

**Die Entwicklung der Grundwasserberechnungen
der letzten Jahrzehnte
– vom elektrischen Papier
zum numerischen Grundwassermodell -**

Prof. Dr.-Ing. Hans-Peter Lühr

Vortrag anlässlich der Verabschiedung von Heinz Armbruster
auf dem

BAW-Kolloquium “Wechselwirkung Bauwerk – Grundwasser”

Karlsruhe, 08. Oktober 2003

1. Historischer Abriss der Grundwasserbewegung

Im Altertum bis ins 15. Jahrhundert herrschten bezüglich des Hydrologischen Kreislaufes nur philosophische Spekulationen vor, so HOMER (um 1000 v. Chr.), THALES VON MILET (um 624 bis um 543 v. Chr.), PLATON (427 bis 347 v. Chr.) und ARISTOTELES (384 bis 322 v. Chr.) in Griechenland, LUCRETIUS, SENECA (4 v. Chr. bis 65 n. Chr.) und PLINIUS in Rom. Hinweise auf Grundwassernutzung und -erschließung sind auch aus dem Alten Testament und aus dem Koran bekannt.

Durch die bewusste Trennung von Feldbeobachtungen, Versuchen und praktischen Anwendungen entstand eine große Lücke zwischen dem Erkenntnisstand der theoretischen Überlegungen und dem technischen Niveau der praktischen Anwendung. Die wissenschaftliche Dogmatik, die während einer Zeitspanne von fast 2000 Jahren geschaffen und weiterentwickelt worden ist, erreichte in der Zeit der Scholastik (ca. 1250 bis 1450 n. Chr.) eine große wissenschaftliche Autorität in den Geowissenschaften. Sie ist verknüpft mit den Namen ALBERTUS MAGNUS (1193 bis 1280) und THOMAS VON AQUIN (1225 bis 1274). Sie hielt sich noch bis ins 18. Jahrhundert hinein.

Die eigentliche Geschichte der **Geohydraulik als Wissenschaft** beginnt in der Mitte des vorvorigen Jahrhunderts. Nachdem POISEUILLE (1839) und HAGEN (1839) das Durchlaufgesetz bei Kapillarröhren untersucht hatten, gelang es HENRI DARCY (1803 bis 1858), die mathematische Grundbeziehung des Fließens von Grundwasser durch poröse Medien zu bestimmen, veröffentlicht 1856. Aufbauend auf der Darcy-Gleichung gab JULES DUPOUIT 1863 erstmalig eine Gleichung zur Berechnung des Grundwasserzuflusses zu einem Brunnen bekannt. Der Leipziger Ingenieur ADOLPH THIEM modifizierte 1870 diese Gleichung so, dass sie zur Berechnung der hydraulischen Eigenschaften eines Grundwasserleiters Verwendung finden konnte. Er bediente sich dabei eines Pumpversuches aus einem Brunnen bei Beobachtung der Absenkung benachbarter Brunnen. Diese Methode wurde durch ihn und seinen Sohn G. THIEM (1906) ausgebaut und verfeinert.

Moderne mathematische Methoden verwendete erstmalig der österreichische Hydrauliker PHILLIPP FORCHHEIMER (1886). Er führte das Konzept der Äquipotenzialflächen und ihre Beziehung zu den Stromlinien ein und wendete erstmals die Laplace-Gleichung und die Spiegelungsmethode an. Ähnliche theoretische Ableitungen entwickelte C. S. SLICHTER (1899) in den USA.

Einen Fortschritt für die Geohydrologie bedeutete die Entwicklung einer Gleichung für den nichtstationären Zufluss zu einem Brunnen durch den amerikanischen Wissenschaftler CHARLES v. THEIS im Jahre 1935. In den späteren Jahren haben C. E. JACOB und andere die Anwendbarkeit der Theis-Gleichung durch Modifikation für zahlreiche Randbedingungen erweitert. Erwähnenswert ist auch die Entwicklung der Grundwasserbewegung in porösen Medien durch die Arbeiten von U. MUSKAT (1937), der sich mit dreidimensionalen Problemen beschäftigte, sowie die Untersuchungen von U. K. HUBBERT (1940) zum Verständnis des Flüssigkeitsstromes und zur Anwendung der Hydrodynamik auf die Erforschung von Erdöl und Erdgas.

Die Anwendungsmöglichkeiten der analytischen Methoden wurden befruchtet durch die Arbeiten von N. K. GIRINSKY und G. N. KAMENSKY, welche die Grundideen des Flüssigkeitsstromes als sogenannte quasi-eindimensionale Probleme entwickelten. Die Fortschritte dieser Methode führten zur Behandlung ebener und quasi-ebener Strömungen. Die Grundlage der Theorie der zweidimensionalen Strömung befindet sich in den Studien von N. N. PAVLOVSKY (1955/56), der die Shukowskij'sche Funktion anwendete und zusammen

mit V. V. VEDERNIKOW das Hodographenvorhaben erarbeitete.

Von maßgebender Bedeutung war die Arbeit von P.J. POLUBARINOVA-KOCHINA (1962), die Lösungen veröffentlichte, welche mit Hilfe der analytischen Theorie der Differentialgleichungen vorgenommen wurden. Unter Anwendung des Hilbert-Riemann-Problems entwickelte S. N. NUMEROV die sogenannte Methode der Grenzwertprobleme.

Zur Lösung praktischer Probleme der Bestimmung der Grundwasserbewegung wurden physikalische, analoge, mathematische und hybride Modelle auf der Grundlage der aus dem Strömungsgesetz und der Kontinuitätsgleichung abgeleiteten Bewegungsgleichung mit Hilfe moderner Rechentchnik entwickelt und beschrieben, so z.B. durch: U. DE WIEST (1965), W.C. WALTON (1970,1979), J. BEAR (1972), H.-P. LÜHR u. K. ZIPFEL (1975), G. F. PINDER & W. G. GRAY (1977), J. BOONSTRA & N. A. DE RIDDER (1981) u. a. m.

2. Grundlagen der Grundwasserbewegung

Grundwasserleiter haben einige ausgeprägte Besonderheiten, die die Anwendung von Modellen erforderlich machen. Die erste Besonderheit ist ihre relative Unzugänglichkeit. Der Geologe kennt den Untergrund meist nur „nadelstichweise“ aus wenigen Bohrungen und Ausstrichen. Aus diesen Punktdaten muss er den vollständigen Grundwasserleiter rekonstruieren. Wegen des Informationsmangels geht dies nicht ohne Modellvorstellungen und Hypothesen. Jede die Bohrdaten interpolierende Vorstellung über die Beschaffenheit des Untergrunds ist ein Modell, das Züge der Wirklichkeit inkorporiert, ohne je den Anspruch auf absolute Wahrheit stellen zu dürfen. Dies gilt auch für mathematische Aquifermodelle. Diese bauen auf dem strukturellen Konzeptmodell des Geologen auf und belegen es mit quantitativen Angaben z.B. zur Durchlässigkeit oder Grundwasserneubildungsrate. Auf dieser Basis ist dann die Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Grundwasserleiter möglich.

Ohne Modellvorstellungen gibt es keine Dateninterpretation in den Geowissenschaften. Oft werden Modellvorstellungen unbewusst verwendet, ohne dass man sich über deren Beschränkungen Rechenschaft ablegt. So verwendet der Geologe, der einen Pumpversuch nach dem Verfahren von THEIS auswertet, implizit die Modellvorstellung, dass der betreffende Aquifer zweidimensional, homogen, isotrop und unendlich ausgedehnt ist. Ein numerisches Aquifermodell dagegen kann kompliziertere Topographie und Randbedingungen, Heterogenität, vertikale Struktur etc. berücksichtigen.

3. Aufgabenstellungen in der Grundwasserhydrologie

Die Aufgabenstellungen sind grundsätzlich zweifach. Zum einen ist an Hand von auf Messdaten eine Interpretation der Vergangenheit oder des Ist-Zustandes zu untersuchen. Zum anderen sind Prognosen zur Erfassung von Veränderungen oder zukünftigem Verhalten von Grundwassersystemen zu untersuchen. Wichtigste Einsatzbereiche der Grundwassermodelle sind: Grundwasserüberwachung/Grundwasserschutz, Grundwassersanierung, integrierte Grundwasser-/Oberflächenwasserbewirtschaftung, Grundwasserbewirtschaftung, Bauplanung und Umweltverträglichkeitsuntersuchungen sowie als spezielles Anwendungsgebiet der Bergbau.

Aufgabenstellungen in speziellen Sinne sind:

- Interpretation von beobachteten Grundwasserhöhen,
- Bestimmung von Grundwasserbilanzen bzw. von Elementen der Grundwasserbilanz,
- Vorhersage von Grundwasserabsenkungen und -aufhöhungen,
- Ermittlung von Schutzzonen und Einzugsgebieten für Trinkwasserfassungen,
- Planungen von Grundwasserentnahmen,
- Ermittlung der Um-, Unter- und Durchläufigkeit von Dämmen und Deichen,
- Baugrubenabsenkungen,
- Vorbereitung von Transportberechnungen.
- Interpretation von Konzentrationsdaten,
- Bilanzierung des Verbleibs von Schadstoffen in der Umwelt,
- Vorhersage der Ausbreitung einer Verschmutzung,
- Planung und zum Entwurf von hydraulischen Abwehr- und Sanierungsmaßnahmen,
- Planung von Erkundungs- und Überwachungsprogrammen,
- Risikoabschätzung bei Altlastenbewertung und Standortwahl.

Für diese Fragestellungen sind entsprechende Modelle für den Grundwasserkörper und den vorhandenen Prozessen in dem Untergrund zu erstellen, da dieses nicht unmittelbar zu beobachten ist. Diese physikalischen, chemischen und biologischen Zustandsgrößen und Prozesse werden mit sog. Grundwassermodellen erfasst. Sie beschreiben die Strömungs- und Stofftransportprozesse im Grundwasser. Sie dienen zur Erfassung und Prognose der Grundwasserverhältnisse bei veränderten Nutzungsbedingungen und zur Untersuchung von Auswirkungen vorrangig anthropogener Eingriffe auf die Grundwassergüte.

4. Mathematische Grundlagen

Bei der Behandlung von Grundwasser unterscheidet man

- die reine konvektive Strömung und
- den Transport von Stoffen.

Strömungsmodelle beschreiben die Wasser- bzw. Fluidbewegung im Boden. Dagegen beschreiben Transportmodelle die Verfrachtung und Vermischung von im Wasser gelösten Stoffen. Jedes Transportmodell hat ein Strömungsmodell als Grundlage.

Die Bewegungsgleichung (konvektive Strömung) ergibt sich aus der dynamischen Bewegungsgleichung (Darcy-Gesetz) und dem Massenerhaltungsgesetz. Für den homogenen, isotropen Grundwasserleiter lauten die Beschreibungsgleichungen:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} = \frac{S_0}{k_f} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{W_0}{k_f}$$

$$-\frac{Va}{R} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{D_L}{R} \frac{\partial c}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{D_T}{R} \frac{\partial c}{\partial n} \right) + \sum W = \frac{\partial c}{\partial t}$$

Darin bedeuten: W_0 Einspeisung bzw. Entnahme von Grundwasser in bzw. aus dem betrachteten Grundwasserkörper

W Änderung der Konzentration eines Stoffes durch Abbau-, Anlagerungsprozesse, chemische Reaktionen, Advektion, Dispersion etc.

Diese Gleichungen sind Differentialgleichungen 1. Ordnung, die ein Rand- und Anfangswertproblem darstellen und die zur Beschreibung der Grundwasserverhältnisse einer Lösung zugeführt werden müssen.

5. Grundzüge eines Grundwassermodells

Ein Grundwassermodell besteht aus zwei wesentlichen Bausteinen (Abb. 1):

- dem physikalischen, chemischen, biologischen Modell für die Strömung des Grundwassers und den Transport von Stoffen; hierzu zählt auch die Dimensionsreduzierung, um zu einem vereinfachten, aber physikalisch, chemisch oder biologisch realen Modell zu kommen;
- dem Lösungsverfahren.

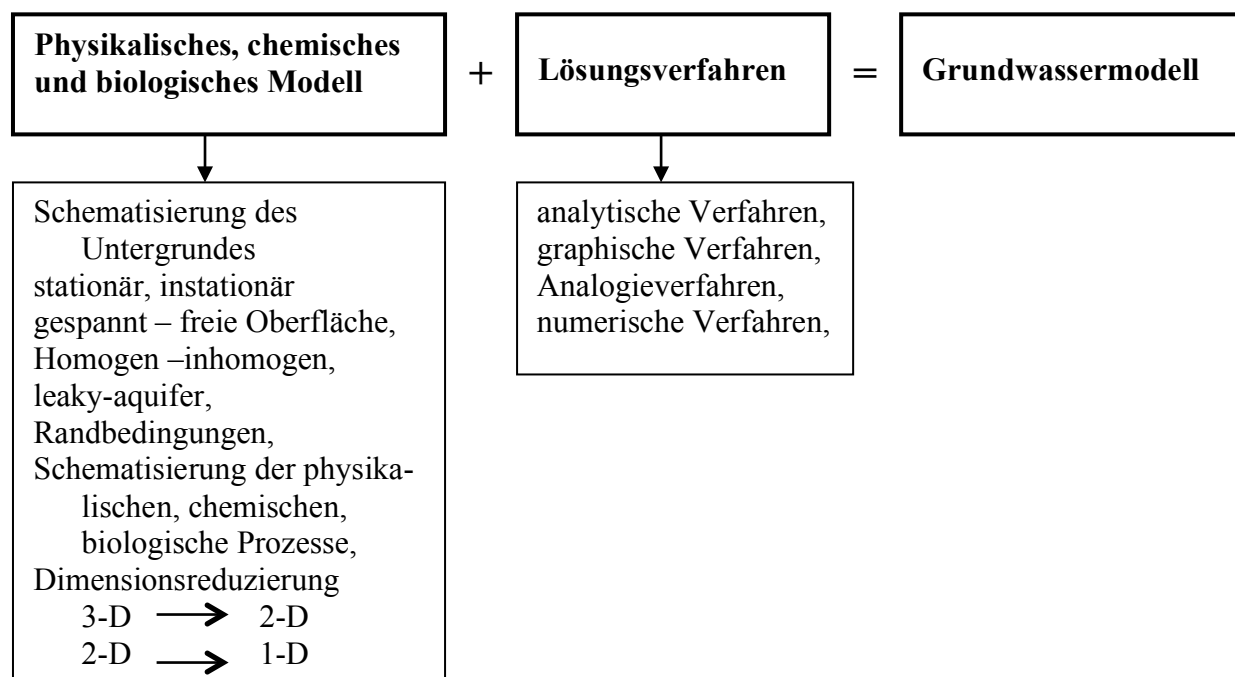


Abb.1: Grundzüge eines Grundwassermodells

Der Aufbau des physikalisch, chemisch, biologischen Modells der Realität stellt dabei die eigentliche Grundwasseraufgabenstellungen dar. Es erfordert die Fachkenntnisse des Geologen, des Chemikers, des Biologen und des Ingenieurs, um die physikalischen, chemischen und biologischen Zustandsgrößen und Prozesse in der Realität erfassen und in ein angepasstes Grundwassermodell zu überführen.

Grundwasserströmungsmodellen liegen relativ einfache, überwiegend lineare Mechanismen zu Grunde. Sie sind anwendungsorientiert und auf eine quantitative Interpretation der Grundwasserströmung ausgelegt. Sie unterscheiden sich daher von vielen Ökosystemmodellen aus anderen Bereichen (z. B. Räuber-Beute-Modelle), die weniger stark mechanistisch orientiert sind und oft für eine mehr qualitative Systembeschreibung ausgelegt sind.

Voraussetzung für jede Simulation dynamischer Prozesse ist die Existenz nutzbarer Funktionsmodelle. Mathematischen Modellen und ihrer Bildung fallen dabei eine Schlüsselrolle zu. Geohydraulische Berechnungen und die analoge oder digitale Simulation geohydraulischer Prozesse basieren auf mathematischen Modellen der Strömungs- und Transportprozesse fluider Phasen in porösen Medien.

Jedes Modell ist ein Abbild des zu untersuchenden Systems. Zu jedem Modell gibt es ein Original (das zu untersuchende System). Die Betrachtung von Modellen, losgelöst von dieser Relation, ist wenig sinnvoll, ein Tatbestand, den man sich immer wieder bewusst machen sollte.

6. Lösungsverfahren

6.1 Historische Entwicklung

Zur Lösung dieser Differentialgleichungen stehen eine Reihe von Lösungsverfahren zur Verfügung (Tab. 1).

Tab. 1: Übersicht über Lösungsverfahren

- analytische Lösungsverfahren - direkte Integration der Differentialgleichung, - Fragmentmethode, - Superpositionsmethode, - Funktionentheorie (konforme Abbildungen), - Hodografenverfahren.		
•	Graphische	Lösungsverfahren
	(Potentialnetz)	
•	Elektrische Analogieverfahren	
•	Numerische Verfahren	
	-	Finite Differenzen,
	-	Finite Elemente.

Alle Verfahren haben im historischen Ablauf ihre Bedeutung gehabt. Die entscheidende Zäsur stellt die Entwicklung der Computer dar. Dieser Zeitpunkt kann auf **Ende der 60-iger Jahre** des letzten Jahrhunderts gelegt werden. Zu dieser Zeit waren die elektrischen Analogieverfahren (siehe unten) das Maß aller Dinge für die Lösung praktischer Verfahren. In Deutschland waren die TH Hannover (Prof. Billib-Institut) und die TH Dresden (Prof. Busch-Institut) die maßgeblichen Einrichtungen. In Ingenieurbüros waren sie nicht verfügbar, da sie u.a. auch eine Reihe von Investitionen nach sich zogen. Außerdem war die Ausbildung in

Sachen Grundwasserströmungen an den Hochschulen bis auf die Grundlagen in Hydromechanik nicht entsprechend ausgerichtet. Auf Grund mangelnder Finanzmittel wick LÜHR 1969 auf die numerischen Lösungsverfahren aus, da an der TH Karlsruhe eines der ersten Rechenzentren mit der Zuse Z 23 eingerichtet worden war. Mit der Overrelaxationsmethode (im Prinzip dem Differenzenverfahren) wurden die ersten Programme in ALGOL geschrieben, und zwar auf Lochstreifen.

Zu der Zeit gab es bei der DFG einen Forschungsschwerpunkt „Mathematische Modelle in der Wasserwirtschaft“, in dem hinsichtlich Grundwasser eine Reihe von Forschungsvorhaben liefen. Auf Kolloquien wurde dann ernsthaft und heftig gestritten, ob numerische Modelle besser und genauer sein können oder nicht. Es entbrannte ein intensiver Wettstreit zwischen dem Zentrum Hannover und Karlsruhe. Das Zentrum Dresden war durch die politische Entwicklung von den Möglichkeiten des Computereinsatzes abgeschnitten. Als Ausdruck dieser sich abzeichnenden Zäsur ist ein noch 1970 ergangene Forschungsauftrag der VW-Stiftung an das Prof. Billib-Institut zu sehen, bei dem rund 1,2 Mio DM für die Entwicklung eines Hybridnetzwerkes (elektrisches Netzwerk, bei dem die Randbedingungen elektronisch gesteuert wurden) bereitgestellt wurden.

Mit der Dissertation von LÜHR 1972, in der er die gesamte Palette der verschiedenen Lösungsverfahren mit Hilfe einer Kosten-Effektivitäts-Analyse systematisch verglich und dem Grundwasser-Symposium 1974 in Karlsruhe, das von LÜHR und ZIPFEL gestaltet wurde, wurde der Durchbruch für die numerischen Lösungsverfahren geschaffen. Parallel dazu, von 1969 bis 1974 überschlug sich die Entwicklung der Computerentwicklung. Immer leistungsfähigere Rechner wurden installiert (in Karlsruhe an der TH und im Rechenzentrum des Kernforschungszentrums), so dass die Prognose von LÜHR in seiner Dissertation, dass zukünftig überall und zu jeder Zeit ausreichende Rechnerkapazität zur Verfügung steht, sich immer mehr bestätigte. Dabei ging der Fortschritt auch in die Richtung, dass die leidigen Lochstreifen, auf denen man die Programme schrieb, durch Lochkarten ersetzt wurden, was vor allem beim Korrigieren von Fehlern im Programm und bei der Dateneingabe erhebliche Erleichterungen brachte. Doch programmiert werden musste noch selber.

Seit Mitte der 70-iger Jahre des letzten Jahrhunderts haben nur noch numerische Lösungsverfahren eine Bedeutung. Alle anderen Lösungsverfahren haben überwiegend nur noch akademischen Wert.

Und hier ist noch einmal eine Zäsur festzustellen. Etwa ab **Mitte der 90-iger Jahre** des letzten Jahrhunderts können DV-Programme für Grundwasserströmungsaufgabenstellungen kommerziell erworben werden. KINZELBACH bot 1995 erstmals sein ASM-Programm an. Es musste nicht mehr direkt programmiert werden, sondern „nur noch“ die Dateneingabe des physikalischen-chemischen-biologischen Modells realisiert werden. Zeitgleich wurden vor allem in den USA ebenfalls Programme entwickelt. In diese Zeit fallen dann auch Aktivitäten wie „Wettrechnen“, um heraus zu finden, welches Programm am Leistungsfähigsten ist. Dahinter standen neben wissenschaftlichen Zielen auch kommerzielle Interessen.

Zur Zeit haben sich eine Reihe von Programmpakete am Markt durchgesetzt. Diese unterscheiden sich nicht in der Genauigkeit der Ergebnisse, sondern ausschließlich an Kriterien wie Eleganz der Realisierung der Randbedingungen im Programm, der Dateneingabe, der Ergebnisauswertung und –darstellung. Rechenzeit und Speicherkapazität, ein Problem der Anfänge der numerischen Lösungsverfahren spielen keine Rolle.

Die Arbeiten an TH Karlsruhe gingen 1975 auf die Uni Stuttgart (Prof. Kobus-Institut) über, das dieses Aufgabengebiet konsequent weiterentwickelt hat. Durch die Möglichkeiten des

kommerziellen Erwerbs und dem ständigen Zuwachs an leistungsfähigen Computern, speziell von Laptops, sind numerische Grundwassermodelle in jedem qualifizierten Ingenieurbüro mittlerweile verfügbar.

6.2 Charakteristika der Lösungsverfahren

Die **analytischen Lösungsverfahren**, die die Strömungsgleichung geschlossen lösen, sind nur für einfachste Fälle heranzuziehen. Geschlossene, analytische Lösungen sind z.B. die THEIS- und die HANTUSH-Funktion, die bei der Auswertung von Pumpversuchen eingesetzt werden. Die erforderlichen Annahmen wie unendlich ausgedehnter Aquifer, Isotropie, Homogenität etc. schränken die Anwendung dieser Lösungen stark ein und geben nur eine unvollkommene Beschreibung natürlicher Verhältnisse wieder. Für praktische Aufgabenstellungen sind diese Voraussetzungen für eine geschlossene, analytische Lösungen im allgemeinen nicht erfüllt.

Die **Graphische Lösungsverfahren**, die das mathematische Instrument der Potentialtheorie nutzt, haben keine Bedeutung mehr für die direkte Lösung von Grundwasseraufgabenstellungen. Allerdings sind ihre methodischen Grundlagen (Zeichnen von Strom- und Potentiallinien für ein Untersuchungsgebiet) zur Auswertung von numerisch gewonnenen Lösungen von Bedeutung, wenn das verfügbare Programmpaket über kein entsprechendes Auswertinstrument verfügt. In der Vorplanung kann es unter Umständen sehr nützlich sein, wenn man sich schnell einen groben Überblick über eine bestimmte Situation im Untersuchungsgebiet verschaffen muss.

Das auf der Einladung zum BAW-Kolloquium abgebildete Strömungsbild (Abb. 2) einer Wehrunterströmung ist ein klassischer Fall der graphischen Lösung oder auch der Auswertung.

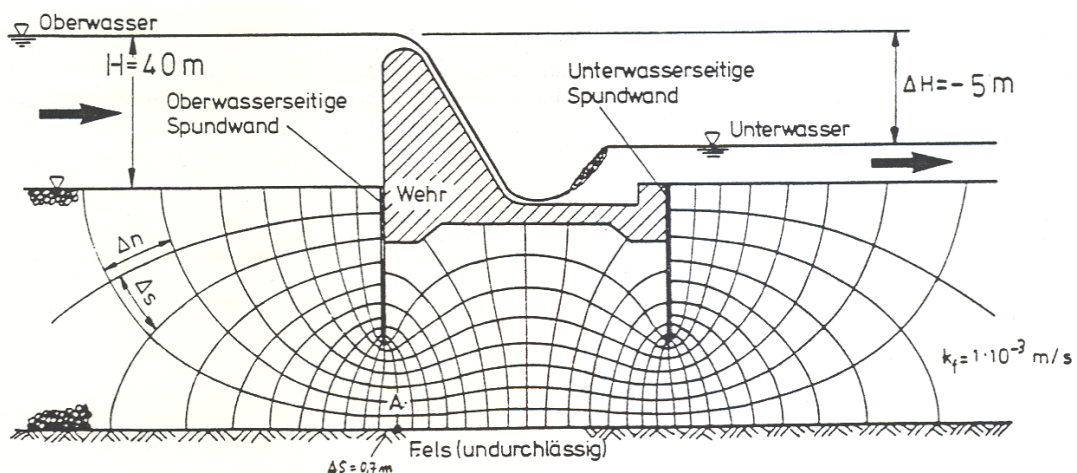


Abb. 2: Wehrunterströmung

Bei den **elektrischen Analogieverfahren** unterscheidet man:

- Elektrisch leitendes Papier (Kontinuumsmodell),
- Elektrolytischer Trog (Kontinuumsmodell),
- Widerstandsnetzwerk (diskretes Modell),
- Widerstands-Kapazitätsnetzwerk (diskretes Modell).

Ein analoges Modell ist ein System, dessen funktionelle Verhaltensweisen mit denjenigen des Originals im wesentlichen übereinstimmen. Der Analogienachweis wird durch Vergleich des mathematischen Modells des Originals mit dem mathematischen Modell des Analogiemodells geführt. Zwei physikalische Systeme gelten als analog, wenn ihre mathematischen Modelle bis auf die Bezeichnungen von Koeffizienten und Variablen übereinstimmen oder durch Transformation ineinander überführbar sind. Jeder physikalischen Größe oder Größengruppe des einen mathematischen Modells muss eindeutig und umkehrbar eine Größe oder Größengruppe des anderen in gleicher mathematisch funktioneller Stellung entsprechen, so dass sich Maßstabsbeziehungen zwischen den Größen beider Systeme ableiten lassen.

DARCY-Gesetz

$$\vec{V} = -k * \text{grad } h$$

OHMsches Gesetz

$$\vec{j} = -\sigma \text{ grad } U$$

Die Strömungsrate $\vec{V}$ und die Stromdichte $\vec{j}$, der Durchlässigkeitskoeffizient k und die spezifische elektrische Leitfähigkeit σ sowie die Standrohrspiegelhöhe h und das elektrische Potential U sind somit analoge Größen.

Während die Kontinuumsmodelle (elektrisch leitendes Papier und elektrolytischer Trog) geometrisch ähnlich der natürlichen Situation (maßstabsgerecht) sein müssen (Abb. 3 und 4),

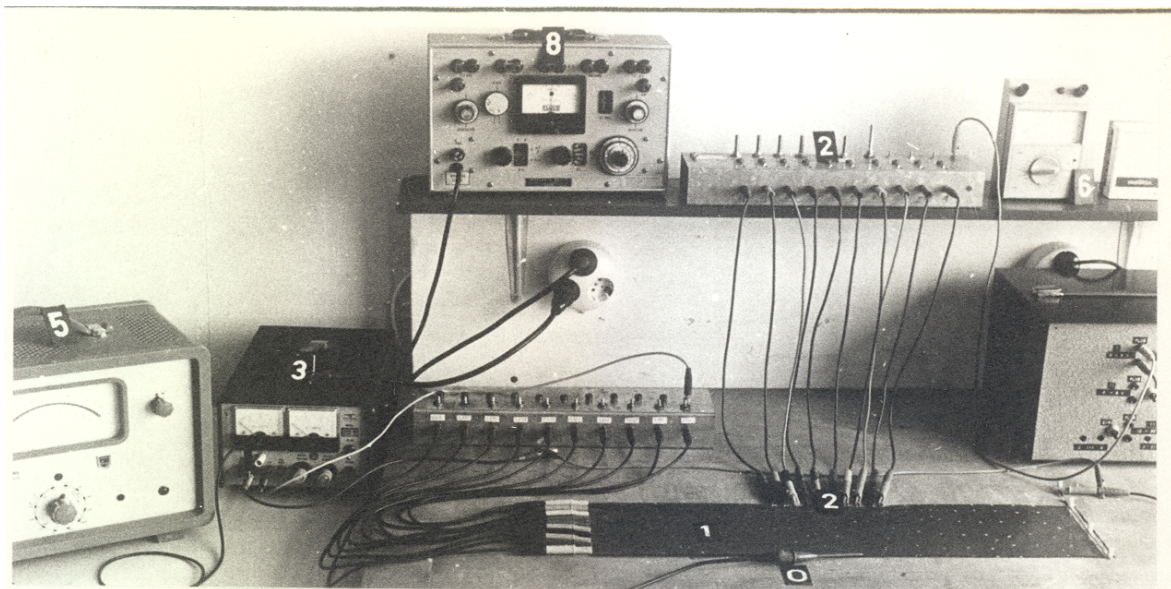


Abb. 3: Elektrisch leitendes Papier

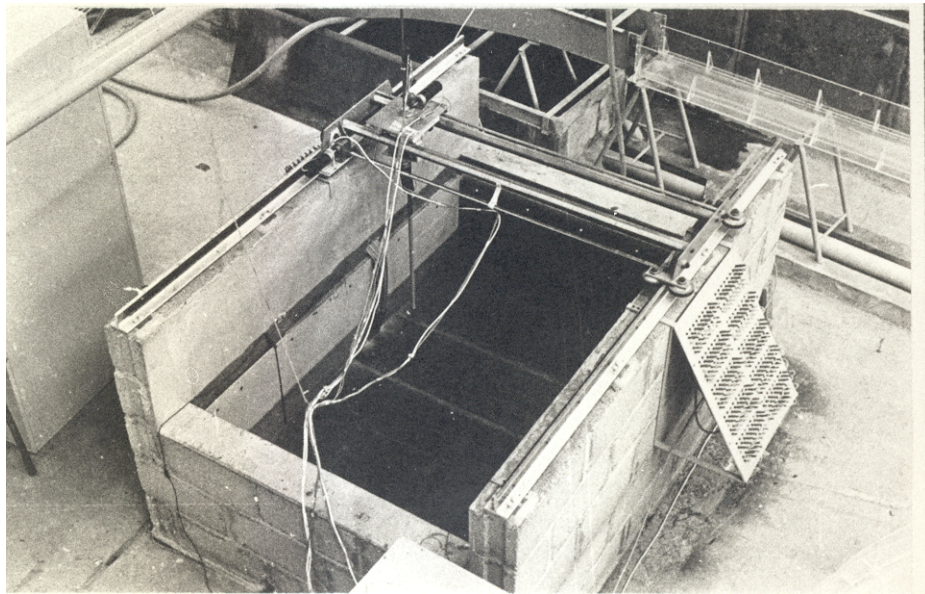


Abb. 4: Elektrolytischer Trog

lösen die diskreten Modelle das Untersuchungsgebiet in ein quadratisches oder rechteckiges Netz auf. Dabei werden die Knotenpunkte, an denen die Spannung gemessen werden kann, durch Ohmsche Widerstände verbunden. Für instationäre Strömungsfälle werden den Knotenpunkten kapazitive Widerstände (Kondensatoren) zur Berücksichtigung des Speicherkoeffizienten zugewiesen (Abb. 5).

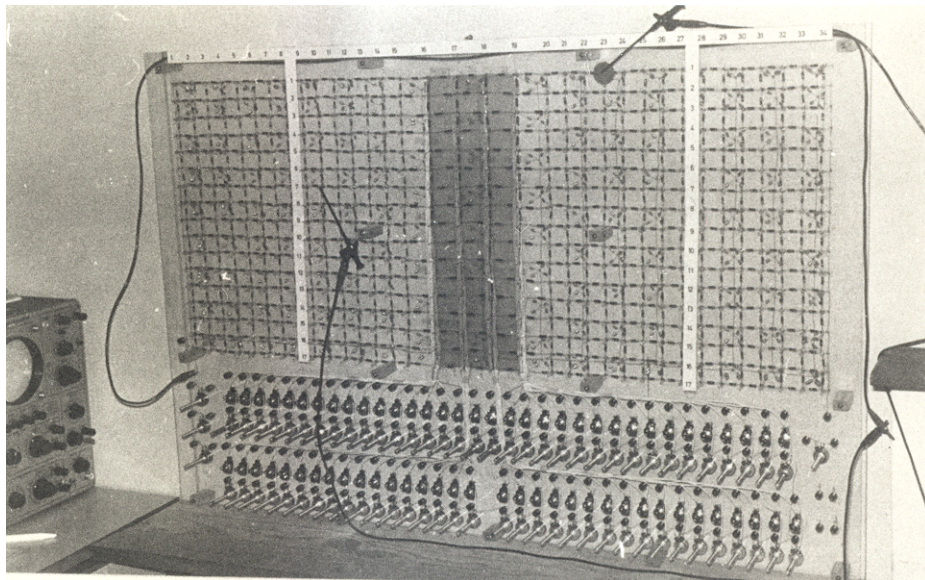


Abb. 5: Elektrisches Widerstands(kapazitäts)netzwerk

Bei den **numerischen Lösungsverfahren** haben sich die Finite-Differenzen-Verfahren und die Finite-Elemente-Verfahren durchgesetzt. Der augenfälligste Unterschied ist die Art der Diskretisierung des Modellgebiets. Beim Differenzen-Verfahren erfolgt die Diskretisierung durch rechteckige Zellen (i.d.R. quadratisch) (Abb. 6)., während im Finite-Elemente-Verfahren die Diskretisierung mit Elementen beliebiger Form (i.d.R. dreieckig) erfolgen kann (Abb. 7). Ein numerisches Strömungs- und Transportmodell stellt eine räumlich und zeitlich diskretisierte Wasserbilanz eines Gebietes dar.

Die Verwendung von Differenzen anstelle von Differentialen bringt es mit sich, dass das Modellgebiet kein räumliches Kontinuum mehr darstellt, sondern auf einem Modellgitter diskretisiert sein muss. Die Piezometerhöhen und damit die Geschwindigkeiten werden daher nicht überall im Modellgebiet berechnet, sondern nur an diskreten Gitterpunkten. Diese Gitterpunkte werden auch Berechnungspunkte oder Knoten genannt. Ebenso wird bei instationären Berechnungen das zeitliche Kontinuum durch diskrete Zeitpunkte ersetzt, an denen die neuen Höhen berechnet werden.

Über diesen Schritt der Diskretisierung wird die Differentialgleichung in ein Gleichungssystem von soviel Gleichungen wie es Knotenpunkte gibt, sog. Knotengleichungen. Wenn das Gleichungssystem erstellt ist, wird es mit einem Gleichungslöserverfahren gelöst. Hierzu bieten sich eine Lösung mit einem direkten und mit einem iterativen Gleichungslöser an.

Beim **direkten Gleichungslöser** wird die Koeffizientenmatrix z. B. mit dem Gauss-Jordan Eliminationsverfahren solange umgeformt, bis in der letzten Knotengleichung nur noch eine Unbekannte steht, die direkt ermittelt werden kann. Mit dieser Lösung wird dann rückwärts Knotengleichung für Knotengleichung gelöst. Der Nachteil des direkten Gleichungslösers besteht darin, dass die ganze Koeffizientenmatrix gespeichert werden muss. Dies kann bereits bei mittelgroßen Modellen zu Speicherproblemen führen. Bei einem Modellgebiet, das in 100×100 Zellen diskretisiert wurde, beträgt z. B. die Größe der Koeffizientenmatrix bereits $(100 \times 100) \times (100 \times 100) = 100$ Millionen Elemente. Aufgrund der symmetrischen Bandform der Koeffizientenmatrix verringert sich der Speicheraufwand zwar, er wächst aber überproportional mit der Anzahl der Zellen im Modell.

Aus diesem Grund werden in vielen Modellen **iterative Gleichungslöser** verwendet. Dabei muss immer nur ein Teil der Matrix, z. B. nur eine Zeile oder Spalte, gleichzeitig gespeichert werden.

Finite-Differenzen-Verfahren

Numerische Methoden verlangen eine räumliche und zeitliche Diskretisierung. Im Finite-Differenzen-Verfahren werden die Differentialquotienten durch Differenzenquotienten ersetzt. Der Aquifer wird dabei in ein rechteckiges Netz unterteilt, wobei im wesentlichen zwei Arten von Netztypen unterschieden werden können:

blockzentrierte und gitterzentrierte Netze

Im ersten Fall liegt der Knoten, an dem die Piezometerhöhe berechnet werden soll, im Zentrum der Zelle, während im zweiten Fall der Knoten mit dem Schnittpunkt der Gitterlinien zusammenfällt (Abb. 6). Die Unterschiede zwischen den Netztypen sind jedoch gering. Bei der Diskretisierung können die Knotenabstände il_x und il_y in x- und y-Richtung jeweils unterschiedlich groß gewählt werden.

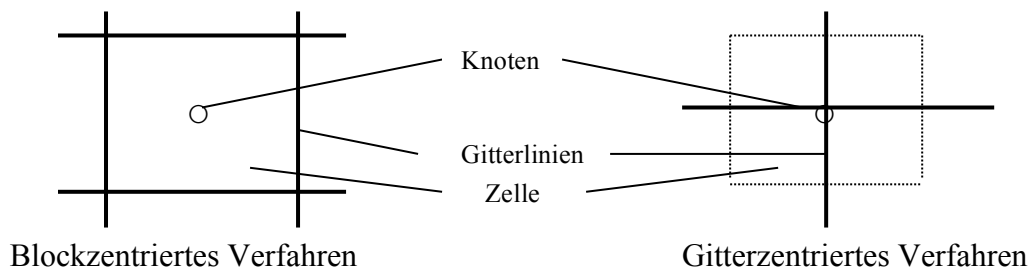


Abb. 6: Finite-Differenzen-Verfahren

Die Herleitung der Differenzengleichungen kann auf zwei Wegen erfolgen. Ein formaler, rein mathematisch ausgerichteter Ansatz besteht darin, die Differentialquotienten durch Differenzenquotienten zu ersetzen. Dieses erfolgt über die TAYLORreihenentwicklung. Der zweite Weg zur Ableitung der Knotengleichungen stellt eine physikalische Herleitung dar, indem die Kontinuitätsgleichung und das Gesetz von DARCY (dynamische Bewegungsgleichung) für jede Zelle über die Dauer eines Zeitintervalls der Länge Δt angewendet werden, mit der Annahme, dass ein horizontaler Wasseraustausch nur zwischen der Zelle und ihren vier direkten Nachbarzellen stattfindet. Das resultierende Gleichungssystem gestattet es, die Piezometerhöhen zu Ende des Zeitintervalls zu berechnen, vorausgesetzt, die Piezometerhöhen zu Anfang des Zeitschritts und die Randbedingungen sind bekannt.

Ein Berechnungsnetz eines Untersuchungsgebietes ist in Abb. 7 dargestellt.

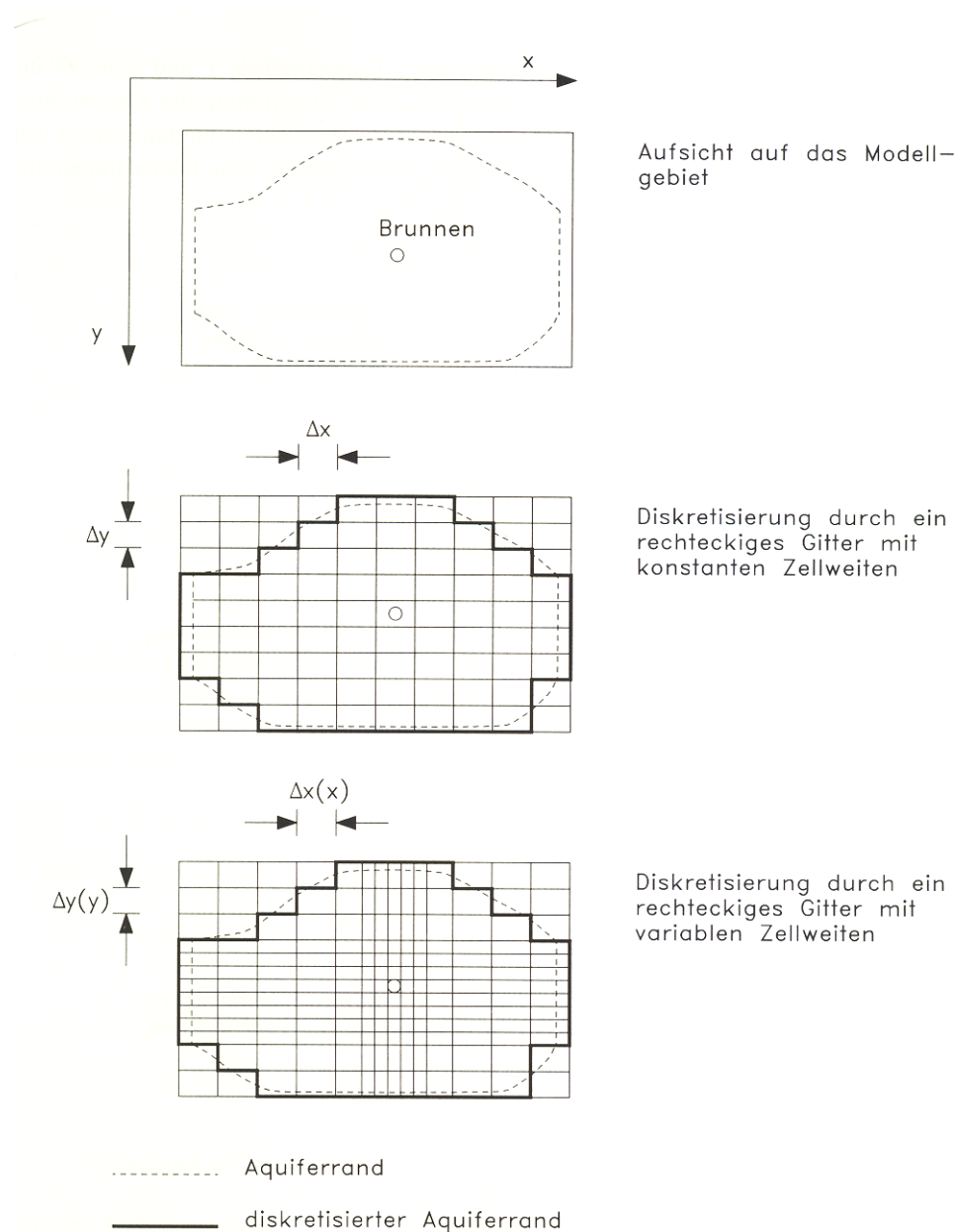


Abb. 7: Diskretisierung beim Finite-Differenzen-Verfahren

Finite-Elemente-Verfahren

Das Finite-Elemente-Verfahren unterteilt den Untersuchungsraum in Dreiecks- oder Viereckselemente. Die funktionelle Beschreibung der Ränder erfolgt durch geometrische Formfunktionen. Deshalb können die Seiten finiter Elemente auch gekrümmt sein (Abb. 8). Das Untersuchungsgebiet kann z. B. einheitlich durch Dreieckselemente oder gemischt durch Dreiecks- und Rechteckelemente finitisiert werden. Die erstere Vorgehensweise wird zumeist bevorzugt. Die geohydraulischen Parameter werden gewöhnlich elementweise konstant betrachtet.

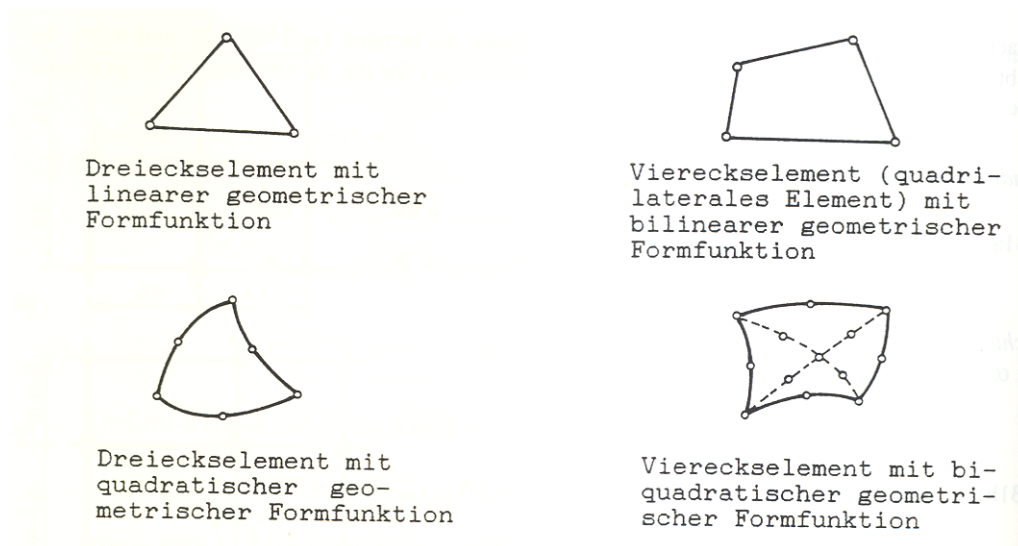


Abb. 8: Formen der Elemente nach dem Finite-Elemente-Verfahren

Auf den Knoten der Elementenetzlinien wird die Lösungsfunktion (z.B. Piezometerhöhe) repräsentiert. Auf diese Weise lässt sich ein Gleichungssystem der Knotenvariablen erstellen, wobei das Gleichungssystem wiederum so viele Gleichungen hat wie Knoten festgelegt worden sind. Die Koeffizientenmatrix des Gleichungssystem ist wesentlich aufwendiger zu ermitteln als bei dem Finite-Differenzen-Verfahren, da die Koeffizienten von der Form der gewählten geometrischen Form der Elemente abhängt.

Ein Berechnungsnetz eines Untersuchungsgebietes ist in Abb. 9 dargestellt.

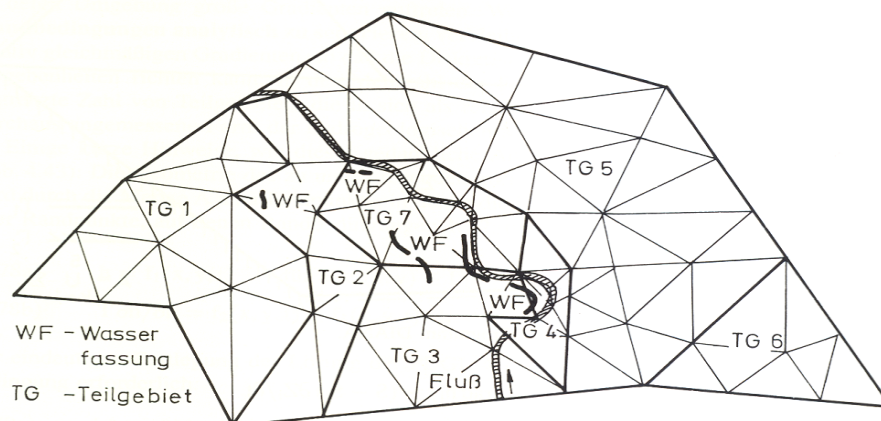


Abb. 9: Diskretisierung beim Finite-Elemente-Verfahren

Vor- und Nachteile der beiden numerischen Lösungsverfahren

Das Thema der Genauigkeit der Ergebnisse spielt bei beiden Lösungsverfahren keine Rolle. Dennoch gibt es einige wichtige Unterschiede.

Tab. 2: Vor- und nachteile der numerischen Lösungsverfahren

Verfahren	Vorteile	Nachteile
Finite Differenzen	Einfaches Organisationsschema für Aufbau des Gleichungssystems; weniger Speicherbedarf und Rechenzeit (Abb. 10, 11)	Krummlinige Ränder, wechselnde Gebietsgeometrien für die physikalischen, chemischen und biologischen Parameter sind nur durch Treppenkurve zu approximieren.
Finite Elemente	Abbildung der Gebietsgeometrien für die physikalischen, chemischen und biologischen Parameter durch Polygonzüge, die Ausgangspunkt für die Dreieckselemente sind, sind sehr realitätsnah.	Aufwendigeres Organisationsschema für Aufbau des Gleichungssystems; erheblich mehr Speicherbedarf und Rechenzeit (Abb. 10, 11)

Die Entscheidung für das eine oder andere numerische Verfahren hängt einmal von der Problemstellung ab und natürlich auch von der Verfügbarkeit und dem Auskennen mit den Verfahren ab.

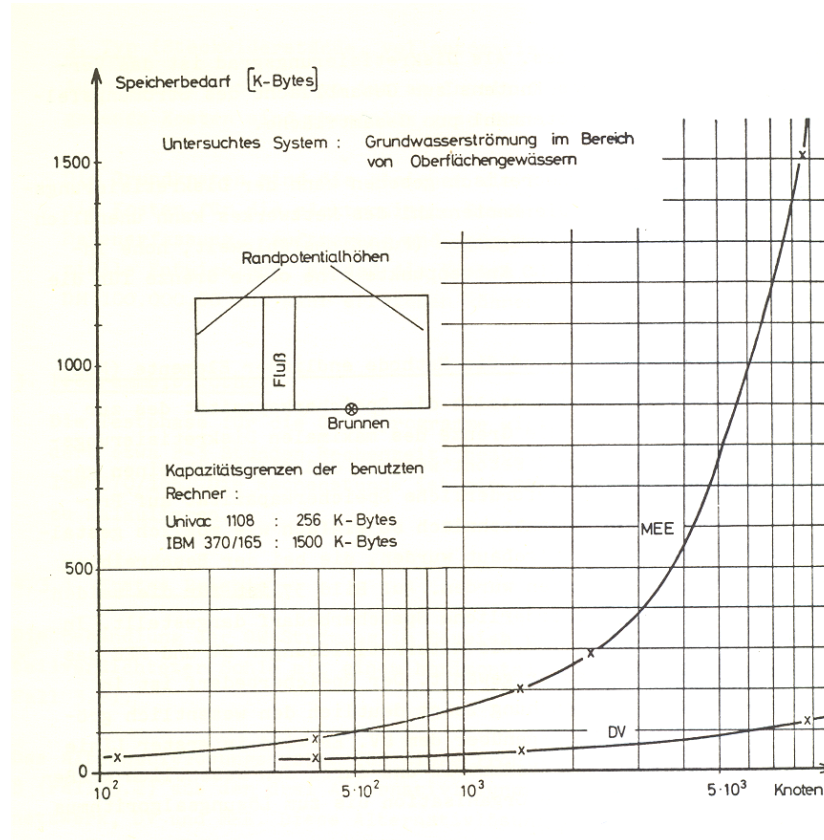


Abb. 10: Vergleich des Speicherbedarfs der numerischen Verfahren (Diss. LÜHR)

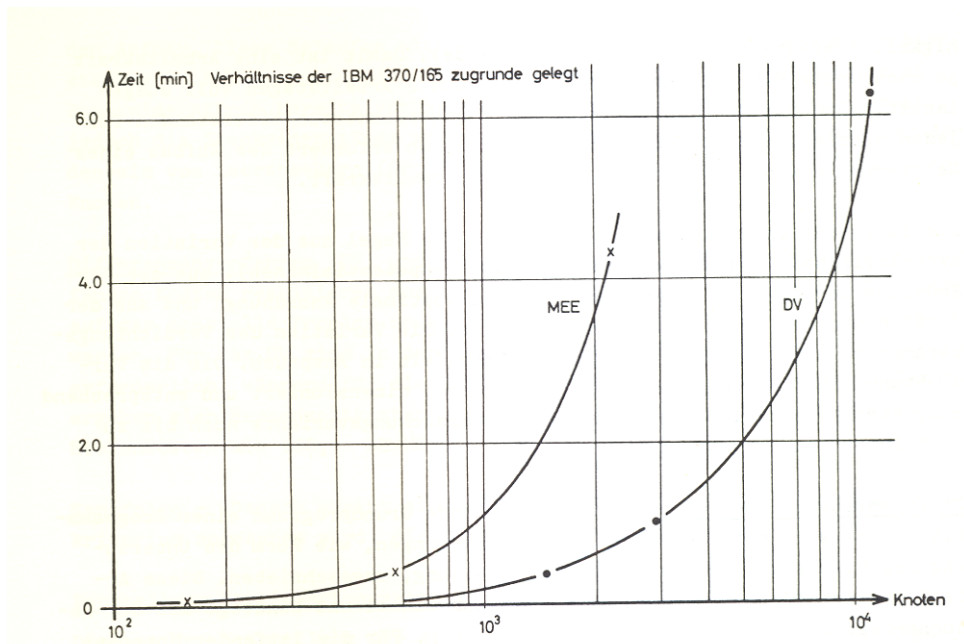


Abb. 11: Vergleich Rechenzeit der numerischen Verfahren (Diss. LÜHR)

6.3 Übersicht über gängige numerische Grundwassermodelle

Im Dezember 1997 hat der BMU-Arbeitskreis „Mathematische Flussgebietsmodelle“ eine Studie über den „Stand und Einsatz mathematisch-numerischer Modelle in der Wasserwirtschaft“ auf Grund einer Befragung publiziert. Auch wenn nur etwa 10 % der Anwender erfasst wurden, so zeichnet sich doch ein realistisches Bild ab.

Danach kommen etwa 28 unterschiedliche Modelle bei den befragten Anwendern zum Einsatz. Dabei fällt auf, dass Modelle aus den USA bevorzugt eingesetzt werden. Dies liegt jedoch weniger in der besonderen Leistungsfähigkeit dieser Modelle begründet als vielmehr in ihrer marktführenden Stellung und den entsprechend günstigeren Preisen. Andererseits gibt es eine Reihe von Eigenentwicklungen, die nicht kommerziell angeboten werden. In der Tab. 3 ist eine Übersicht wiedergegeben. Das Leistungsspektrum und der Status der Modelle sind sehr unterschiedlich. Gleichwohl haben Grundwassermodelle in Forschung und Praxis ihren festen Platz.

Tab. 3: Gängige Grundwassermodelle und ihre Entwickler bzw. Weiterentwickler

ASM	Kinzelbach/Rausch,
CAVE	Universität Tübingen, Angewandte Geologie,
CFEST	Battelle-Institut Frankfurt,
FAST A - F	TU Berlin, Wasserbau und Wasserwirtschaft,
FEFLAT	RWTH Aachen, Wasserbau und Wasserwirtschaft,
FEFLOW	WASY GmbH,
Grundwassermodell	Leichtweiß Gesellschaft für Grundbau und Umwelttechnik,
Grundwassermodell	Uni Hannover Landesamt für Wasserhaushalt und Küsten,
Grundwassermodell	Uni Hannover Wasserwirtschaft, Hydrologie und landw. Wasserbau,
GW-Modell	Rheinbraun Engineering & Wasser GmbH, Geologie und Hydrologie,
GW3DBW	Landesanstalt für Umweltschutz BW, Karlsruhe,
GWKAL	Hydrotec GmbH, Aachen,

HYDRA	igi Niedermeyer Institute GmbH,
HYDO3	WBI GmbH,
HYDOPO	WBI GmbH,
MODFLOW	Universität Tübingen, Angewandte Geologie
MODMAN	Geologisches Landesamt Hamburg,
MORETIF	Universität Tübingen
MT3D	Geologisches Landesamt Hamburg,
PCGEOFIM	IBGW Leipzig
PMPATH	Geologisches Landesamt Hamburg,
ROCKFLOW	Univ. Hannover, Strömungsmechanik
RUR	RWTH Aachen, Wasserbau und Wasserwirtschaft,
SICK 100	Ruhr-Universität Bochum,
SMART	Universität Tübingen, Wasserbau und Wasserwirtschaft,
SUTRA (EM)	United States Geological Survey,
SWIM CSIRO	Australien,
THREE	RWTH Aachen, Wasserbau und Wasserwirtschaft.

In der Praxis haben die Grundwassermodelle MODFLOW und FEEFLOW eine gewisse Bedeutung erlangt. Während MODFLOW auf dem Differenzen-Verfahren basiert, benutzt FEEFLOW das Finite-Elemente-Verfahren.

Die Mehrzahl der Modelle ist auf zweidimensionale und zweidimensional-geschichtete Schematisierungen anwendbar. Verstärkt werden aber auch voll dreidimensionale Modelle angeboten und eingesetzt, insbesondere auch für Stofftransportprobleme.

Die eingesetzten Modelle unterscheiden sich erheblich hinsichtlich der Vorgehensweise beim Pre- und Postprocessing. Hier reicht das Spektrum von der Nutzung modellunabhängiger Standardsoftware (z.B. dBase und ACCESS als Datenbanksystem, AUTOCAD, ARC/INFO, ArcView als CAD-System bzw. GIS) über spezielle Pre- und Postprozessoren mit Schnittstellen zum Modell (insbesondere typisch für MODFLOW) bis hin zu Modellen, die ein umfangreiches Pre- und Postprocessing integriert haben (z.B. FEFLOW). Die Benutzerführung ist zum Teil noch batch-orientiert. Bei den meisten Modellen ist eine menü- oder sogar grafikgestützte Benutzeroberfläche gegeben.

Der überwiegende Teil der Modelle läuft auf PC und/oder Workstation. Zentralrechner werden im wesentlichen nur im universitären Bereich eingesetzt. Einzelanwendungen auf VAX (VMS) wurden ebenfalls aufgeführt. Bei den PC-Versionen dominiert noch MS-DOS.

In zunehmendem Maße werden aber auch WINDOWS 3.1, WINDOWS 95 und vor allem WINDOWS-NT Versionen angeboten. Im Workstationbereich ist als Betriebssystem UNIX der Standard.

7. Voraussetzungen und Ablauf für den Einsatz eines Grundwassermodells

Bei der Behandlung von Grundwasserströmungsproblemen mit numerischen Lösungsverfahren sind folgende Schritte grundsätzlich zu beachten:

1. Definition der Fragestellung

2. Zusammenstellung und Aufbereitung der hydrogeologischen und wasserwirtschaftlichen Grundlagen und stofflichen Prozesse

- Geologische Karten, Bohrprofile, Auswertungen von Pumpversuchen,
- Durchlässigkeiten, Speicherkoeffizienten,
- Grundwassergleichenpläne, Grundwasserstandsmessungen,
- Niederschlagsverteilungen,
- Wasserstände von Oberflächengewässern,
- Entnahmen/Einspeisungen (Raten und Lage),
- Grundwasserneubildung,
- Schadstoffe und deren Verteilungen,
- Physikalische, chemische und biologische Prozesse der Stoffe im Untergrund,
- Festlegungen für zusätzliche Erkundungen.

3. Erarbeitung des mathematischen Modellkonzepts

- Erarbeitung des geologischen Modells für das Untersuchungsgebiet,
- Schematisierung der Systemeigenschaften (geologischer Aufbau, Durchlässigkeiten, Transmissivitäten, Speicherkoeffizienten, Grundwasserneubildung, Leakage, Entnahmen/Einspeisungen, Diffusionskoeffizienten, Dispersivitäten etc.),
- Festlegung des Modellgebiets, Ermittlung und Festlegung der Randbedingungen,
- Reines Strömungsproblem – Transportproblem
- Erfassung und Schematisierung der physikalischen, chemischen und biologischen Prozesse der Stoffe im Untergrund wie Anlagerung, chemische Prozesse, Abbau etc.,
- Abwägung, ob stationär - instationär; 1 D - 2D - 3D,

4. Modellaufbau

- Auswahl des numerischen Lösungsverfahrens,
- Diskretisierung des Modellgebiets horizontal,
- Festlegung der inneren und äußeren Randbedingungen,
- Aufbau der Datensätze zu den Systemeigenschaften und stofflichen Prozesse.

5. Modelleichung

- Erste Modellläufe

- Beurteilung der Ergebnisse durch Vergleich „berechnet-gemessen“,
- Plausibilitätsbetrachtungen,
- Anpassung des Modells durch Variation der Systemgrößen im Rahmen vertretbarer Annahmen,
- Eichung durch „Trial and Error-Verfahren“, Sensitivitätsstudien zum Aufzeigen von Unsicherheiten durch Variation der Modellparameter
- Ergebnis: vertrauenswürdiges Grundwassermodell.

6. Auswertungen und Prognosen

7. Modellpflege

- Ständige Verbesserung durch Berücksichtigung neuer Erkenntnisse
- Vorhalten des Modells für weitere Fragestellungen,
- Überprüfung von Prognosen

8. Zusammenfassung

Grundwassermodelle haben als Strömungs- wie auch Stofftransportmodelle eine weite Verbreitung in Forschung und Praxis gefunden. Numerische Modelle dominieren dabei eindeutig. Zur Bearbeitung vieler Fragestellungen sind sie ein unverzichtbares Werkzeug.

Für einfachere Aufgabenstellungen werden in der Regel Modelle eingesetzt, die auf der Finite-Differenzen-Methode basieren und bezüglich der räumlichen Diskretisierung (starres Rechtecknetz) Einschränkungen erfordern. Darüber täuschen auch sog. Lupentechniken (wie z.B. bei MODFLOW möglich) nicht darüber hinweg. Für komplexere Problemstellungen haben sich Finite-Elemente-Modelle (variable Dreieckdiskretisierung) weitgehend durchgesetzt.

Die Nutzung von graphischen Tools für das Pre- und Postprocessing (als separate Module oder in das Modell integriert) gehört zum Standard der Anwendung. Hier werden in zunehmenden Maße auch CAD- und GIS-Systeme genutzt. In der Regel werden Einphasen-/Einkomponentenmodelle eingesetzt, in Einzelfällen mit Dichtekoppelung.

Von Bedeutung ist in diesem Zusammenhang auch, die Akzeptanz von Modellen zu verbessern. Dazu gehört die Qualitätssicherung, die Offenlegung der Modellgrundlagen und Modellparameterisierung im Anwendungsfall.

Entscheidend in allen Fällen sind jedoch die ingenieurtechnischen, hydraulischen, hydrogeologischen, chemischen und biologischen Grundkenntnisse und Expertisen, um die anstehende Aufgabenstellung mit allen Systemeigenschaften zu erfassen, fachtechnisch zu schematisieren und die Ergebnisse auf Plausibilität prüfen zu können. Das jeweilige Lösungsverfahren ist „nur“ Handwerkzeug zur Erzielung von Ergebnissen.