / (n_w R) + Z_{eLx} \sigma_1 + Z_{eT1x} \sigma_T + Z_{eT2x} \sigma_T, \\ y &= y_0 + v_y \Delta t / (n_w R) + Z_{eLy} \sigma_1 + Z_{eT1y} \sigma_T + Z_{eT2y} \sigma_T, \\ z &= z_0 + v_z \Delta t / (n_w R) + Z_{eLz} \sigma_1 + Z_{eT1z} \sigma_T + Z_{eT2z} \sigma_T, \end{aligned} \quad (62)$$

mit  $e_L$ - Einheitsvektor in Geschwindigkeitsrichtung und  $e_{T1}$ ,  $e_{T2}$  - Einheitsvektoren senkrecht dazu,  $\sigma_L = \sqrt{2D_L\Delta t/(n_w R)}$  und  $\sigma_T = \sqrt{2D_T\Delta t/(n_w R)}$ . Jeder Wanderpunkt wird im Zeitschritt  $\Delta t$  vom Ort  $x_0, y_0, z_0$  nach  $x, y, z$  bewegt. Nach der Berechnung der neuen Standorte werden Wanderpunkte entsprechend der ausgespeisten Masse entfernt. Schließlich ist noch die sich ergebende Teildichte zu berechnen und im Falle der Freundlich- und der Langmuir-Isotherme die Retardation neu zu bestimmen. Der Abbau wird durch Entfernen von Partikeln realisiert. Die Anzahl ergibt sich aus dem Abbau der Teildichte im finiten Volumenelement.

Es ist klar, dass die Genauigkeit der Lösung ganz entscheidend von der Anzahl der eingesetzten Wanderpunkte abhängt. Erfahrungen zeigen, dass je nach Größe des Gebietes zwischen 10000 und 100000 Wanderpunkte eingesetzt werden sollten.

Der große Vorteil des Random-Walk-Verfahrens gegenüber der im folgenden Abschnitt beschriebenen numerischen Lösung liegt in der Anwendung des Verfahrens auch bei sehr kleinen Dispersivitäten, der Nachteil in der "gewöhnungsbedürftigen" Darstellung der Ergebnisse: In der Natur wird die Normalverteilung durch  $6,025 \cdot 10^{23}$  Partikel/mol (Avogadro-Konstante) im Programm durch 10 ... 1000 Partikel/finites Volumen-Element "erzeugt".

## 2.5 Die numerische Lösung der Migrationsgleichung

Auch die Stofftransportgleichung wird im Programmsystem PCGEOFIM mit Hilfe der Bilanzmethode gelöst. Es werden die finiten Volumina der Strömungsgleichung verwendet. Zu beachten ist, dass schon bei der Definition der finiten Volumina aus der Sicht der Mengenströmung der Stofftransport berücksichtigt wird. Die Elemente sind so zu wählen, dass die Randbedingungen für den Stofftransport genügend genau abgebildet werden.

In der Integraldarstellung hat die Gl. (54) die Form

$$\iiint n_w R \partial \rho_w / \partial t dV + \iint (\rho_w V_{Dar} - \text{div} (D^* + n_w D) \text{grad } \rho_w) d\sigma + \iiint \lambda n_w R^* \rho_w dV = \iiint q dV, \quad (63)$$

Vorratsänderung + Konvektion + Dispersion + Diffusion + Abbau = Quellen.

Nachdem die Strömungsgleichung für einen Zeitschritt berechnet worden ist, sind die Darcy-Geschwindigkeit und damit auch der Dispersionstensor bekannt, so dass analog zur Vorgehensweise bei der Lösung der Strömungsgleichung die Integrale für jedes finite Volumenelement bestimmt werden können.

Im Programmsystem PCGEOFIM wird die Transportgleichung halbimplizit gelöst: Konvektion, Dispersion, Diffusion und Quellen explizit, Abbau zentral und Senken implizit:

$$[(R + \lambda R^*/2) n_w \Delta x \Delta y \Delta z + |V_{Senke}|]_{ijk} / \Delta t \rho_w(t + \Delta t)_{ijk} = [(R + \lambda R^*/2) n_w \Delta x \Delta y \Delta z]_{ijk} / \Delta t \rho_w(t)_{ijk} + \{ \text{Konvektion} + \text{Dispersion} + \text{Diffusion} + \text{Quellen} \} (t)_{ijk}. \quad (64)$$

Mit Hilfe dieser Beziehung kann  $\rho_w(t + \Delta t)_{ijk}$  explizit ermittelt werden, wenn  $\rho_w(t)_{ijk}$  und die Randbedingungen bekannt sind. Die explizite Lösung der Transportgleichung erfordert die Einhaltung des Stabilitätskriteriums

$$\Delta t < n_w R \Delta x \Delta y \Delta z / [|q_x| + |q_y| + |q_z| + 2\delta_L (|q_x|/\Delta x + |q_y|/\Delta y + |q_z|/\Delta z) + \lambda n_w R^* \Delta x \Delta y \Delta z] \quad (65)$$



für jedes finite Volumenelement. Dabei bezeichnen  $q_x$ ,  $q_y$  und  $q_z$  die Volumenströme über die Berandung in x-, y- und z-Richtung. Wenn für ein finites Volumenelement diese Bedingung zu einem Zeitschritt kleiner als 30 Minuten führt, wird dieses finite Volumen aggregiert, d. h. es wird mit einem Nachbarelement verbunden, so dass  $\Delta t$  nicht so klein gewählt werden muss.

Die Lösung der Transportgleichung ist numerisch eine anspruchsvolle Aufgabe. Der Konvektionsterm in Gl. (64) führt zu scharfen Fronten, die mit numerischen Verfahren nur unzulänglich nachgebildet werden können. Bekannt ist, dass bei Einhaltung des Peclet-Zahl-Kriteriums

$$\max(\Delta x/\delta_L, \Delta y/\delta_L, \Delta z/\delta_L) < 2 \quad (66)$$

der hyperbolische Charakter der Gl. (64) lokal in den parabolischen übergeht. Zur Unterstützung dieses Phänomens wird bei der Berechnung der Konvektion der sogenannte „Flux-Limiter“ eingesetzt. Durch parabolische Interpolation werden die Partialdichten auf den Rändern der finiten Volumenelemente ermittelt, die bei der Berechnung des Oberflächenintegrals für die Konvektionsterme benötigt werden. So wandert die Front erst in das Nachbarelement, wenn die Partialdichte auch am Rand des Elementes angekommen ist. Dieser Algorithmus ermöglicht es, dass das Peclet-Zahl-Kriterium nicht strikt eingehalten werden muss. Die Abbildung 22 und die Abbildung 23 zeigen dies deutlich.

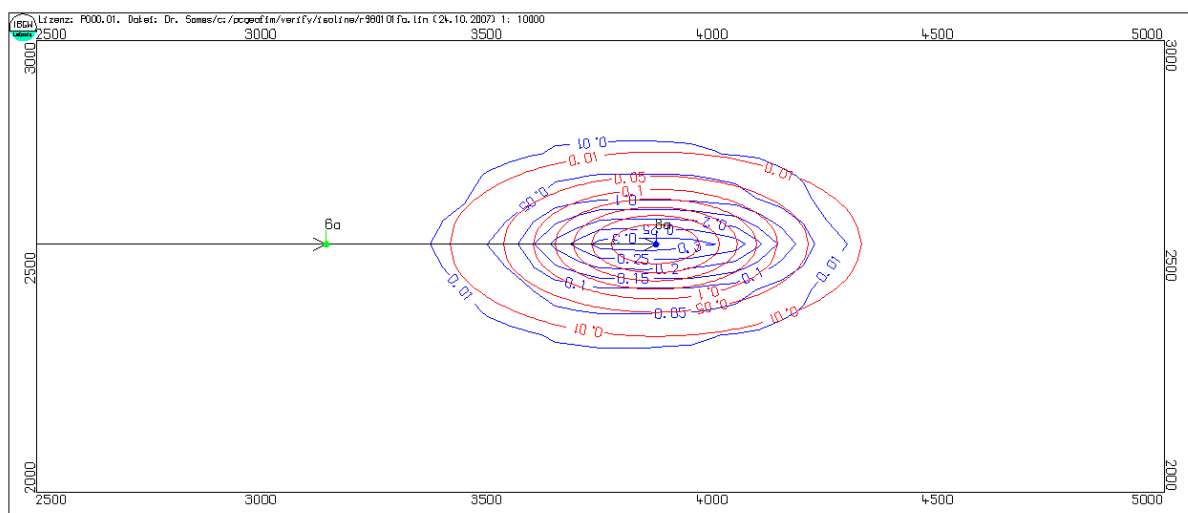


Abbildung 22: Numerische Lösung mit „Flux-Limiter“ und analytische Lösung für  $Pe = 20$

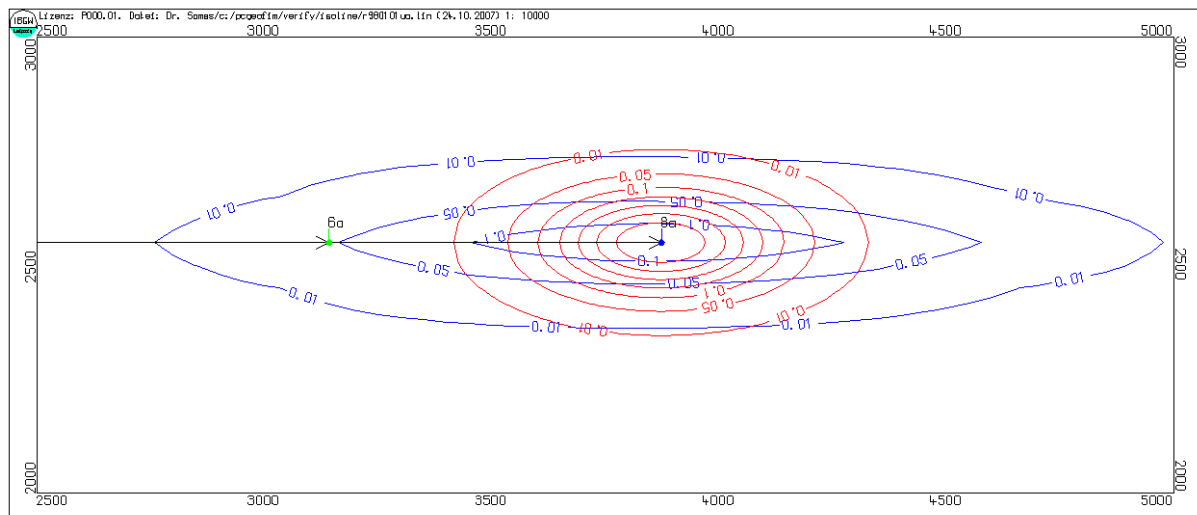


Abbildung 23: Numerischen Lösung mit „upwind“-Wichtung, analytische Lösung für  $Pe = 20$

### 2.5.1 Anfangsbedingungen

Die Gleichung zur Bestimmung der Teildichten zeigt, wie wesentlich die Anfangsbedingungen das Ergebnis beeinflussen. Im Unterschied zum Mengenströmungsproblem wird beim Stofftransport nie die stationäre Lösung gesucht, sondern immer die zeitliche Entwicklung. Außer im Falle eines Ersteintrages eines Stoffes, wo  $\rho_w(i,j,k,t_{\text{Anfang}})$  gleich Null ist, ergeben sich für praktische Anwendungen enorme Schwierigkeiten bei der Beschaffung der Anfangswerte, da das Messnetz meist nur unvollständig ausgebaut ist und die Messergebnisse in den vielen Fällen nicht korreliert sind, so dass die Anfangsverteilung der Teildichten mit großen Fehlern behaftet ist.

### 2.5.2 Randbedingungen

Alle Randbedingungen der Strömung, die Brunnen und die Gewässer ergeben Zu- oder Abflüsse. Zuflüsse führen zusammen mit der vorgegebenen Einspeisedichte zu Massequellen beim Stofftransport. Abflüsse der Mengenströmung führen zusammen mit den im Abflussknoten vorhandenen Teildichten zu Massensenken in der entsprechenden Stofftransportgleichung. Aus diesem Grunde sind im Programmsystem PCGEOFIM nur die Migrationsrandbedingung erster Art, die geschlossene Kontur (Randbedingung 2. Art) und die Ausströmrandbedingung implementiert worden.

Bei der Migrationsrandbedingung 1. Art werden die Teildichten in vorgegebenen finiten Volumenelementen auf einem bestimmten Niveau (eventuell auch zeitabhängig) festgehalten. Die dazu notwendigen Massenquellen bzw. -senken werden ausgewiesen.

An allen Rändern des Aquifers wird die Migrationsrandbedingung 2. Art, geschlossene Kontur, realisiert.

Im Allgemeinen ist es nicht sinnvoll, den Stofftransport im gesamten Strömungsraum zu modellieren. Nur ein kleiner Teil des Strömungsraumes wird von einem lokalen Schadstoffherd erfasst. Aus diesem Grunde wird vom Anwender festgelegt, in welchem Teil des Aquifers der

Stofftransport untersucht werden soll. Am Rand des Ausschnitts wird die Transmissionsrandbedingung [6] automatisch realisiert. Die den Ausschnitt verlassenden Massen werden ausgewiesen. Wenn der Anteil zu groß sein sollte, muss der Ausschnitt vergrößert werden.

### 3 Parameteridentifikation

Bei der numerischen Simulation stellt die Beschaffung repräsentativer Daten das Schlüsselproblem dar. Im Untersuchungsgebiet existieren im Allgemeinen nur einige Bohrungen. Ein erfahrener Geologe mit guten Ortskenntnissen baut mit Hilfe dieser Daten das geometrische Modell auf. Die Durchlässigkeitskoeffizienten sind durch Siebanalysen des Grundwasserleitermaterials und daraus ermittelten Kornverteilungskurven an den Bohrungen bekannt und können auch aus dem geologischen Aufbau des Aquifers größenordnungsmäßig vorgegeben werden. Auch die Vorgabe der Parameter entwässerbare und wiederauffüllbare Porosität, Speicherkoefizient, Grundwasserneubildung und Leakage-Faktor basiert auf langjährigen Erfahrungswerten bzw. mit Hilfe von Approximationsfunktionen ermittelten Kennwerten.

Bei jeder Modellierung schließt sich an die Phase des Modellaufbaus die Eichphase an. Durch gezielte Veränderung von Parametern und Randbedingungen wird versucht, die Ergebnisse der numerischen Simulation mit den gemessenen Pegelständen möglichst genau in Übereinstimmung zu bringen.

Mit der Parameteridentifikation wird dem PCGEOFIM-Anwender ein Werkzeug zur Verfügung gestellt, welches es erlaubt, aus einem historischen messtechnischen Prozess die Daten so zu kalibrieren, dass die Messwerte bestmöglich reproduziert werden. Das im Programmsystem PCGEOFIM implementierte Verfahren nutzt die Sensitivitätsmethode der Parameteridentifikation und führt im Ergebnis auf Parameter, welche die gemessenen Spiegelhöhen mit minimaler Abweichung widerspiegeln.

Als Zielfunktion wird der aus der Gaußschen Fehlerquadratsumme berechnete mittlere quadratische Fehler definiert. Eine Spezialität stellt die Einbeziehung des hydraulischen Gradienten dar (s. u.). Ausgewiesen wird die Standardabweichung  $\sigma$  in m. Vorgegeben werden auch bei der Parameteridentifikation alle Parameter. Zusätzlich werden in bestimmten Teilgebieten des Untersuchungsgebietes Zonen definiert. Nur in diesen Zonen werden Parameter identifiziert. Zonen können z.B. sein:

- größere Bereiche eines Grundwasserleiters zur Identifikation des  $k_f$ -Wertes,
- Kippengebiete zur Identifikation des  $k_f$ -Wertes und/oder der Porosität,
- der oberste Grundwasserleiter unter bebauten Flächen zur Identifikation der Grundwasserneubildung in diesen Gebieten,
- ein Grundwasserleiter zur Identifikation des Leakage-Faktors und/oder des Speicherkoefizienten,
- Teile der äußeren Berandung zur Identifikation der Randzuflüsse.

Für jeden zu identifizierende Parameter einer Zone wird ein Zonenfaktor definiert, der zu Beginn der Identifikation den Wert Eins besitzt. Nun wird eine Simulation der Mengenströmung durchgeführt und der mittlere quadratische Fehler berechnet. Außerdem wird die Sensitivität

der einzelnen Zonenfaktoren ermittelt. Die Sensitivität ist ein Maß für die Beeinflussung der Zielfunktion durch den Zonenfaktor.

Mit Hilfe des Gauß-Newton-Verfahrens werden für die sensitivsten Zonen neue Zonenfaktoren bestimmt, die zu einem kleineren mittleren quadratischen Fehler führen. Dieses Verfahren wird iterativ fortgesetzt, bis das Minimum erreicht ist.

### 3.1 Mathematische Grundlagen

Die Standrohrspiegelhöhen werden in Grundwasserbeobachtungsrohren gemessen. Bekannt sind die Koordinaten des Pegels und die Zuordnung zu einem Grundwasserleiter. Zu vorgegebenen Zeiten misst der Pegelmesser die Spiegelhöhe, so dass die Messwerte in der Form  $h^g(x_m, y_m, k_m, t_m)$  vorliegen. Dabei bezeichnen  $h^g$  die gemessene Spiegelhöhe zurzeit  $t_m$  am Ort  $x_m, y_m$  im Grundwasserleiter  $k_m$  und  $m$  die Nummerierung für Ort und Zeit, insgesamt  $M$  Messwerte.

Im Ergebnis einer PCGEOFIM-Simulation erhält man das Feld  $h(i, j, k)$  für vorgegebene Zeitpunkte. Mit  $i, j, k$  werden die finiten Volumenelemente bezeichnet. Es wird nun angenommen, dass die Standrohrspiegelhöhen für alle Zeiten berechnet werden, für die Pegelmesswerte vorliegen. So ist nur eine örtliche, aber keine zeitliche Interpolation erforderlich, um die berechneten Werte mit den gemessenen vergleichen zu können. Die Interpolation erfolgt grundwasserleiterbezogen, indem die nächsten Nachbarn im Grundwasserleiter  $k$  gesucht werden und mit  $1/r^3$  gewichtet gemittelt werden. Im Ergebnis erhält man  $h^b(x_m, y_m, k_m, t_m)$ .

Bei der Beurteilung der erreichten Anpassung spielt neben der Abweichung der Pegelmesswerte von den berechneten Spiegelhöhen die Strömungsrichtung eine große Rolle. Eine Messung der Strömungsgeschwindigkeit ist im Aquifer nicht möglich. Bekannt ist aber der hydraulische Gradient. Er berechnet sich aus der Differenz benachbarter Pegelmesswerte, die aber im gleichen Grundwasserleiter aufgeschlossen sein müssen. Der Gradient ist angenähert proportional der Strömungsgeschwindigkeit.

In die Zielfunktion für die Parameteridentifikation gehen die mittlere quadratische Abweichung und der hydraulische Gradient für ausgewählte Pegel ein:

$$J(f_1, f_2, \dots, f_z) = \sum_m (h_m^b - h_m^g)^2 + \sum_{\text{Gradient } m1-m2} [(h_{m1}^b - h_{m2}^b) - (h_{m1}^g - h_{m2}^g)]^2 \quad (67)$$

Die Zielfunktion  $J$  ist von den  $z$  Zonenfaktoren  $f$  abhängig, die die berechneten Standrohrspiegelhöhen beeinflussen und so zu bestimmen sind, dass die Zielfunktion ein Minimum annimmt. Mit der TAYLOR-Entwicklung

$$h_m^b(f_1, f_2, \dots, f_z) = h_m^b(f_1^0, f_2^0, \dots, f_z^0) + \sum_i (\partial h_m^b / \partial f_i) (f_i - f_i^0) + \dots \quad (68)$$

ergibt sich (zur Vereinfachung der Schreibweise bleibt im Folgenden der Gradient unberücksichtigt):

$$J(f_1, f_2, \dots, f_z) = \sum_m [h_m^b(f^0) + \sum_i (\partial h_m^b / \partial f_i) (f_i - f_{i0}) + \dots - h_m^g]^2 \rightarrow \min. \quad (69)$$

Die Formel (69) beschreibt näherungsweise die Abhängigkeit der Zielfunktion von den Zonenparametern. Für die Standardabweichung  $\sigma$  ergibt sich daraus:

$$\sigma^2(f_1, f_2, \dots, f_z) = \frac{J(f_1, f_2, \dots, f_z)}{(M-1)} = \frac{\sum_m (h_m^b(f_0) - h_m^g)^2}{(M-1) [1 + 2 \sum_i s_i^* (f_i - f_i^0) + \dots]}, \quad (70)$$

$$s_i^* = \frac{\sum_m (\partial h_m^b / \partial f_i) (h_m^b(f^0) - h_m^g)}{\sum_m (h_m^b(f^0) - h_m^g)^2} \quad (71)$$

bzw.

$$\sigma(f_1, f_2, \dots, f_z) \approx \sigma(f_1^0, f_2^0, \dots, f_z^0) + \sum_i s_i (f_i - f_i^0), \quad (72)$$

$$\sigma(f_{10}, f_{20}, \dots, f_{z0}) = [\sum_m (h_m^b(f^0) - h_m^g)^2 / (M-1)]^{1/2}, \quad (73)$$

$$s_i = \sigma_0 \sum_m (\partial h_m^b / \partial f_i) (h_m^b(f^0) - h_m^g) / \sum_m (h_m^b(f^0) - h_m^g)^2 \quad (74)$$

Die Größe  $s_i$  beschreibt die Sensitivität der Standardabweichung in Bezug auf eine Änderung des Zonenfaktors  $f_i$  im Punkt  $f_1^0, f_2^0, \dots, f_z^0$ .

Für die Bestimmung "verbesserter" Zonenfaktoren kommen nun nur solche Zonen in Betracht, die auch eine wesentliche Verbesserung der Zielfunktion ergeben. Ein Vergleich der Sensitivitäten zeigt, welche Zonen im Punkt  $f_1^0, f_2^0, \dots, f_z^0$  ausgewählt werden sollten. Die Änderung selbst ergibt sich aus der notwendigen Bedingung  $\partial J / \partial f_i = 0$  für ein Minimum. Aus Gl. (68) bekommt man  $z$  Gleichungen zur Ermittlung optimaler Zonenfaktoren:

$Z$

$$\sum_{m=1}^M \partial h_m^b / \partial f_i \partial h_m^b / \partial f_i (f_i - f_i^0) = \sum_m \partial h_m^b / \partial f_i (h_m^b(f^0) - h_m^g), \quad j = 1, 2, \dots, z \quad (75)$$

Nicht sensitive Zonen bleiben durch Streichen der entsprechenden Zeilen und Spalten im Gleichungssystem unberücksichtigt. Die Lösung des Gleichungssystems (75) liefert im Allgemeinen Zonenfaktoren, die zu einer kleineren Zielfunktion bzw. zu einem kleineren Fehler  $\sigma$  führen. Auf Grund der Nichtlinearitäten in der partiellen Differentialgleichung kann es aber sein, dass eine Lösung von (75) auf eine Zielfunktion führt, die größer ist als im vorangegangenen Iterationsschritt. Auch in diesem Fall ist die Lösung brauchbar: Neben dem Wert der Zielfunktion an den beiden Punkten  $f_1^0, f_2^0, \dots, f_z^0$  und  $f_1, f_2, \dots, f_z$  ist der Gradient am Anfangspunkt bekannt. So ergeben sich neue Zonenfaktoren durch parabolische Interpolation in Gradientenrichtung.

### 3.2 Parameteridentifikation für die Migration

Wenn man die Gleichungen (72) bis (74), das Gleichungssystem (75) und deren Herleitung betrachtet, stellt man fest, dass man statt der Spiegelhöhe  $h$  auch die Teildichte  $\rho_i$  einsetzen kann:

$$\sigma(f_1, f_2, \dots, f_z) \approx \sigma(f_1^0, f_2^0, \dots, f_z^0) + \sum_i s_i (f_i - f_i^0), \quad (76)$$

$$\sigma(f_{10}, f_{20}, \dots, f_{z0}) = [\sum_m (\rho_m^b(f^0) - \rho_m^g)^2 / (M-1)]^{1/2}, \quad (77)$$

$$s_i = \sigma_0 \sum_m (\partial \rho_m^b / \partial f_i) (\rho_m^b(f^0) - \rho_m^g) / \sum_m (\rho_m^b(f^0) - \rho_m^g)^2 \quad (78)$$

Die Größe  $s_i$  beschreibt die Sensitivität der Standardabweichung in Bezug auf eine Änderung des Zonenfaktors  $f_i$  im Punkt  $f_1^0, f_2^0, \dots, f_z^0$ . Das lineare Gleichungssystem zur Berechnung der Zonenfaktoren hat in diesem Fall die Form

$$\sum_{m=1}^Z \frac{\partial \rho_m^b}{\partial f_i} \frac{\partial \rho_m^b}{\partial f_i} (f_i - f_i^0) = \sum_m \frac{\partial \rho_m^b}{\partial f_i} (\rho_m^b(f^0) - \rho_m^g), \quad j = 1, 2, \dots, z \quad (79)$$

Vorgegeben sind im Falle der Parameteridentifikation für den Transport gemessene Partialdichten  $\rho_m^g(x_m, y_m, k_m, t_m)$  am Ort  $x_m, y_m$  im Grundwasserleiter  $k_m$  zur Zeit  $t_m$ . Identifiziert werden neben den schon im Fall Strömung genannten Parametern  $k_f$ -Wert, Leakage-Faktor, Grundwasserneubildung, entwässerbare Porosität und Speicherkoeffizient die longitudinale Dispersivität, der Retardationskoeffizient und die Teildichte bei Schadstoffeintrag.

## 4 Verifizierung

In diesem Kapitel wird gezeigt, dass für ausgewählte Beispiele, die mit dem Programmsystem PCGEOFIM berechneten Spiegelhöhen und Teildichten mit der analytischen Lösung der den Beispielen zu Grunde liegenden partiellen Differentialgleichungen im Rahmen der Genauigkeit der numerischen Verfahren, übereinstimmen. Damit ist sichergestellt, dass der numerische Code des Simulators GEOFIM für diese Fälle korrekt formuliert wurde.

Analytische Lösungen existieren im Allgemeinen nur für einfache Geometrien, konstante Eigenschaften, idealisierte Randbedingungen und einfache Anfangsbedingungen. Die Stärke der numerischen Lösung liegt gerade darin, dass solch vereinfachende Annahmen nicht getroffen werden müssen. Ob in diesen Fällen der Simulator Geofim die korrekte Lösung liefert, kann auf diese Art und Weise nicht verifiziert werden. Dafür ist entweder ein Vergleich mit anderen hydrogeologischen Modellen notwendig (siehe z.B. das internationale HYDROCOIN-Projekt [7]) oder das Programm hat in einer Vielzahl von Anwendungen gezeigt, dass es die Geofiltration und Geomigration mit hinreichender Genauigkeit nachbildet.

In den folgenden Abschnitten wird nicht auf den Aufbau der numerischen Modelle, insbesondere auf die gewählte Diskretisierung eingegangen. Die vier nachfolgend beschriebenen Beispiele werden als Projekte Verify1, Verify2, ..., Verify4 bei der Installation von PCGEOFIM mit ausgeliefert und können vom Anwender jederzeit abgearbeitet werden.

### 4.1 Eindimensionale Grundwasserströmung (Verify1)

Die eindimensionale gespannte Grundwasserströmung mit Vorgabe einer konstanten Quellbelegung wird durch die Differentialgleichung

$$k_f d^2h/dx^2 = -q \quad (80)$$

beschrieben. An beiden Rändern bei  $x = 0$  und  $x = L$  wird eine Randbedingung 1. Art vorgegeben. Die analytische Lösung [3, S. 134] lautet

$$h(x) = h(0) + (h(L) - h(0)) x / L + q / k_f x (L-x) / 2, \quad (81)$$

PCGEOFIM simuliert diesen Fall, indem  $q$  in  $1/s$  durch die Grundwasserneubildung dividiert durch die Mächtigkeit ersetzt wird. Das Ergebnis der Simulation zeigt Abbildung 24.

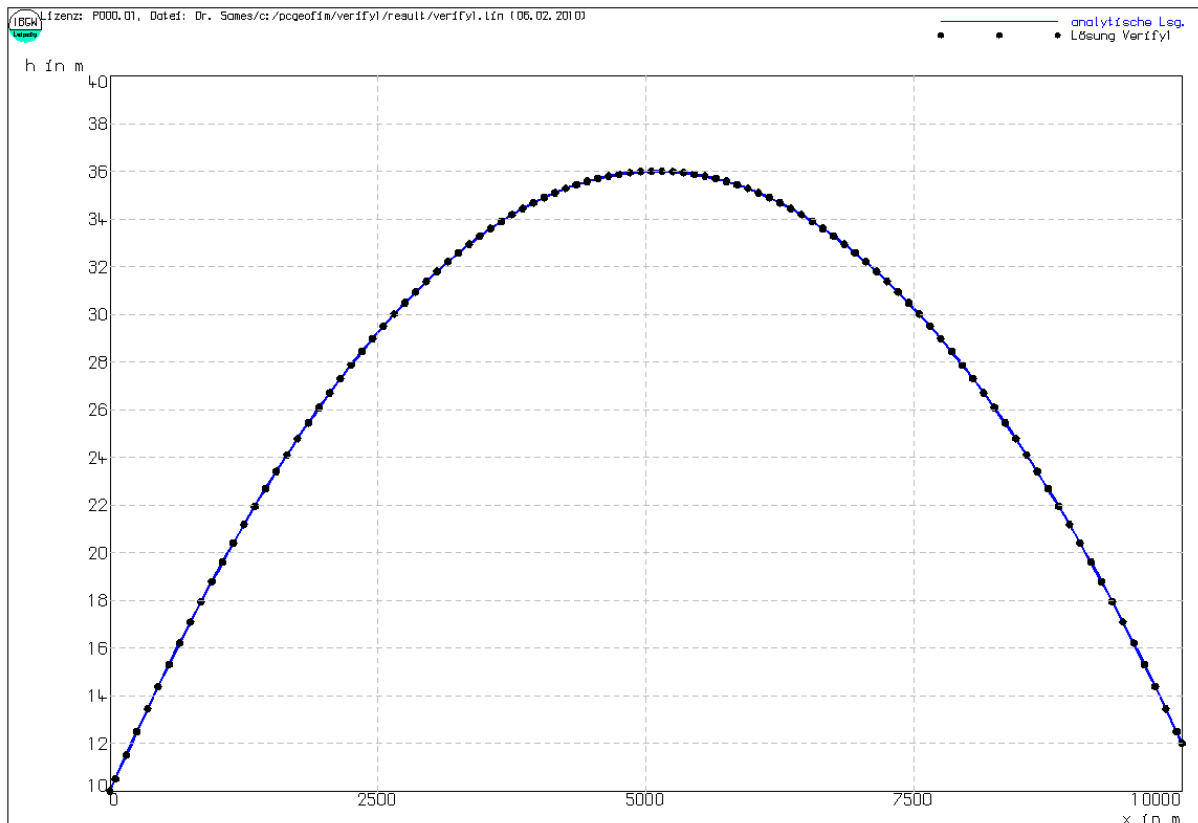


Abbildung 24: Vergleich analytische und PCGEOFIM-Lösung für die eindimensionale stationäre Strömung

## 4.2 Eindimensionaler Transport (Verify2)

Der eindimensionale Transport eines Tracers inklusive Abbau als Reaktion 1. Ordnung wird durch die partielle Differentialgleichung (siehe Gl. 54)

$$D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - w \frac{\partial \rho}{\partial x} - \lambda n_w \rho = n_w \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (65)$$

beschrieben. Zu Beginn sei  $\rho(x) = 0$  und bei  $x = 0$  wird eine Randbedingung  $\rho(x=0,t) = 100$  vorgegeben. Am Abstromrand bei  $x = L$  wird die Abstromrandbedingung angenommen, um die numerisch bestimmte Lösung mit der analytisch berechneten vergleichen zu können. Sie gilt nur für den unendlich ausgedehnten Strömungsraum [3, S. 374]:

$$\rho(x,t) = 50 \left\{ \exp\left(\frac{x(w-v)}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(x-vt/n_w)}{\sqrt{4Dt/n_w}}\right) + \exp\left(\frac{x(w+v)}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(x+vt/n_w)}{\sqrt{4Dt/n_w}}\right) \right\} \quad (66)$$

mit  $v = \sqrt{w^2 + 4D\lambda n_w}$  und  $D = \delta_{Lh} w$ . Dabei bezeichnen  $w$  die Darcy-Geschwindigkeit und  $\rho$  die Partialdichte. Abbildung 25 zeigt den Vergleich, wenn die Front die Hälfte des Weges zurückgelegt hat.



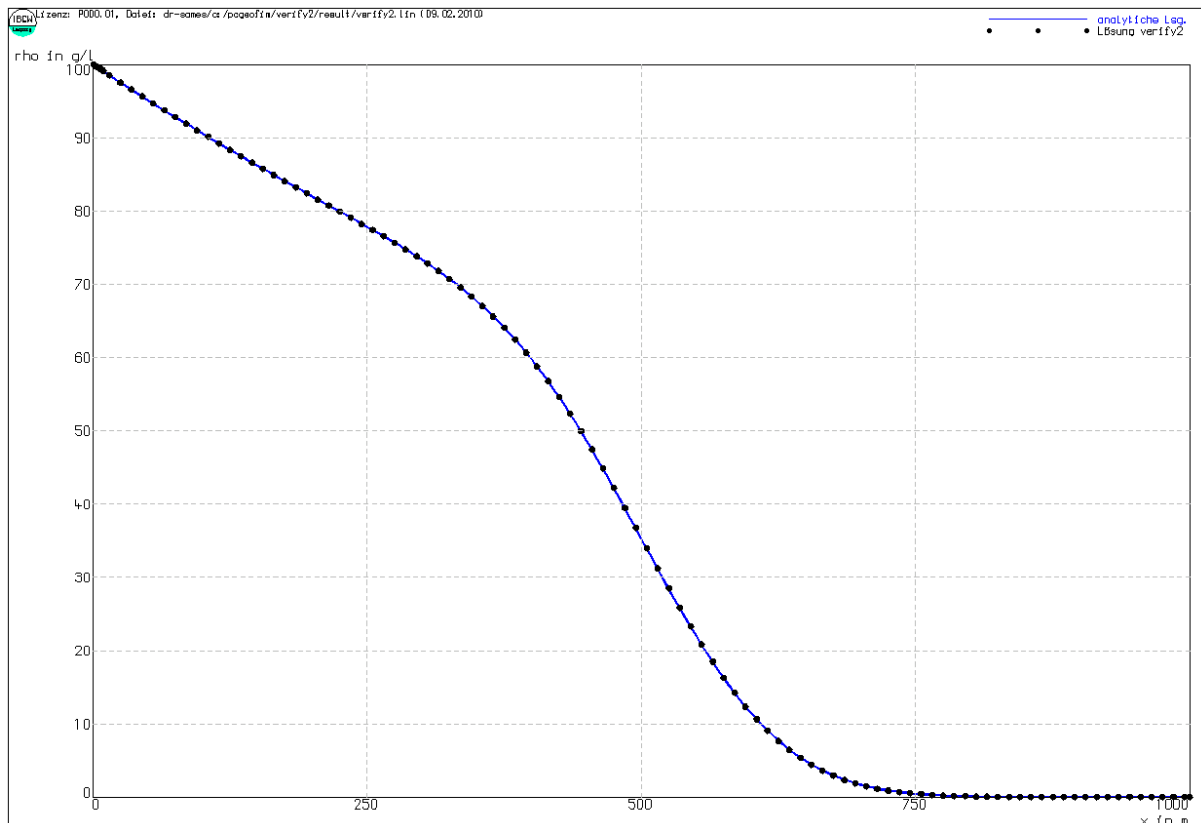


Abbildung 25: Vergleich analytische und PCGEOFIM-Lösung für den eindimensionalen Transport

### 4.3 Zeitlich begrenzter Störfall in paralleler Grundwasserströmung (2D, $v_y = 0$ , Verify3)

Es soll nun die Migration im zweidimensionalen Falle betrachtet werden. Die partielle Differentialgleichung hat die Form

$$D_L \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} - w \frac{\partial \rho}{\partial x} = n_e \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (67)$$

wenn das Grundwasser in x-Richtung strömt. Nach [2, S.459] ist die Lösung dieses Problems für den Fall Anfangs- und Randbedingungen Null, Einspeisung einer Schadstoffmenge  $m_s$  über einen im Vergleich zur Beobachtungszeit kleinen Zeitraum am Ort  $x_0, y_0$  durch

$$\rho(x,y,t) = \frac{m_s}{4\pi \Delta z t \sqrt{D_L D_T}} \exp \left[ -\frac{(x-x_0-wt/n_e)^2}{4D_L t / n_e} \right] \exp \left[ -\frac{(y-y_0)^2}{4D_T t / n_e} \right] \quad (68)$$

gegeben. Die Abbildung 26 stellt die horizontale Grundwasserströmung mit einer Geschwindigkeit von 1 m/d dar. Gezeigt wird auch der Schadstofftransportweg. Die Abbildung 27 zeigt einen Ausschnitt aus dem Isolinenplan für den Schadstoff. Praktisch ist kein Unterschied zwischen numerischer und analytischer Lösung festzustellen.

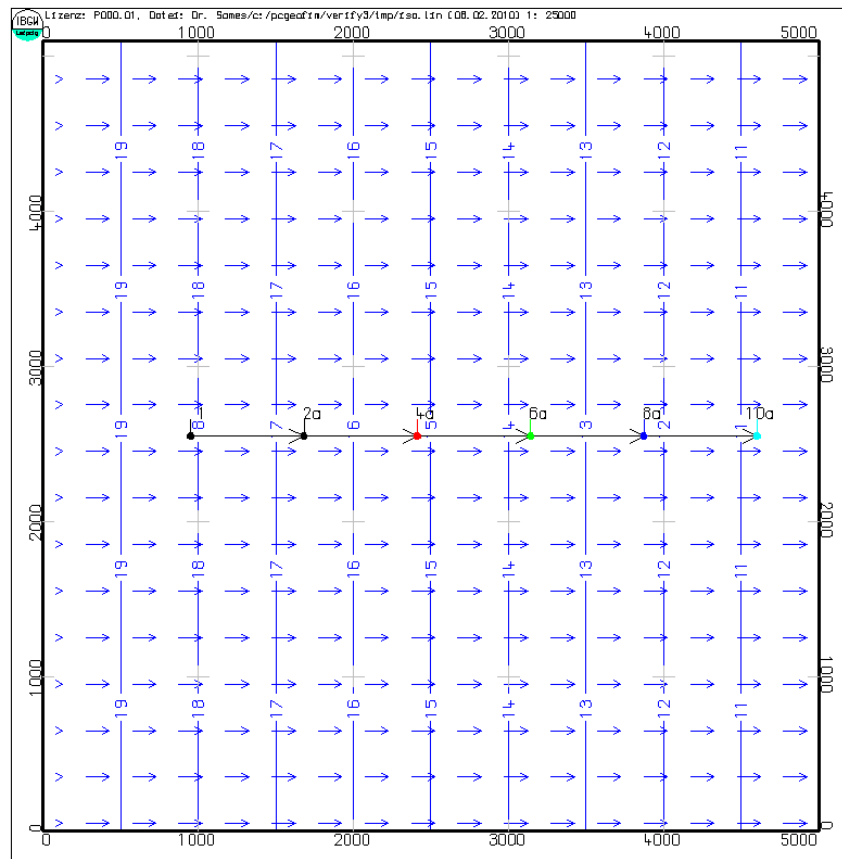


Abbildung 26: Isolines der Standrohrspiegelhöhe mit Fließpfeilen ( $v = 1 \text{ m/d}$ ) und dem Schadstofftransportweg

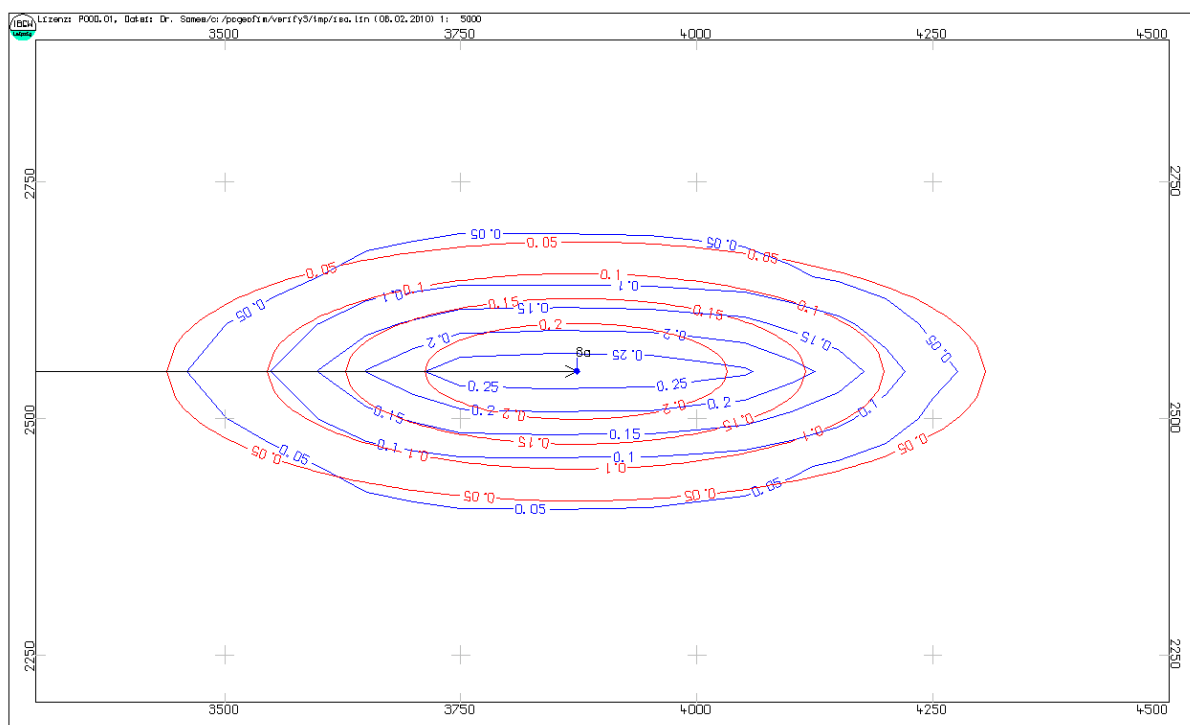


Abbildung 27: Vergleich analytische und PCGEOFIM-Lösung für den zweidimensionalen Transport (Die Grafik enthält auch den Wanderpunkt mit benötigter Laufzeit)

#### 4.4 Zeitlich begrenzter Störfall in paralleler Grundströmung (2D, $v_x = -v_y$ , Verify4)

Etwas anders sieht es aus, wenn die Strömung nicht parallel zum Gitter, sondern über die Ecken jedes Gitterelementes erfolgt. Es gilt auch in diesem Falle die Lösung (68), nur ist eine Drehung des Koordinatensystems um  $225^\circ$  um den Startpunkt  $x_0, y_0$  vorzunehmen. Die Abbildung 28 zeigt das Ergebnis: Durch die diagonale Anströmung der Gitterelemente bei einer Gitter-Peclet-Zahl von 2 tritt eine zusätzliche numerische Dispersion auf, die nur durch eine Verkleinerung der finiten Volumina verringert werden kann.

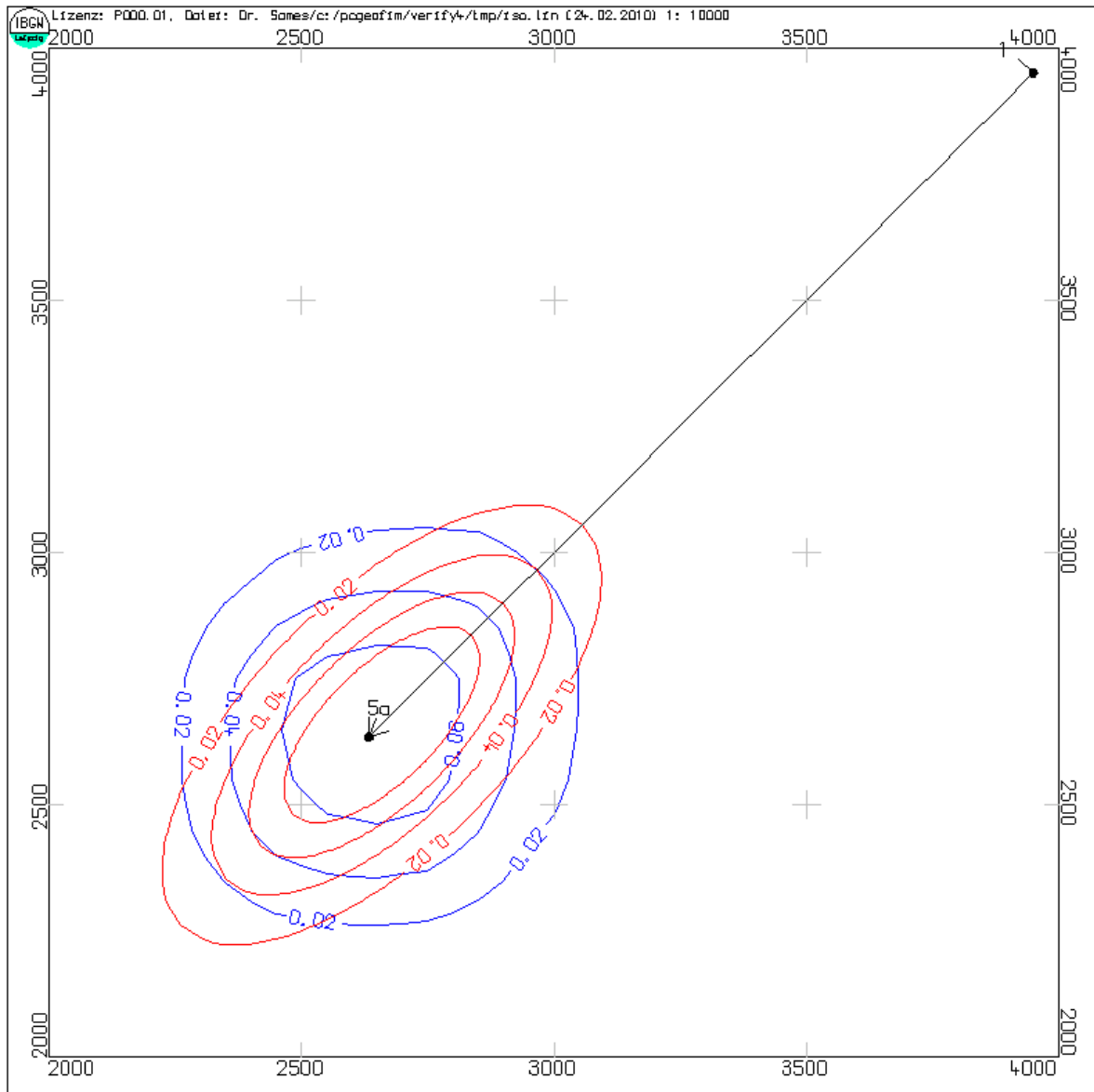


Abbildung 28: Vergleich analytische und PCGEOFIM-Lösung für den zweidimensionalen Transport (die Grafik enthält am oberen Rand den Schadstoffherd und auch den Wanderpunkt mit benötigter Laufzeit)

Bei einer Gitter-Peclet-Zahl von 0,4 wird auch bei schräger Anströmung des Gitters der Schadstofftransport annähernd korrekt berechnet. Um dies zu zeigen, wurde eine Lupe mit der Teilung 5 in x- und in y-Richtung für die finiten Volumina  $IS = 2$  bis 39 und  $JZ = 2$  bis 39 kreiert.

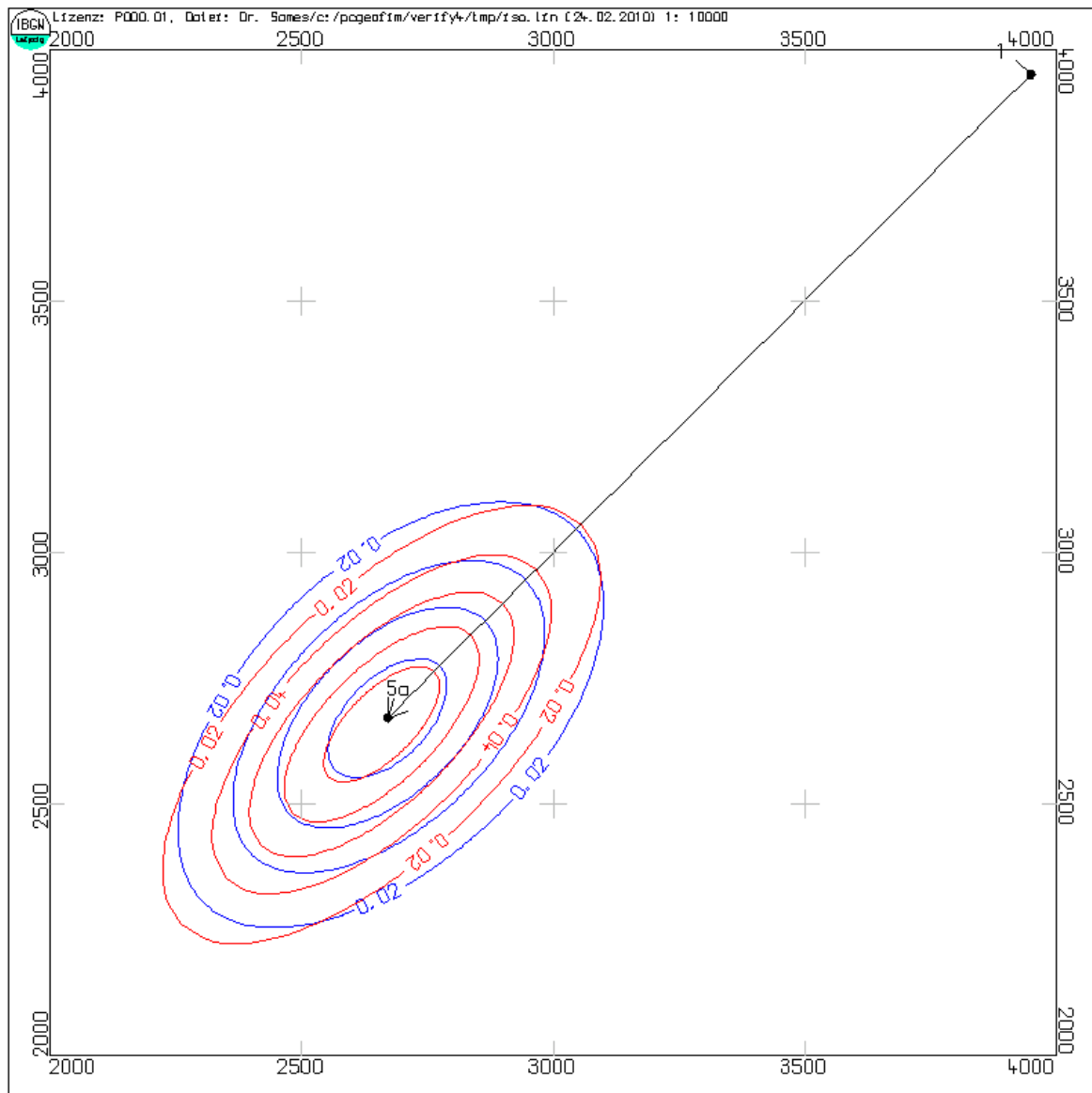


Abbildung 29: Vergleich analytische und PCGEOFIM-Lösung für den zweidimensionalen Transport bei einer Gitter-Peclet-Zahl von 0,4

## 5 Literatur

- [1] Busch, K.-F., L. Luckner und K. Tiemer: Geohydraulik, Gebrüder Borntraeger, Berlin Stuttgart 1993
- [2] DVWK-Fachausschuss "Grundwasserhydraulik und -modelle": Merkblätter zur Wasserwirtschaft - Voraussetzungen und Einschränkungen bei der Modellierung der Grundwasserströmung, Verlag Paul Parey, Hamburg und Berlin 1985
- [3] Häfner, F., D. Sames und H.-D. Voigt: Wärme- und Stofftransport, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York 1992
- [4] Häfner, F., u.a.: Simulation der Gewässergüte - Neue Möglichkeiten der Numerik mit dem FRONT LIMITATION Algorithmus, Proceedings des DGFZ e.V. 8 (1995), 235-249
- [5] Luckner, L. und M. Schestakow: Simulation der Geofiltration, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig 1975
- [6] Shamir, U. J., and D.R.F. Harleman: Numerical solutions for dispersion in porous mediums. Water Resour. Res. 3 (1967) 2, 557 - 581
- [7] Swedish Nuclear Power Inspectorate: The International HYDROCOIN Project - Background and Results, OECD, Paris 1987
- [8] Müller, Mike, et al.: Entwicklung eines umweltschonenden und effizienten Verfahrens zur Entwässerung oberflächennaher Lockergesteine im Bergbau und Bauwesen unter Nutzung der verlaufsgesteuerten Horizontalbohrtechnik (HDD-Brunnen), Ingenieurbüro für Grundwasser GmbH, TU Bergakademie Freiberg, Florack GmbH, MIBRAG Mitteldeutsche Braunkohlengesellschaft mbH, 2009