Publié dans Intern Bericht, pp. 1-53, 1990,
source qui doit être utilisée pour toute référence à ce travail

Projekt Malmkarst: Programmbeschreibung zum Grundwasserströmungsmodell

L. Kiraly
Centre d'Hydrogéologie, Universität Neuchâtel (Schweiz)

10 Grundwasserströmungsmodell

10.1 Einleitung

Das Modell ist nicht die Realität, es ist nur die Realisierung einer schematischen und symbolischen Darstellung des reellen Systems. Die Beziehungen zwischen "Realität", "abstraktem Schema" und "Modell" sind auf Abbildung 1 dargestellt; hierbei treten auch die wichtigsten Probleme der Modellierung in Erscheinung.

Der erste Schritt besteht aus der *Konstruktion einer schematischen und symbolischen Darstellung des reellen Systems*, oft "konzeptionelles Modell" genannt. Die Grundwasserströmung wird durch Differentialgleichungen dargestellt (abstraktes und symbolisches Schema, im wahrsten Sinne des Wortes), deren Gültigkeit meist durch mehrere theoretische Annahmen beschränkt ist.

Die Differentialgleichungen, welche die Grundwasserströmung beschreiben enthalten einige Parameter, welche hauptsächlich vom Grundwasserleiter abhängen, so z.B. Permeabilität und Speicherkoeffizient. Der Grundwasserleiter wird nun durch diese Parameterfelder schematisiert, das heißt, man ordnet einen Durchlässigkeitswert und einen Speicherkoeffizient jedem Punkt des Aquifers zu, selbst da, wo keine Messwerte zur Verfügung stehen. Das bedingt, daß eine Interpolation und eine Extrapolation der Messwerte fast immer notwendig sein werden. Eine solche Beschreibung des Grundwasserleiters wird notwendigerweise Hypothesen und Vereinfachungen enthalten und damit in grossem Maße schematisch sein. Schliesslich muss man, um das hydrogeologische Problem im konzeptuellen Modell eindeutig definieren zu können, noch die Randbedingungen, d.h. die Infiltrationen, Entnahmen und die Potentiale der Vorfluter angeben.

Das so schematisierte System ist, im Vergleich zur Realität, einerseits ärmer und anderseits reicher geworden. Ärmer, weil stark vereinfacht, und reicher, weil die Daten aufeinander bezogen in strukturierter Form erscheinen, wobei die Beziehungen zwischen Parameter und Variablen durch die jeweils benutzte Differentialgleichung

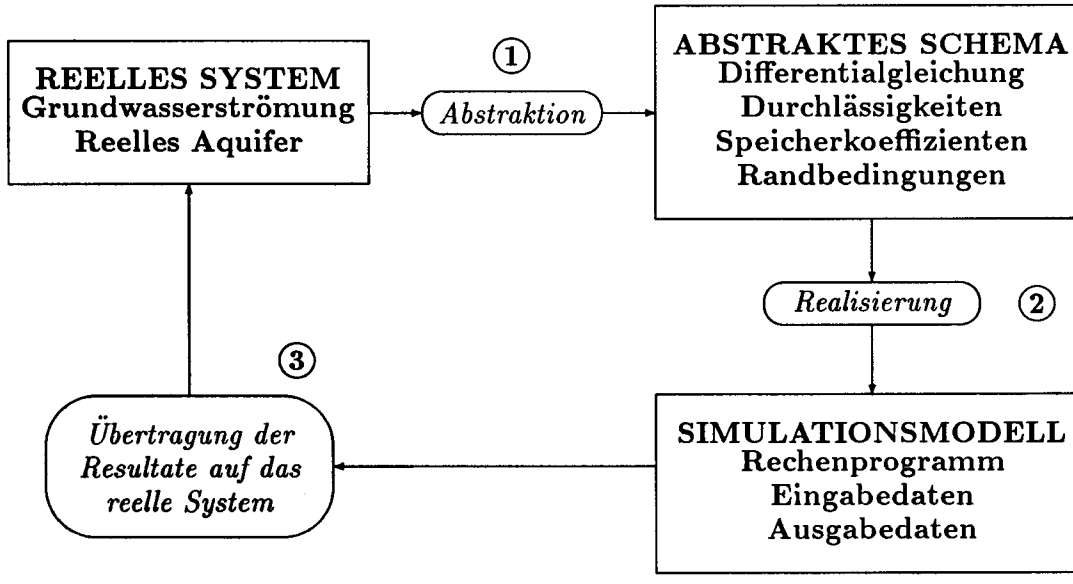


Abbildung 1: Beziehungen zwischen Realität, abstraktem Schema und Modell.

definiert sind. Es sei noch darauf hingewiesen, daß ein System bereits im voraus so schematisiert wird, daß es der Lösung eines bestimmtes Problemes dienen kann.

Man begreift dann, daß das gleiche reelle System, je nach der Problemstellung, durch sehr verschiedene Schemata dargestellt werden kann und ein Schema nur in Verbindung mit der im voraus festgelegten Absicht beurteilt werden darf. Selbstverständlich wird ein Schema, so vollkommen es auch sein mag, niemals mit der Realität identisch sein.

Der zweite Schritt besteht in der *Erstellung des eigentlichen, lauffähigen Simulationsmodelles.* In unserem Fall handelt es sich um ein mathematisches Modell nach der Methode der finiten Elemente. Hier wird das Modellgebiet in durch Knoten bestimmte finite Elemente aufgeteilt und die Differentialgleichung der Grundwasserströmung wird für jeden Knotenpunkt durch ein Computerprogramm numerisch gelöst. Die numerische Lösung ergibt einen Potentialwert für jeden Knotenpunkt, wodurch für jeden Punkt des Modellgebietes die Fliessrichtung sowie die Durchflussmenge bestimmt werden.

Die für einen Rechenlauf benötigten numerischen Daten betreffen die Geometrie der Elemente (Koordinaten der Knotenpunkte), die Materialeigenschaften (Durchlässigkeitswert und Speicherkoeffizient für jedes Element), sowie die Randbedingungen (Potentialwerte, Zu- oder Abflüsse). Die Genauigkeit der Lösung wird durch das numerische Lösungsverfahren und durch die Feinheit des Elementnetzes beeinflusst.

Die *Übertragung der simulierten Resultate auf das reelle System* ist die dritte, sehr wichtige Operation in der Modellierung. Streng genommen sind die simulierten Resultate nur im Rahmen des stark vereinfachten Modells gültig. Ihre vernünftige

Übertragung auf das reelle System erfordert, daß man sich aller in den beiden ersten Schritten gemachten Vereinfachungen bewusst ist ("Abstraktion" und "Realisation", siehe Abbildung 1). Insbesondere müssen alle "Unsicherheiten" der in das Modell eingegebenen Werte als "Unsicherheiten" der simulierten Resultate in Erscheinung treten.

Die "Modellierung" besteht aus allen Operationen die in Abbildung 1 dargestellt sind. Die Hydrogeologen müssen sich all dieser Operationen bewusst sein, um die Nützlichkeit der Modelle objektiv beurteilen und im Aufbau der Modelle aktiv mitwirken zu können.

Es ist ersichtlich, daß unter dem Ausdruck "hydraulisches Modell" sowohl die Rechenprogramme als auch die Ein- und Ausgabedaten zu verstehen sind. Die für den Modellaufbau nötigen Eingabedaten zusammenzustellen und die Rechenergebnisse zu interpretieren, sind hydrogeologische Aufgaben. Simulationsprogramme und Hilfsprogramme herzustellen, sind dagegen rechentechnische und programmierungstechnische Aufgaben. Wenn die Programme getestet und damit einsatzfähig sind, muß der Benutzer sein ganzes Augenmerk den hydrogeologischen Problemen schenken wobei eine unkritische "blackbox"-artige Anwendung der Programme doch zu erheblichen Fehlschlüssen führen kann. Die oben angführten Überlegungen zeigen, daß der Einsatz von fertigen Programmen von den Anwendern einen bestimmten Kenntnisstand in Informatik erfordert. Aufbau, Inhalt und Grenzen des Programmes müssen vom Anwender überblickt werden. Dieser Kurzbericht soll dem Benutzer die wichtigste Informationen über das Rechenprogramm "MK1" und seine Anwendbarkeit geben. Es handelt sich um eine Kurzfassung der Programmbeschreibungen, die dem Bayerischen Landesamt für Wasserwirtschaft zur Verfügung gestellt wurden. Einzelheiten sind dort und in den angeführten Referenzen zu finden (siehe insbesondere KIRALY, 1985). Einige projektspezifische Probleme werden am Ende des Berichtes eingehender behandelt.

10.2 Die Fliessgleichungen

10.2.1 Das Gesetz von Darcy

Das Gesetz von Darcy kann aus der Navier-Stoke'schen Gleichung abgeleitet werden, wenn man die folgenden Annahmen trifft:

- als einzige wasserbewegende Kräfte ("driving forces") treten nur der Druckgradient und die Schwerkraft auf.

- die Fliessgeschwindigkeit ist so klein, daß man die Trägheitseinflüsse ("inertial term") vernachlässigen kann.

- der Widerstand zum Fliessen soll hauptsächlich von den im Wasser auftretenden viskosen Scherspannungen ("viscous shear") abhängen und dem Volumenfluxus $\vec{q}$ ("Filtergeschwindigkeit", "specific discharge") proportional sein.

In diesem Fall hat man die folgenden allgemeinen Ausdrücke für das Gesetz von Darcy:

$$\vec{q} = -\frac{[k]}{\mu}\left(\vec{grad}\, p + \rho g \cdot \vec{grad}\, z\right) \tag{1}$$

oder

$$\vec{q} = \frac{\rho g\,[k]}{\mu}\left(\frac{1}{\rho g}\,\vec{grad}\, p + \vec{grad}\, z\right) \tag{2}$$

Hierin bedeuten:

$\vec{q}$ = Volumenfluxus $[m^3/sm^2]$
$[k]$ = geometrische ("intrinsic") Permeabilität $[m^2]$
μ = dynamische Viskosität $[kg/ms]$
p = Druck $[kg/ms^2]$
ρ = Dichte des Wassers $[kg/m^3]$
$\vec{g}$ = Erdbeschleunigung $[m/s^2]$
z = Höhe über einem Referenzniveau $[m]$

Gleichungen (1) und(2) können auch dann angewendet werden, wenn die Grundwasserbewegung keine Potentialströmung ist (zum Beispiel natürliche Konvektionen). Die Vektoren

$$\vec{F} = \left(\vec{grad}\, p + \rho g \cdot \vec{grad}\, z\right) \qquad \text{und} \qquad \vec{E} = \left(\frac{1}{\rho g}\,\vec{grad}\, p + \vec{grad}\, z\right)$$

sind Kräfte pro Volumeneinheit und Gewichtseinheit Wasser. Wenn das $\vec{F}$ - Feld oder $\vec{E}$ - Feld wirbelfrei ist (das heisst, $rot\vec{F} = 0$ oder $rot\vec{E} = 0$), dann können die wasserbewegenden Kräfte $\vec{F}$ oder $\vec{E}$ aus einem Kraftpotential abgeleitet werden. In diesem Fall ist auch das Strömungsfeld wirbelfrei und man kann die Wasserbewegung als Potentialströmung betrachten.
Die Bedingungen für die Existenz einer Potentialströmung sind damit angegeben:

$$rot\vec{F} = \vec{grad}\,\rho \times \vec{g} = 0$$

oder

$$rot\vec{E} = \vec{grad}\left(\frac{1}{\rho g}\right) \times \vec{grad}\, p = 0$$

Beide Bedingungen sind erfüllt wenn die Wasserdichte ρ konstant ist oder zumindest die räumlichen Veränderungen von ρ klein sind (also annäherungsweise $\vec{grad}\,\rho \approx 0$). Die zweite Bedingung ist auch dann erfüllt, wenn das Wasser kompressibel ist, aber die Dichte ρ nur allein vom Druck p abhängt (siehe HUBBERT 1957). Da die Kompressibilität des Wassers sehr klein ist, kann man die folgende vereinfachende Hypothese machen: es wird angenommen, daß im ganzen Modellgebiet die Grundwasserdichte annäherungsweise konstant ist, oder nur vom Druck abhängt und der Dichtegradient $\vec{grad}\,\rho$ vernachlässigt werden kann.
Mit dieser Annahme erhält man:

$$\vec{F} = \vec{grad}\,(p + \rho g z) \qquad \text{und} \qquad \vec{E} = \vec{grad}\left(\frac{p}{\rho g} + z\right)$$

wobei $(p + \rho g z)$ und $(p/\rho g + z)$ mögliche Ausdrücke für das hydraulische Potential sind. Hier wird der letztere, weit verbreitete Ausdruck für das hydraulische Potential benutzt und damit läßt sich das Gesetz von Darcy in folgender Form schreiben:

$$\vec{q} = -\frac{\rho g\,[k]}{\mu}\,\vec{grad}\left(\frac{p}{\rho g} + z\right) = -\,[K]\cdot\vec{grad}\,h \tag{3}$$

Hierin bedeuten:

$h = (p/\rho g + z)$ = hydraulisches Potential $[m]$

$[K] = \rho g\,[k]\,/\mu$ = Permeabilitätstensor der Hydrogeologen $[m/s]$.

In dem hier beschriebenen Modell wird das Gesetz von Darcy ausschliesslich in der Form von Gleichung (3) benutzt. Es ist leicht einzusehen, daß h eine Energiedichte und $\vec{grad}\,h$ eine Kraft pro Gewichtseinheit Wasser sind.

10.2.2 Die Kontinuitätsgleichung.

In der gesättigten Zone kann man die Massenbilanz für die instationäre Grundwasserströmung folgendermassen ausdrücken (BEAR, 1979):

$$\frac{\partial\,(n\rho)}{\partial t} + div\,(\rho\vec{q}) + \rho Q = 0 \tag{4}$$

Hierin bedeuten:

$\vec{q}$ = Volumenfluxus $[m^3/sm^2]$ nach Gleichung (3)

ρ = Dichte des Wassers $[kg/m^3]$

Q = Quellterm $[m^3/s\,m^3]$

t = Zeit $[s]$.

Wenn das erste, zeitabhängige Glied von Gleichung (4) nicht Null ist, muss man annehmen, daß n und ρ vom Druck p abhängen, auch wenn die Kompressiblität des Wassers und die Kompressibilität des Gesteins sehr klein sind. Mit $\rho = \rho(p)$ und $n = n(p)$ erhält man:

$$\frac{\partial\,(\rho n)}{\partial t} = \left[n\frac{\partial\rho}{\partial p} + \rho\frac{\partial n}{\partial p}\right]\frac{\partial p}{\partial t} = S_{mp}\frac{\partial p}{\partial t} \tag{5}$$

wobei S_{mp} $[s^2/m^2]$ ein druckabhängige "Massenspeicherkoeffizient" ist (siehe BEAR, 1979). Da $p = \rho g(h - z)$ ist, läßt sich schreiben:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \rho g\frac{\partial h}{\partial t} + g\,(h - z)\,\frac{\partial\rho}{\partial p}\cdot\frac{\partial p}{\partial t}$$

oder

$$\rho g\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t}\cdot\left[1 - g\,(h - z)\,\frac{\partial\rho}{\partial p}\right]$$

Das zweite Glied in der eckigen Klammer ist viel kleiner als 1, auch wenn $(h - z) = 10000\ m$ ist. Mit guter Annäherung erhält man:

$$\frac{\partial p}{\partial t} \approx \rho g\frac{\partial h}{\partial t}$$

Dies wird in Gleichung (5) eingesetzt, wodurch sich für das zeitabhängige Glied von Gleichung (4) folgender Ausdruck ergibt:

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \approx \rho g S_{mp} \frac{\partial h}{\partial t} = \rho S_o \frac{\partial h}{\partial t} \tag{6}$$

Hierin ist S_o $[1/m]$ ein potetialabhängiger Volumenspeicherkoeffizient ("spezifischer Speicherkoeffizient", "specific storativity").

Das zweite Glied in Gleichung (4) ist die Divergenz des konvektiven Massentransportes:

$$div\,(\rho\,\vec{q}) = \rho\, div\,\vec{q} + \vec{grad}\,\rho \cdot \vec{q}$$

Falls die Grundwasserdichte ρ nur vom Druck abhängt, werden ihre räumlichen Veränderungen so klein sein, daß $\vec{grad}\,\rho$ wiederum vernachlässigt werden darf. Mit dieser Vereinfachung erhält man:

$$div\,(\rho\,\vec{q}) \approx \rho\, div\,\vec{q} \tag{7}$$

Wenn die Resultate von (6) und (7) in Gleichung (4) eingesetzt werden und die Gleichung durch die Dichte ρ dividiert wird, dann erhält man die klassische, von den Hydrogeologen meistgebrauchte "Diffusivitätsgleichung"

$$\rho\, S_o \frac{\partial h}{\partial t} + \rho\, div\,\vec{q} + \rho\, Q = 0$$

oder

$$S_o \frac{\partial h}{\partial t} + div\left(-[K]\ \vec{grad}\,h\right) + Q = 0 \tag{8}$$

Diese Gleichung (8) wird für das hier beschriebene Simulationsprogramm benutzt. Somit sind die wichtigsten, in dem Programm enthaltenen Vereinfachungen klargestellt und der Benutzer kann selbst entscheiden, ob das vorgeschlagene Modell für die Bearbeitung seiner Aufgabe geeignet ist.

10.3 Formulierung der Fliessgleichungen für die finiten Elemente

Die Simulation der Grundwasserströmung wird mit einem mathematischen Modell nach der Methode der "finiten Elemente" ausgefürt. Die Methode der finiten Elemente ist in zahlreichen Veröffentlichungen ausführlich beschrieben (siehe z.B. ZIENKIEWICZ, 1971; SCHWARZ, 1980; KIRALY, 1985; KINZELBACH, 1986), so daß hier nur einige grundsätzliche Hinweise gegeben werden.

Zuerst wird das zu simulierende Modellgebiet in einfache Teilgebiete, die sogenannten *Elemente* zerlegt. Diese Elemente sind an festgelegten Punkten miteinander verknüpft, die *Knotenpunkte* genannt werden (siehe Abbildung 2). Die unbekannte und gesuchte Funktion — in diesem Fall die Verteilung des hydraulischen Potentials h — wird in jedem Element mit Hilfe von geeigneten, einfachen Ansatzfunktionen

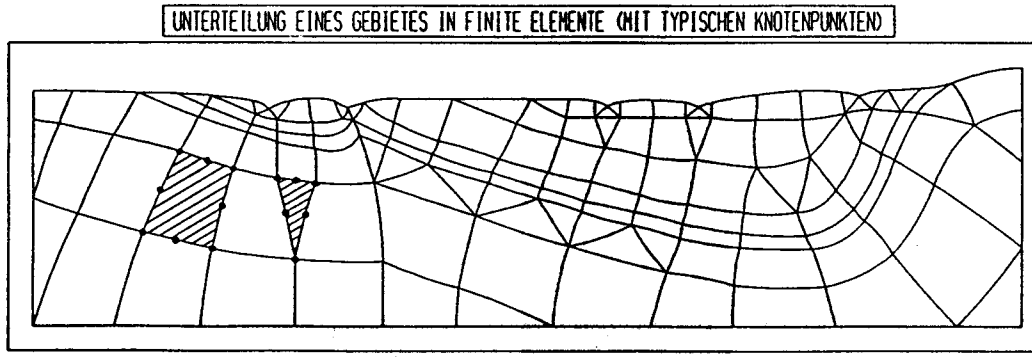


Abbildung 2: Unterteilung eines Gebietes in "finite Elemente". Ein Dreieck und ein Viereck zeigen die typischen Knotenpunkte.

$h^\star$ angenähert. Meistens handelt es sich um lineare oder quadratische Interpolationspolynome. Wenn die einfache Annäherungsfunktion $h^\star$ in Gleichung (8) an der Stelle von h eingesetzt wird, kann man die mit einer Gewichtsfunktion gewichtete Differentialgleichung über jedes Element integrieren. Man erhält dadurch die gleiche Zahl von im allgemeinen linearen Gleichungen wie es Knotenpunkte im Modellgebiet gibt. Das gesamte lineare Gleichungssystem kann dann gelöst werden, wenn man die *Randbedingungen* angibt.

Das Gleichungssystem wird mit der sogenannten *Frontaleliminationsmethode* gelöst, welche eine Variante des Gauss'schen Eliminationsverfahren ist. Der wichtigste Vorteil dieser Methode besteht darin, daß der Speicheraufwand im Computer nicht von der Knotennumerierung abhängig ist. Die numerische Lösung des Gleichungssystems liefert einen Potentialwert für jeden Knotenpunkt. Durch die Interpolation der "Knotenwerte" erhält man das hydraulische Potential für jeden beliebigen Punkt des Modells.

10.3.1 Die verschiedenen Elementtypen

In dem hier beschriebenen Modell besteht die Möglichkeit ein-, zwei- und dreidimensionale (1-D, 2-D und 3-D) Elemente miteinander zu verknüpfen. Diese Möglichkeit soll erlauben, die Geometrie des Modellgebietes und die heterogene Struktur der Durchlässigkeiten möglichst treu nachbilden zu können. In einem 3-D Modell könnten 1-D Elemente z.B. ein *Karstnetz*, 2-D Elemente dagegen *geologische Störungen* simulieren.

Jedes Element ist gleichzeitig in einem *globalen Raum* und in einem *lokalen Raum* durch die *globalen Koordinaten*, beziehungsweise *lokalen Koordinaten* der Knotenpunkte definiert.

Im *lokalen Raum* hat jedes Element eine einfache und regelmässige Form (siehe Abbildung 3), da die normalisierten lokalen Koordinaten s^i und L^j in dem Wertbereich $[-1;+1]$, beziehungsweise $[0;+1]$ liegen. Definitionsgemäss ist jeder Eckpunkt ein Knotenpunkt mit den Lokalkoordinaten $s^i = (-1 \text{ oder } +1)$ oder $L^j = (0 \text{ oder } +1)$. Da zwischen 2 Punkten nur linear, zwischen 3 Punkten jedoch

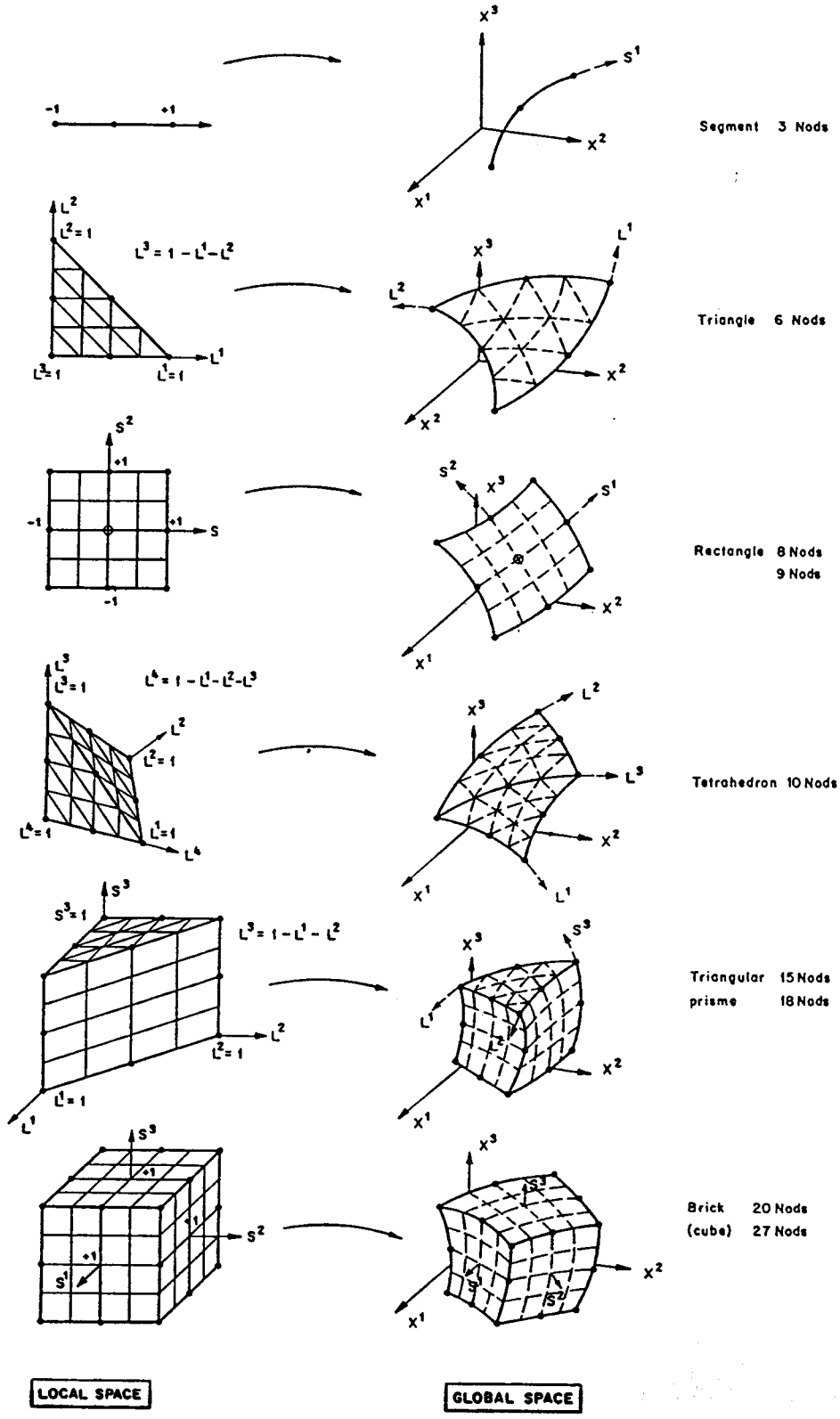


Abbildung 3: Lokalkoordinaten und Globalkoordinaten für die verschiedene Elemente (nach Kiraly, 1985)

quadratisch interpoliert werden kann, haben die *linearen Elemente* nur 2 und die *quadratischen Elemente* 3 Knotenpunkte auf jeder Elementkante. Das Simulationsprogramm "MK1" nimmt nur quadratische Elemente an.

Die Interpolationsfunktionen $N_n(s^i)$ sind Polynome zweiter Ordnung, die nur von den Lokalkoordinaten s^i oder L^j abhängen (siehe ZIENKIEWICZ, 1971). Es gibt soviele Interpolationsfunktionen pro Element wie Knotenpunkte (NP). Ist h eine unbekannte Funktion über einem Element und sind die Funktionswerte h^n nur an den Knotenpunkten bekannt, so kann die unbekannte Funktion h in jedem beliebigen Punkt s^i des Elementes mit einer quadratischen Funktion $h^\star$ angenähert werden:

$$h^\star(s^i) = N_n(s^i)\, h^n \qquad n = 1\,,\, NP \tag{9}$$

(Hier und im Folgenden wird die *Summationskonvention* benutzt: $N_n\, h^n$ steht für $\sum_{n=1}^{NP} N_n\, h_n$)

Jetzt soll noch die wirkliche Elementform im *globalen Raum* definiert werden. Der globale Raum ist ein gewöhnlicher 3-D Raum — der gleiche für alle Elemente — mit einem orthonormierten cartesischen Koordinatensystem, wobei $\vec{e}_i = \{\vec{e}_1\,, \vec{e}_2\,, \vec{e}_3\}$ die Basisvektoren und $x^i = \{x^1\,, x^2\,, x^3\}$ die globalen Koordinaten sind. Mit den quadratischen Interpolationsfunktionen können im globalen Raum *gekrümmte Elemente* erzeugt werden. Wenn man die globalen Koordinaten x^{ni} der Knotenpunkte angibt, werden die Elementkanten Parabelstücke sein, die durch die Knotenpunkte gehen (siehe Abbildung 3). Das Interpolationsschema

$$x^i(s^j) = N_n(s^j)\, x^{ni} \qquad n = 1\,,\, NP \tag{10}$$

kann als eine Abbildung aufgefasst werden, welche die einfachen, geradlinigen "lokalen" Elemente in gekrümmte "globale" Elemente überführt. Abbildung 3 zeigt auch, daß im globalen Raum die Lokalkoordinaten als *krummlinige Koordinaten* erscheinen, deren Orientierung sich von Punkt zu Punkt ändert. Das obige Interpolationsschema ist also einfach eine Koordinatentransformation zwischen den krummlinigen Lokalkoordinaten s^i oder L^j und den cartesischen Globalkoordinaten x^k. Die Transformation ist eindeutig, solange die Elemente nicht extrem gekrümmt sind.

Die Interpolationsfunktionen $N_n(s^i)$ spielen also zwei verschiedene, aber wichtige Rollen:

- sie bestimmen die Form des "reellen" Elementes nach den Globalkoordinaten der Knotenpunkte (Gleichung 10).

- sie bestimmen die Potentialverteilung über dem "reellen" Element nach den Knotenwerten des hydraulischen Potentials (Gleichung 9).

Wenn die Elementform und die Potentialverteilung durch die gleichen Interpolationsfunktionen $N_n(s^i)$ bestimmt sind, spricht man von *isoparametrischen Elementen.* In dem Programm "MK1" werden nur isoparametrische Elemente benutzt. Sie sind in Tabelle 1 aufgelistet.

Dimension	Element + Lokalkoordinaten	Knoten
1 - D	Segment (s^1)	3
2 - D	Dreieck (L^1, L^2, L^3) mit $L^3 = 1 - L^1 - L^2$	6
2 - D	Viereck (s^1, s^2)	8
2 - D	Viereck (s^1, s^2), Lagrange	9
3 - D	Tetraeder (L^1, L^2, L^3, L^4) mit $L^4 = 1 - L^1 - L^2 - L^3$	10
3 - D	Dreieckiges Prisma (L^1, L^2, L^3, s^3) mit $L^3 = 1 - L^1 - L^2$	15
3 - D	Dreieckiges Prisma, Lagrange (L^1, L^2, L^3, s^3) mit $L^3 = 1 - L^1 - L^2$	18
3 - D	Würfel (s^1, s^2, s^3)	20
3 - D	Würfel, Lagrange (s^1, s^2, s^3)	27

Tabelle 1: Die verschiedenen Elementtypen in "MK1"

10.3.2 Anwendung der Methode von Galerkin

Die Differentialgleichung (8) läßt sich in folgender Form schreiben:

$$S_o \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i}\left(-K^{ij}\frac{\partial h}{\partial x^j}\right) + Q = 0 \tag{11}$$

oder einfach

$$L(h) = 0$$

wobei L ein Differentialoperator ist. Wie schon erwähnt, wird die unbekannte Funktion $h(x^i)$ durch eine quadratische Annäherungsfunktion $h^\star = N_n\, h^{\star n}$ ersetzt. Wird nun dieser Ansatz in die Differentialgleichung (11) eingesetzt, so wird sie in den wenigsten Fällen erfüllt sein, vielmehr resultiert ein sogenanntes *Residuum R*:

$$L(h^\star) = L(N_n h^{\star n}) = R \neq 0$$

Um die "beste" Lösung erhalten zu können, wird verlangt, daß die Funktion $h^\star$ folgende zwei Bedingungen erfüllt:

1 Die Annäherungslösung $h^\star$ muss die angegebenen Randbedingungen erfüllen.

2 Das Integral des Residuums, gewichtet mit bestimmten Gewichtsfunktionen W_m, soll über jedes Element (also über das ganze Modellgebiet) null werden:

$$\int_V W_m\, L(N_n\, h^{\star n})\, dV = 0 \qquad n, m = 1, NP$$

Diese allgemeine Formulierung entspricht dem Verfahren der *gewichteten Residuen.* In der *Methode von Galerkin* werden die Gewichtsfunktionen W_m der Reihe nach gleich den Interpolationsfunktionen N_n gewählt und damit erhält man die folgende Formulierung der Fliessgleichung:

$$\int_V N_m \, L(N_n h^{\star n}) \, dV = 0 \qquad \text{oder}$$

$$\int_V N_m \, S_o \frac{\partial h^\star}{\partial t} \, dV + \int_V N_m \, \frac{\partial}{\partial x^i} \left(K^{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x^j} \, h^{\star n} \right) \, dV + \int_V N_m \, Q \, dV = 0 \qquad (12)$$

In dem zweiten Volumenintegral kann man die höheren Ableitungen durch den Green'schen Integralsatz eliminieren:

$$\int_V N_m \, \frac{\partial}{\partial x^i} \left(K^{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x^j} \, h^{\star n} \right) \, dV = \int_V \frac{\partial N_m}{\partial x^i} \, K^{ij} \, \frac{\partial N_n}{\partial x^j} \, h^{\star n} \, dV + \int_S N_m \left(-K^{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x^j} \, h^{\star n} \right) \cdot n_i \, dS$$

Man erhält nun ein Volumenintegral das nur erste partielle Ableitungen enthält und ein Randintegral (Flächenintegral im 3-D Raum), das die Flächenzuflüsse in der Normalenrichtung automatisch mitberücksichtigt. Diese Integrale in Gleichung (12) eingesetzt, erhält man:

$$\int_V S_o \, N_m N_n \frac{\partial h^{\star n}}{\partial t} dV + \int_V \frac{\partial N_m}{\partial x^i} \, K^{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x^j} \, h^{\star n} \, dV + QV \int_V N_m \, dV + QS \int_S N_m \, dS = 0$$

Hierbei sind $\int N_m \, dV$ das Einflussvolumen und $\int N_m \, dS$ die Einflussfläche des m-ten Knotenpunktes. Dementsprechend sind QV und QS Volumen- und Flächen-Quellterme (in einem 3-D Modell ist QV im Allgemeinen Null). Damit ergibt sich ein lineares Gleichungssystem, welches man in der folgenden, sehr einfachen Form schreiben kann

$$C_{nm} \frac{\partial h^{\star n}}{\partial t} + A_{nm} \, h^{\star n} + QT_m = 0 \qquad (13)$$

mit

$$C_{nm} = \int_V S_o \, N_m N_n \, dV \qquad (14)$$

$$A_{nm} = \int_V \frac{\partial N_m}{\partial x^i} \, K^{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x^j} \, dV \qquad (15)$$

$$QT_m = QV \int_V N_m \, dV + QS \int_S N_m \, dS \qquad (16)$$

Die Elementmatrizen A_{mn} und C_{mn} sind symmetrisch und sind nur von der Elementgeometrie, von der Durchlässigkeit und von dem Speicherkoeffizient abhängig. Der Vektor QT_m entspricht den totalen Zu- oder Abflüssen in der Einflussregion der

Knotenpunkte. Da die meisten Knotenpunkte gleichzeitig zu mehreren Elementen gehören, muss man die Elementmatrixen und die Elementquellterme addieren, um das Gesamtproblem lösen zu können:

$$\sum_{LM=1}^{NLM} C_{nm} \cdot \frac{\partial h^{\star n}}{\partial t} + \sum_{LM=1}^{NLM} A_{nm} \cdot h^{\star n} = \sum_{LM=1}^{NLM} QT_m \tag{17}$$

Hierbei ist NLM die Zahl der Elemente im ganzen Modell. Das Programm "MK1" löst Gleichung (17) ohne das zeitabhängige Glied.

Um die numerischen Werte der Elementmatrizen berechnen zu können, sind noch zwei wichtige Aufgaben zu lösen:

- In Gleichung (15) muß man die sogenannte *Gradientmatrix* $\partial N_n \,/\, \partial x^i$ für 1-D, 2-D und 3-D Elemente in einem 3-D Raum berechnen.
- Numerische Integration über die gekrümmten Elemente im globalen Raum.

10.3.3 Berechnung der Gradientmatrix

In einem cartesischen Koordinatensystem ist der hydraulische Gradient durch

$$\vec{grad}\, h = \frac{\partial h}{\partial x^i} = J_i \, \vec{e}^{\,i}$$

definiert, wobei J_i die cartesichen Komponenten des Gradienten sind. Aus $h = N_n \, h^n$ folgt (im Folgenden wird der $\star$ in $h^{\star n}$ nicht mehr mitgeführt):

$$J_i = \frac{\partial N_n}{\partial x^i} \, h^n = B_{in} \, h^n$$

Das bedeutet, daß man in jedem Punkt eines Elementes die cartesischen Komponenten des Gradienten berechnen kann, indem die Knotenpotentiale h^n mit der Gradientmatrix B_{in} multipliziert werden. Problematisch ist nur, daß die Interpolationsfunktionen N_n von den Lokalkoordinaten s^i abhängen und man sie nicht direkt nach den Globalkoordinaten x^i ableiten kann. Lehrbücher enthalten nur Lösungen für 2-D Elemente im 2-D Raum oder für 3-D Elemente im 3-D Raum. In diesem Fall ist die Zahl der Lokalkoordinaten gleich der Zahl der Globalkoordinaten und man kann die Inverse der Jakobi-Matrix $[\partial x^i / \partial s^j]^{-1}$ in folgender Form benutzen:

$$\frac{\partial N_n}{\partial x^i} = \left[\frac{\partial x^i}{\partial s^j}\right]^{-1} \frac{\partial N_n}{\partial s^j} = B_{in}$$

Wenn die Zahl der Lokalkoordinaten kleiner ist als die Zahl der Globalkoordinaten — also 1-D und 2-D Elemente im 3-D Raum — kann man diese Methode nicht anwenden. KIRALY (1979, 1985 und 1988) hat eine allgemeinere Methode vorgeschlagen, welche gestattet die Gradientmatrix — und die Elementmatrizen — auch für 1-D, 2-D und 3-D Elemente in einem 3-D Raum zu berechnen. Bei dieser Methode geht

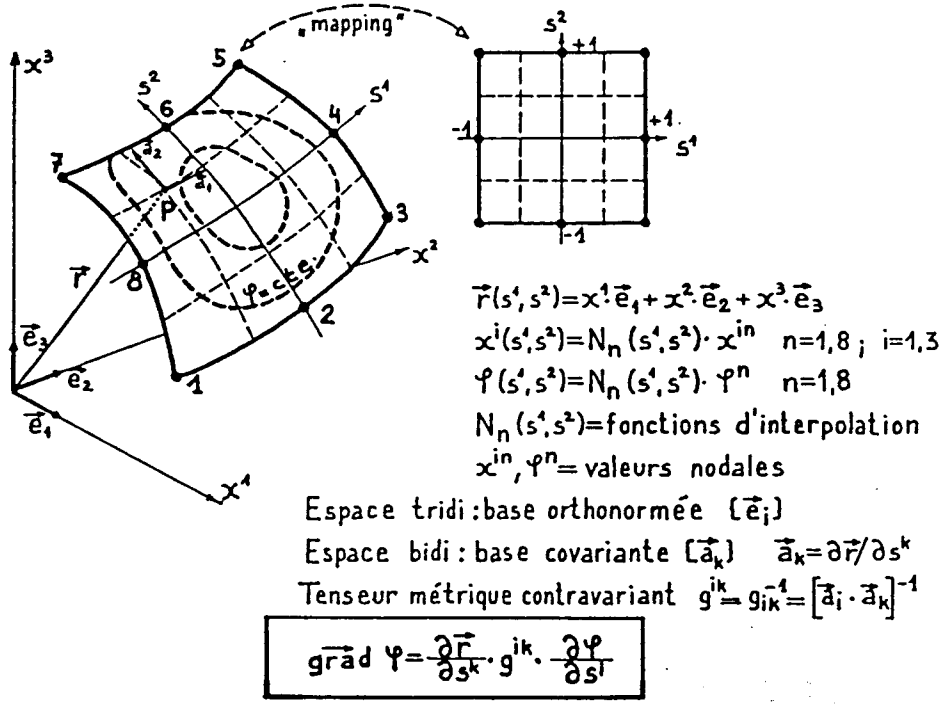


Abbildung 4: Gradient in krummlinigen Koordinaten (nach Kiraly, 1979)

man von der Definition des Gradienten im lokalen, krummlinigen Koordinatensystem aus (siehe auch KLINGBEIL, 1966 oder TEICHMANN, 1964). Hier ist der Gradient durch die kovarianten Basisvektoren $\vec{a}_k$ und die kontravarianten Gradientkomponenten J^k ausgedrückt (siehe auch Abbildung 4):

$$\vec{grad}\cdot h = \vec{a}_k \cdot J^k \tag{18}$$

mit

$$\vec{a}_k = \frac{\partial \vec{r}}{\partial s^k} = \vec{e}_j \cdot \frac{\partial x^j}{\partial s^k} = \vec{e}_j \cdot \frac{\partial N_n}{\partial s^k} \cdot x^{jn}$$

und

$$J^k = g^{ik} \cdot J_i = g^{ik} \cdot \frac{\partial h}{\partial s^i} = g^{ik} \cdot \frac{\partial N_n}{\partial s^i} \cdot h^n$$

Der kontravariante Metriktensor g^{ik} ist aus den kovarianten Basisvektoren $\vec{a}_k$ berechnet nach $g^{ik} = g_{ik}^{-1} = [\vec{a}_i \cdot \vec{a}_k]^{-1}$. Die Inverse des symmetrischen kovarianten Metriktensors g_{ik} ist immer leicht zu berechnen.

Setzt man die obigen Ausdrücke von $\vec{a}_k$ und J^k in Gleichung (18) ein, so ergibt sich:

$$\vec{grad}\, h = \vec{e}_j \cdot \left[\frac{\partial x^j}{\partial s^k} \cdot g^{ik} \cdot \frac{\partial N_n}{\partial s^i}\right] \cdot h^n = \vec{e}_j \cdot B_n^j \cdot h^n = \vec{e}_j \cdot J^j \tag{19}$$

Das Glied in der eckigen Klammer ist die Gradientmatrix $\partial N_n / \partial x^i$ und $J^j = B_n^j \cdot h^n$ sind die cartesischen Komponenten des Gradienten, obwohl die Interpolationsfunk-

tionen N_n nur nach den Lokalkoordinaten s^i abgeleitet werden müssen. Mit Hilfe der Gradientmatrix kann man dann den Integrand in Gleichung 15 berechnen.

10.3.4 Numerische Integration über die krummlinigen Elemente.

Die in den Gleichungen 14, 15 und 16 definierten Integranden müssen über die krummlinigen Elemente integriert werden. Da die Beziehungen zwischen Globalkoordinaten x^i und Lokalkoordinaten s^j bekannt sind, kann man die Integrationen im lokalen Raum ausführen. In diesem Raum sind die Elementseiten oder Elementflächen mit den Koordinatenlinien oder Koordinatenflächen parallel und man hat für die Integrationsgrenzen einfach $(-1;+1)$ oder $(0;+1)$.

Integriert man im lokalen Raum, so müssen die infinitesimale Länge dL (in 1-D Elementen), Oberfläche dS (in 2-D Elementen) und Volumen dV (in 3-D Elementen) mit Hilfe des kovarienten Metriktensors g_{lk} ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \text{1-D Element:} \quad & dL = \sqrt{det\, g_{lk}}\, ds^1 \\ \text{2-D Element:} \quad & dS = \sqrt{det\, g_{lk}}\, ds^1\, ds^2 \\ \text{3-D Element:} \quad & dV = \sqrt{det\, g_{lk}}\, ds^1\, ds^2\, ds^3 \end{aligned}$$

Damit kann man die Gleichungen 14, 15 und 16 in folgender Form schreiben:

$$C_{nm} = \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} S_o\, N_m N_n \sqrt{det\, g_{lk}}\, ds^1\, ds^2\, ds^3 \tag{20}$$

$$A_{nm} = \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} \frac{\partial N_m}{\partial x^i}\, K^{ij} \frac{\partial N_n}{\partial x^j} \sqrt{det\, g_{lk}}\, ds^1\, ds^2\, ds^3 \tag{21}$$

$$\begin{aligned} QT_m = {} & QV \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} N_m \sqrt{det\, g_{lk}}\, ds^1\, ds^2\, ds^3 \\ & + QS \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} N_m \sqrt{det\, g_{lk}}\, ds^1\, ds^2 \end{aligned} \tag{22}$$

Für die 1-D, 2-D und 3-D Elemente werden selbstverständlich einfache, zweifache und dreifache Integrale verwendet, obwohl alle Elemente im 3-D Raum eingebettet sind.

Die numerische Integration wird nach der Methode von GAUSS-LEGENDRE ausgeführt. Nach dieser Methode berechnet man den numerischen Wert des Integranden an gewissen Integrationsstützpunkten und die gewichtete Summe dieser Werte ergibt das gesuchte Integral. Will man z.B. eine Funktion $f(s^1, s^2, s^3)$ über ein 3-D Element integrieren, dann wird die folgende Gaußsche Integrationsformel benutzt:

$$\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(s^1, s^2, s^3) ds^1\, ds^2\, ds^3 = \sum_{p=1}^{N}\sum_{q=1}^{N}\sum_{r=1}^{N} f(s_p^1, s_q^2, s_r^3)\, w_p\, w_q\, w_r$$

Hierin bedeuten (s_p^1, s_q^2, s_r^3) die Lokalkoordinaten der Integrationsstützpunkte und w_p, w_q, w_r sind die zugehörigen Integrationsgewichte. N ist die Zahl der Integrationsstützpunkte in jeder Lokalkoordinatenrichtung und die Integrationsformel

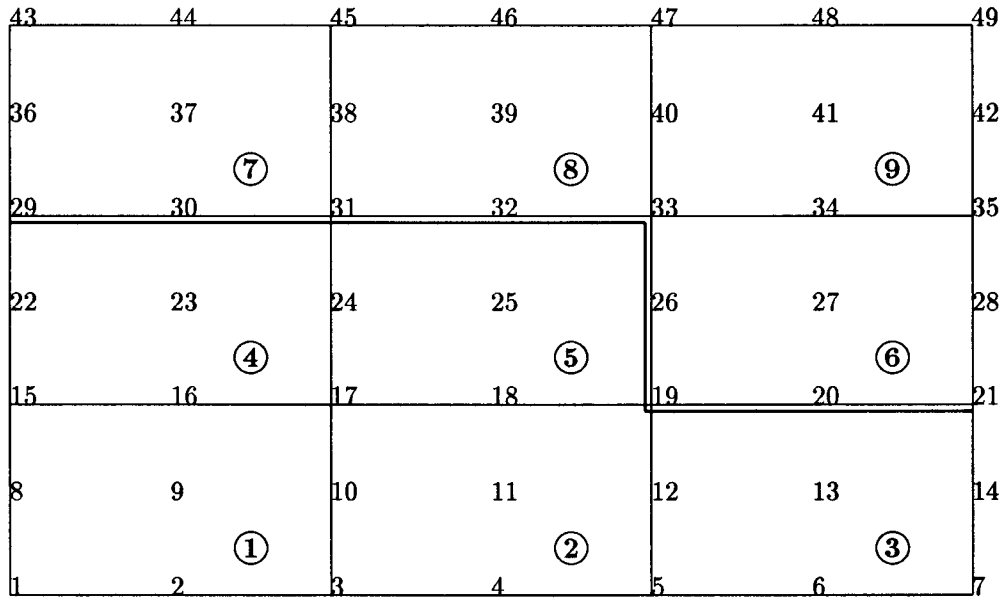


Abbildung 5: Einfaches Elementnetz mit Knotennummern und Elementnummern (eingekreist) zur Erklärung der Frontaleliminationsmethode. Die dicke Linie zeigt die Lage der "Front" nach der Elimination des fünften Elementes. Die "aktiven Knoten" liegen auf der "Front".

liefert die exakten Integralwerte für Polynome bis zum Grad $(2N-1)$. Im Rechenprogramm "MK1" ist $N=3$ eingesetzt. Es werden also 3, 9 und 27 Stützpunkte für die Integration auf 1-D, 2-D und 3-D Elemente benutzt. Dreiecke mit 7, Tetraeder mit 15 und dreieckige Prismen mit 21 Stützpunkten bilden eine Ausnahme. Numerische Werte für Stützstellen und Gewichte sind z.B. in SCHWARZ (1980) zu finden.

Nach der Berechnung der Elementmatrizen kann das Gleichungssystem (17) aufgebaut und gelöst werden.

10.3.5 Lösung des linearen Gleichungssystems.

Das lineare Gleichungssystem (17) wird in "MK1" ohne das zeitabhängige Glied und unter Anwendung der sogenannten *Frontlösungsmethode* gelöst. Die von B.M. IRONS (1970) entwickelte Frontlösungsmethode ist eine Abänderung des klassischen Gaußschen Algorithmus und ermöglicht die effiziente Lösung von sehr großen linearen Gleichungssystemen in der Anwendung der Methode der finiten Elemente. Da der Speicherplatzbedarf nicht von der Knotennumerierung abhängt, ist diese Methode für große 3-D Modelle besonders gut geeignet. Die ausführliche Beschreibung der Frontlösungsmehtode ist in diesem Rahmen leider nicht möglich, so daß hier nur einige allgemeine Hinweise gegeben werden. Einzelheiten findet man in IRONS (1970) und eine sehr verständliche Darstellung der Methode ist in KIRALY (1985) zu finden.

N	Aktive Knotenpunkte												
1	(1)	(2)	3	(8)	(9)	10	15	16	17				
2	(4)	5	(3)	(11)	12	(10)	15	16	17	18	19		
3	(6)	(5)	(7)	(13)	(12)	(14)	15	16	17	18	19	20	21
4	(22)	(23)	24	29	30	31	(15)	(16)	17	18	19	20	21
5	(25)	26	(24)	29	30	31	32	33	(17)	(18)	19	20	21
6	(27)	(26)	(28)	29	30	31	32	33	34	35	(19)	(20)	(21)
7	(36)	(37)	38	(29)	(30)	31	32	33	34	35	(43)	(44)	45
8	(39)	40	(38)	(46)	47	(31)	(32)	33	34	35			(45)
9	(41)	(40)	(42)	(48)	(47)	(49)		(33)	(34)	(35)			

Abbildung 6: Aktive Knotenpunkte und Eliminationsordnung der Gleichungen nach der Frontlösungsmethode für das Elementnetz in Abbildung 5. N = Elementnummer. Die Gleichung der eingekreisten Knotenpunkte wird eliminiert.

Das einfache Elementnetz von Abbildung 5 wird helfen die grundlegende Idee der Frontalelimination verständlich zu machen.

In dem *klassischen Gaußschen Algorithmus* werden die Gleichungen der Knotenpunkte in der Reihe der Knotennumerierung gespeichert und eliminiert. Gleichung 9 z.B. kann nicht vor Gleichung 3 gespeichert und eliminiert werden. Die aus den Elementbeiträgen aufgebaute symmetrische Gesamtmatrix $\sum A_{nm}$ des Gleichungssystems weist im wesentlichen eine Bandstruktur auf und die "Bandbreite" N_B ist durch das Maximum der maximalen Knotennummerndifferenzen pro Element gegeben. Für die Elimination der Gleichungen muß man im Zentralspeicher $(N_B \cdot (N_B - 1)/2) + N_B$ Plätze reservieren, was dem oberen "Dreieck" einer $N_B \times N_B$ Matrix entspricht (es handelt sich hier um eine "Arbeitsmatrix", in der die Elimination ausgefürt wird). Da die Bandbreite von der Knotennumerierung abhängt, wird auch der Speicherplatzbedarf von der Knotennumerierung abhängen.

Ganz anders ist das in der *Frontlösungsmethode*, wo die Gleichungen elementweise, unabhängig von der Knotennumerierung aufgebaut und eliminiert werden. Der Aufbau der Gleichung eines Knotenpunktes beginnt dann, wenn die entsprechende Knotennummer das erste Mal in der Elementliste erscheint. Die Gleichung wird sofort nach der letzten Erscheinung der Knotennummer in der Elementliste eliminiert. Die Elimination ist durchaus gerechtfertigt, weil die danach stehenden Elemente diese Knotennummer nicht mehr enthalten und keinen Betrag zu dieser Gleichung liefern. Zwischen ihrer ersten und letzten Erscheinung in der Elementliste werden die Knotenpunkte "aktiv" genannt und nur die Gleichungen der "aktiven Knoten" werden im Zentralspeicher gespeichert.

Die aktiven Knoten bilden eine *Front*, welche die schon eliminierten — das heißt eingelesenen — Elemente von den noch nicht behandelten Elementen trennt (siehe

Abbildung 5). Die sogenannte *Frontbreite* N_F wird durch die Zahl der auf der längsten Front liegenden Knotenpunkte bestimmt und für die Elimination der Gleichungen muß man im Zentralspeicher $(N_F \cdot (N_F - 1)/2) + N_F$ Plätze reservieren, was wiederum dem oberen "Dreieck" einer $N_F \times N_F$ Matrix entspricht.

In der Frontlösungsmethode wird der Speicherplatzbedarf durch die Frontbreite N_F bestimmt und die Frontbreite hängt davon ab, in welcher Ordnung die Elemente eingelesen werden. In 3-D Modellen wird die optimale Frontbreite N_F fast immer viel kleiner sein, als die optimale Bandbreite N_B, welche für die klassische Gaußsche Elimination nötig wäre. Für das Elementnetz in Abbildung 5 ist die Bandbreite $N_B = 17$ (mit 153 Speicherplätzen in der Arbeitsmatrix), aber die Frontbreite ist nur $N_F = 13$ (mit nur 91 Speicherplätzen in der Arbeitsmatrix). In einem 3-D Modell wäre der Unterschied selbstverständlich viel grösser.

Abbildung 6 zeigt die aktiven Knotenpunkte beim Einlesen der Elemente und die Eliminationsordnung der Gleichungen. Nach dem Einlesen von Element 1 können z.B. die Gleichungen 1, 2, 8 und 9 sofort eliminiert werden, obwohl die Gleichung 3 noch nicht komplett ist. Die Stelle der eliminierten Gleichungen wird in der Arbeitsmatrix für die neuen Gleichungen des folgenden Elementes frei gemacht. In der Frontlösungsmethode wird die Gesamtmatrix $\sum A_{nm}$ eigentlich niemals vollständig aufgebaut, weil Kompilation (Aufbau) und Elimination der Gleichungen parallel verlaufen.

Die Frontlösungsmethode hat aber noch andere praktische Vorteile. Erwähnenswert ist, unter anderem, daß die *Knotenpunkte nicht durchlaufend numeriert werden müssen.* Die Knotennummern sind eigentlich nur "Namen", welche die Knotenpunkte identifizieren. Man kann also gewisse Knotennummern für bestimmte geologische Schichten zuordnen, was die automatische Generierung der 3-D Elemente wesentlich erleichtert. Im Malmkarstmodell wurden z.B. 4000 Knotennummern für jede geologische Schicht reserviert, aber nicht immer vollständig benutzt:

Oberfläche des Modells	von	1	bis	2000
Tertiär 1	von	2001	bis	6000
Tertiär 2	von	6001	bis	10000
Kreide	von	10001	bis	14000
Malm	von	14001	bis	18000

Es besteht auch die Möglichkeit, neue Elemente und neue Knotenpunkte in das Modell einzubauen, ohne dabei die alten Knotenpunkte neu numerieren zu müssen. Eine lokale Verfeinerung des Elementnetzes kann somit wirklich "lokal" bleiben und mit minimalem Arbeitsaufwand ausgeführt werden.

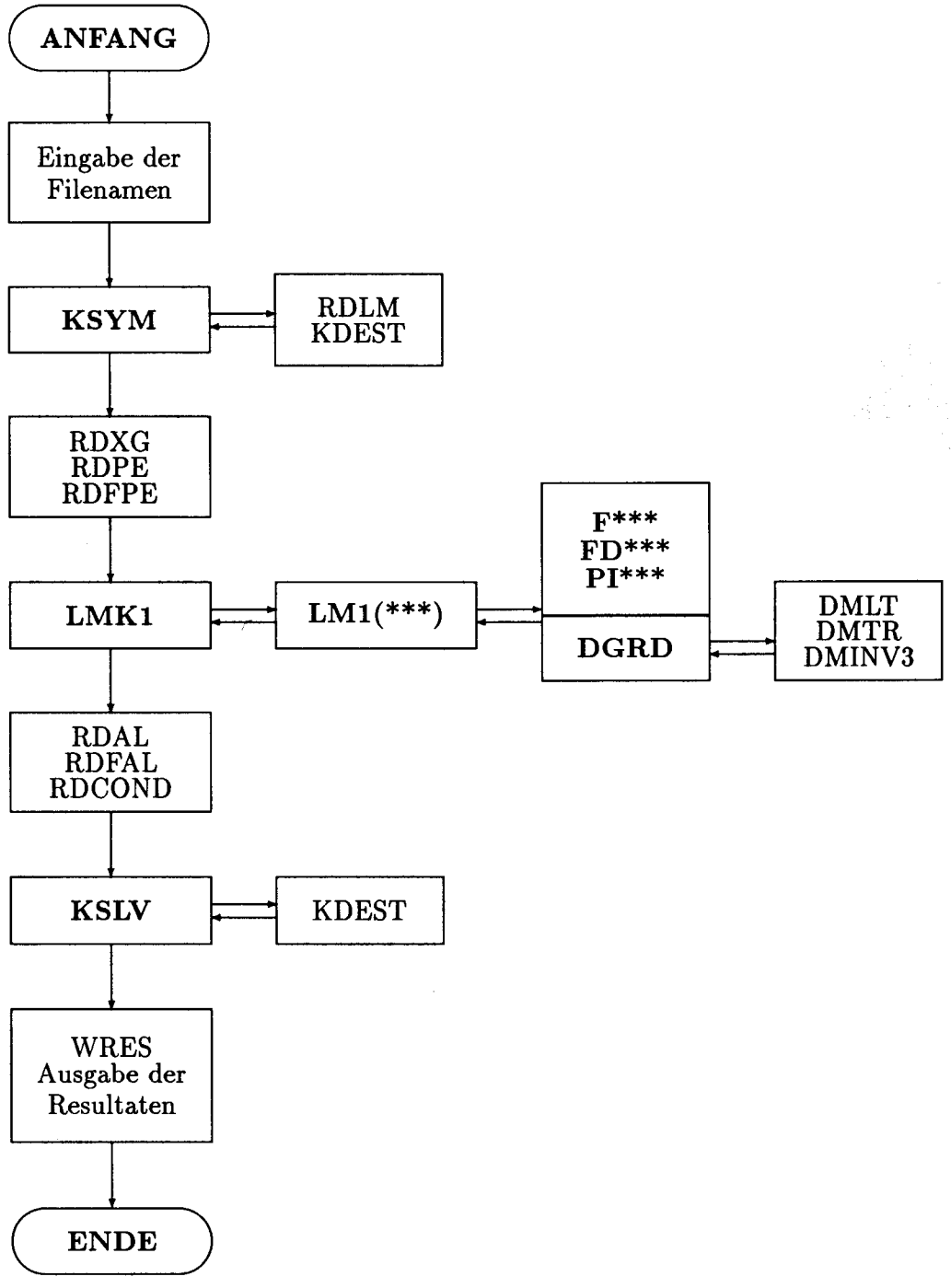


Abbildung 7: Flußdiagramm für das Rechenprogramm "MK1". Die wichtigsten Programmeinheiten sind fettgedruckt.

10.4 Handhabung des Modells.

10.4.1 Struktur des Programmpaketes.

Die Lösung des Gleichungssystems (17):

$$\sum_{LM=1}^{NLM} A_{nm} \cdot h^n = \sum_{LM=1}^{NLM} QT_m$$

liefert für jeden Knotenpunkt den Potentialwert h und den Zu- oder Abfluß QT. Das Rechenprogramm "MK1" löst das lineare Gleichungssystem (17) für 1-D, 2-D und 3-D stationäre Grundwasserströmungen. In "MK1" sind keine Pre- oder Postprocessing Programme – wie z.B. Vorbereitungs- oder Darstellungsprogramme – enthalten, da diese weitgehend geräteabhängig sind.

Das Programmpaket ist modular aufgebaut und die Programmstruktur ist in Abbildung 7 dargestellt. Neben einigen Eingabe- und einer Ausgaberoutine (RD***, WRRES) ruft das Hauptprogramm nur drei grosse Programmeinheiten auf: KSYM, LMK1 und KSLV.

Der Block KSYM bereitet die Daten für die vorher beschriebene Frontlösungsmethode (siehe 10.3.5) vor. Das heißt, mit KSYM berechnet man die Frontlänge und bestimmt in welcher Ordnung die Gleichungen aufgebaut und eliminiert werden müssen. Es handelt sich hier um eine "symbolische Elimination" der Gleichungen, ohne numerische Rechnung.

Die grösste Programmeinheit, LMK1, berechnet durch numerische Integration die Elementmatrizen (15) und (16) für alle 1-D, 2-D und 3-D quadratische Elemente (siehe 10.3.2). Das Unterprogramm LM1 bestimmt die Natur des Elementes und wählt die vorgeschriebenen Interpolationsfunktionen (F*** und FD***) sowie die geeigneten Gauss'schen Integrationspunkte aus (PI***). Die Routine DGRD berechnet dann mit Hilfe von einfachen Matrixoperationen (DMLT, DMTR, DMINV3), die in 10.3.3. beschriebene Gradientmatrix.

Der eigentliche Aufbau und die numerische Lösung des Gleichungssystems geschieht in KSLV, nachdem die Randbedingungen eigelesen wurden (RDAL, RDCOND). Schließlich schreibt WRES die berechneten Resultate auf ein Resultatsfile, welches man für die graphische Darstellung der Ergebnisse benutzen kann.

10.4.2 In- und Outputfiles.

Die Eingabedaten sind in drei Inputfiles abgespeichert: im Elementefile, im Koordinatenfile und im Parameterfile.

Das *Elementefile* enthält für jedes Element eine Liste der Knotenpunkte, die das Element aufbauen, sowie die Nummer der Durchlässigkeitsklasse und die Nummer der Infiltrationsklasse, welche dem Element zugeordnet sind. Es ist besonders wichtig, in welcher Ordnung die Knotenpunkte eines Elementes aufgelistet sind. Abbildung 8 zeigt die Ordnung der Knotenpunkte für alle in MK1 verwendete Elementtypen. Durch das Elementefile ist die Topologie des Modells festgelegt und die

Reihenfolge der Elemente muß so bestimmt werden, daß die Frontbreite möglichst klein bleibt.

Das *Koordinatenfile* enthält die Globalkoordinaten (x,y,z) der Knotenpunkte. Drei Maßstabsfaktoren gestatten die in den Benutzereinheiten vorgegebenen Koordinatenwerte (z.B. cm) in Meter zu transformieren. Ist der z-Maßstabsfaktor gleich Null gesetzt, dann sind die Rechnungen für ein 2-D Modell ausgeführt. Durch das Elementefile und das Koordinatenfile ist die Geometrie des Modells eindeutig festgelegt, diese Files werden nur selten geändert.

Die Randbedingungen (z.B. Fixpotentiale oder Pumpmengen) sowie die numerischen Werte der Durchlässigkeits- und Infiltrationsklassen sind im *Parameterfile* enthalten. Anisotrope Durchlässigkeiten mit beliebiger Orientierung der Hauptpermeabilitäten können in Matrixform eingegeben werden. Für die Berechnung der verschiedenen Varianten wird fast ausschliesslich nur das Parameterfile geändert.

Das *Resultatsfile* enthält neben gewissen Kontrollparametern den Potentialwert und die Zu- oder Abflüsse für jeden Knotenpunkt.

10.4.3 Hilfsprogramme für die Vorbereitung der Eingabedaten und für die Analyse der Resultate.

Die Vorbereitung der Eingabedaten, insbesonders die Konstruktion der Modellgeometrie, sowie die Darstellung der Resultate sind für grosse 3-D Modelle besonders schwierig und benötigen die Anwendung von vielen Hilfsprogrammen ("preprocessing" und "postprocessing" Routines). Einige dieser Hilfsprogramme sind für ein spezifisches Problem "zugeschnitten" und können nicht ohne weiteres für andere Modelle angewendet werden. Hier werden nur die wichtigsten Hilfsprogramme erwähnt.

Die Konstruktion der 3-D Geometrie beginnt mit dem Entwurf eines 2-D Elementnetzes an der topographischen Oberfläche. Dieses Netz wird dann nach unten auf die verschiedenen geologischen Strukturflächen projiziert. Die Digitalisierung des 2-D Elementnetzes und der geologischen Strukturflächen geschieht mit den Hilfsprogrammen DIGI und DIGISO. Die 3-D Elemente werden dann automatisch mit GLMK3 generiert und die 3-D Koordinaten der Knotenpunkte werden mit GCORMK3 berechnet.

Die 3-D Resultate (Aequipotentiale) werden auf den Strukturflächen oder auf Blockdiagrammen und Profilen dargestellt. Dazu verwendet man die Programme MSCR2 und MPLO2, beziehungsweise HISCR und HIPLO, welche die unsichtbaren Linien unterdrücken. Bildschirmversionen sind mit "SCR" und Plotterversionen mit "PLO" bezeichnet. Die Elementflächen für die Blockdiagramme werden mit dem Programm GRELM aus einem 3-D Elementefile herausgenommen.

Die Berechnung der Quellterme an der Malmoberfläche (Grundwasserneubildung von oberen Schichten oder Exfiltration nach oben) geschieht mit Hilfe des Programmes DSOUT. Diese Aufgabe ist nicht sehr einfach und die Lösung erfordert die Vorbereitung und Anwendung von vielen Hilfsfiles.

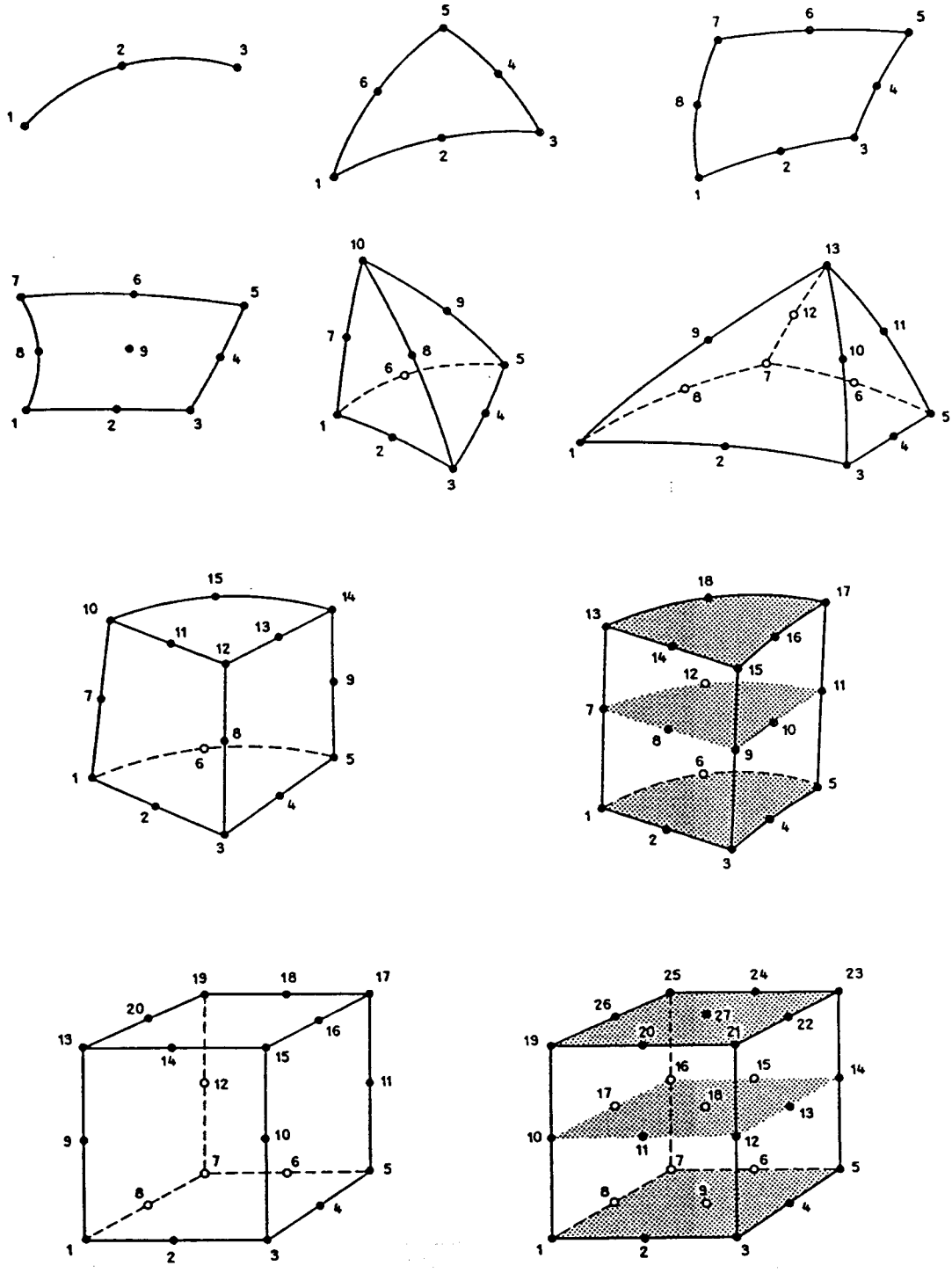


Abbildung 8: Ordnung der Knotennummern im Elementfile für die verschiedenen Elementtypen.

10.8 Beschreibung der Schlußversionen.

10.8.1 Anwendung der "Trial und Error" Methode für das Malmkarstmodell.

Die in den vorigen Abschnitten beschriebenen Varianten haben gezeigt, daß mit den bisher angenommenen Hypothesen über die Durchlässigkeitsverteilung keine der wesentlichen Züge des Malmpotentialfeldes (d.h. Einbuchtung Memmingen – München – Regensburg, Potentialwall Ulm – Augsburg und Potentialtief bei Straubing) simuliert werden konnten. Aber ohne eine annehmbare Permeabilitätsverteilung wäre das Modell für Prognoseversuche nicht geeignet.

In diesem Abschnitt wird versucht, das sogenannte "inverse Problem" (d.h. die indirekte Bestimmung der regionalen Durchlässigkeitsverteilung) mit der "Trial and Error"-Methode zu lösen. Bei diesem Verfahren werden die gleichen Randbedingungen (d.h. Grundwasseroberfläche und Nullflußgrenzen) wie bisher angenommen. Eine neue und wichtige Annahme besteht darin, daß man die durch ANDRES und FRISCH (1981) gezeichnete *Potentialverteilung an der Malmoberfläche* als richtig und somit als *Eichungskriterium* betrachtet. Die Durchlässigkeiten – diesmal als freie Variable betrachtet – werden solange verändert bis die wichtigsten Züge des Malmpotentialfeldes damit simuliert werden können.

Am Ende kann untersucht werden, ob die so erhaltene Durchlässigkeitsverteilung realistisch oder unwahrscheinlich ist. Je nach dem Fall kann auch das "Eichungskriterium" (d.h. die als bekannt angenommene Malmpotentialverteilung) in Frage gestellt und ihrerseits verändert werden.

Man muß erwähnen, daß bei dieser Methode die schrittweise Verbesserung der Durchlässigkeitswerte weitgehend "intuitiv" ausgeführt wird, wobei die Erfahrung und die hydrogeologischen Konzeptionen des Modellierers natürlich eine ziemlich große Rolle spielen. Dies ist der Fall besonders bei 3-D Modellen, wo der Effekt der Veränderungen nur schwer voraussehbar ist und eine große Anzahl von Varianten "ausprobiert" werden muß bis man ein annehmbares Endresultat erhält. Die Methode ist also nicht "objektiv" und "eindeutig" in dem Sinne, daß die Lösung nicht ohne weiteres mechanisch, nach einem von vornherein bestimmten Algorithmus erhalten werden kann.

Drei verschiedene Modellkonzeptionen werden in den folgenden Abschnitten kurz beschrieben:

1 Ein 2-D Modell, welches nur den Malmaquifer südlich der Donau simuliert.

2 Ein 3-D Modell mit koninuierlichen, "equivalenten" Permeabilitäten.

3 Ein 3-D Modell, in dem das Karstnetz oder die Störungen mit konkret eingeführten, hochpermeablen 1-D und 2-D Elementen simuliert werden.

Diese Varianten sollen nicht nur die unterschiedlich mögliche Arbeitsmethodik zeigen, sondern auch die Wichtigkeit der hydrogeologischen Konzeptionen, welche die Grundlage der Modellierung bilden.

10.8.2 Ein 2-D Modell für den Malmaquifer südlich der Donau.

Am Anfang des Forschungsvorhabens diskutierte man eingehend über die Vorteile und die Nachteile der 2-D und 3-D Modelle. Die nachfolgend beschriebene Variante soll zeigen, inwieweit die 2-D Modelle dazu geeignet sind, eine Lösung für das Problem des Malmkarstprojektes zu finden.

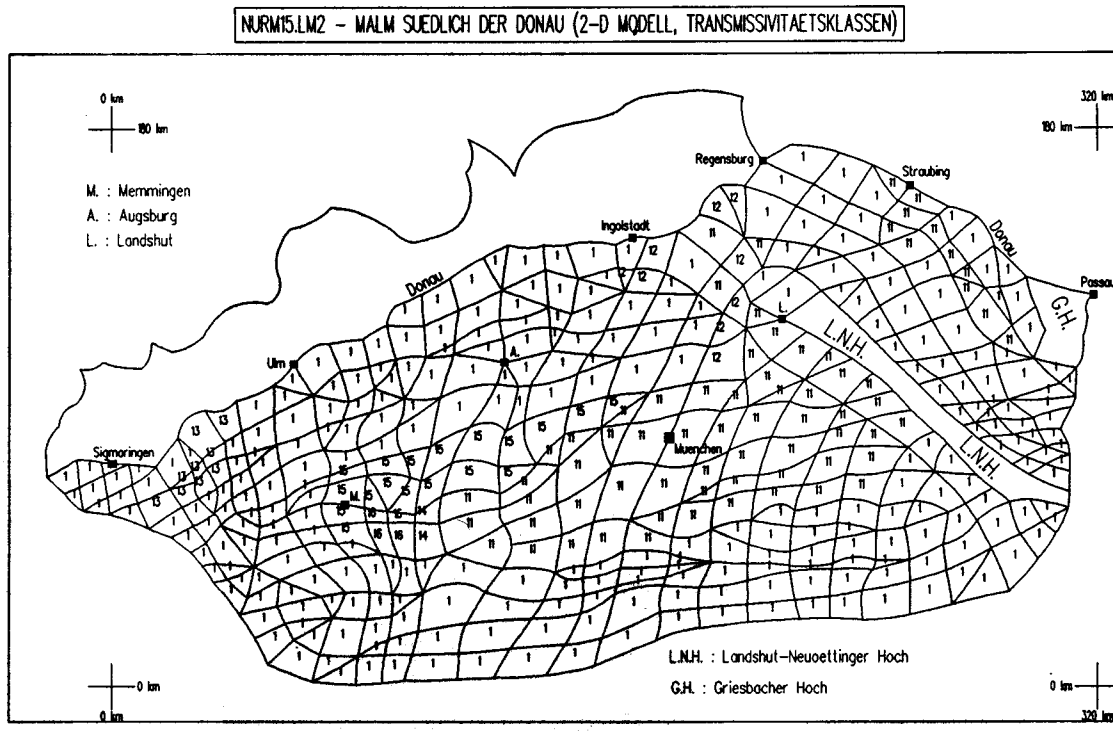
Das 2-D Elementnetz ist in Abbildungen 9 und 10 dargestellt, es handelt sich um den bedeckten Malmaquifer südlich der Donau. Diese bildet die nördliche und nordöstliche Modellgrenze bis Passau. Auf dem Landshut-Neuöttinger Hoch und auf dem Griesbacher Hoch ist kein Malm vorhanden, so bilden diese Strukturen ein "Loch" im 2-D Modellgebiet. Die Randbedingungen wurden wie folgend vorgegeben:

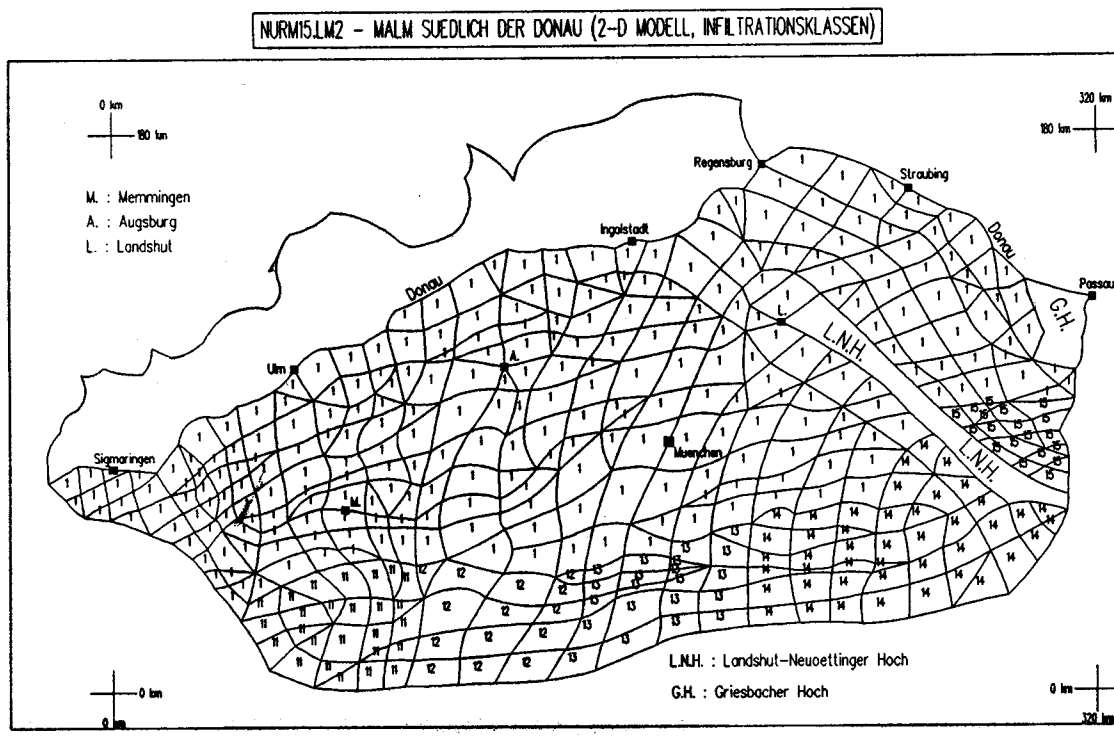
- Fixpotentiale längs der Donau bis Regensburg, obwohl die Donau und der Malmaquifer nicht überall in direkter Verbindung stehen.
- Fixpotentiale an drei Knotenpunkten in der Gegend von Straubing (zwischen Regensburg und Passau).
- Nullflußgrenzen an den übrigen Rändern des Modells.

Will man nun die von ANDRES und FRISCH (1981) gezeichnete Malmpotentialverteilung simulieren, dann muß man nicht nur eine realistische Transmissivitätsverteilung, sondern auch eine vernünftige Hypothese über die Verteilung der Grundwasserneubildung an der Malmoberkante vorgeben. Die Grundwasserneubildung an der Malmoberkante ist aber unbekannt und ihre indirekte Bestimmung sollte eigentlich durch die Modellierung erreicht werden. Transmissivitäten und Grundwasserneubildung müssen also gleichzeitig verändert werden bis man das gewünschte Ergebnis, d.h. eine dem Eichungskriterium ähnliche Potentialverteilung erhalten hat.

Abbildung 11 zeigt die mit der Variante "NURM15" erhaltene Potentialverteilung. Die $10\,m$ Äquipotentiallinien sind gewiß nicht mit den von ANDRES und FRISCH (1981) gezeichneten Grundwassergleichen identisch, aber die wichtigsten Züge des Eichungskriteriums sind durchaus vorhanden. Mit zusätzlicher "Fleißarbeit" (Verfeinerung des Elementnetzes, usw.) könnte man die Übereinstimmung zwischen Modellresultat und Eichungskriterium natürlich noch verbessern. Die Transmissivitätsklassen und die Infiltrationsklassen der Elemente sind in Abbildungen 9 und 10 dargestellt, die den Klassen zugeteilten numerischen Werte sind aus Abbildung 12 ersichtlich. Da die Malmmächtigkeit mindenstens $100\,m$ beträgt, sind die entsprechenden Permeabilitäten etwa 2 Grössenordnung kleiner als die Transmissivitäten. Die Regionalwerte von $10^{-4}\,[m/s]$ bis $10^{-7}\,[m/s]$ scheinen eher zu klein für die örtlich stark verkarsteten Bereiche, beziehungsweise für die dazwischenliegenden, wenig verkarsteten, d.h. nur geklüfteten Zonen.

Die Infiltrationen, die man für diese Variante annehmen muß sind sehr klein: weniger als $0.032\,[mm/Jahr]$. Das bedeutet, daß die Grundwasserneubildung auf der ganzen 2-D Modelloberfläche etwa $0.028\,[m^3/s]$ beträgt. Diese Menge muß längs der





Abbildungen 9 und 10: Transmissivitätsklassen und Infiltrationsklassen für die Variante "NURM15".

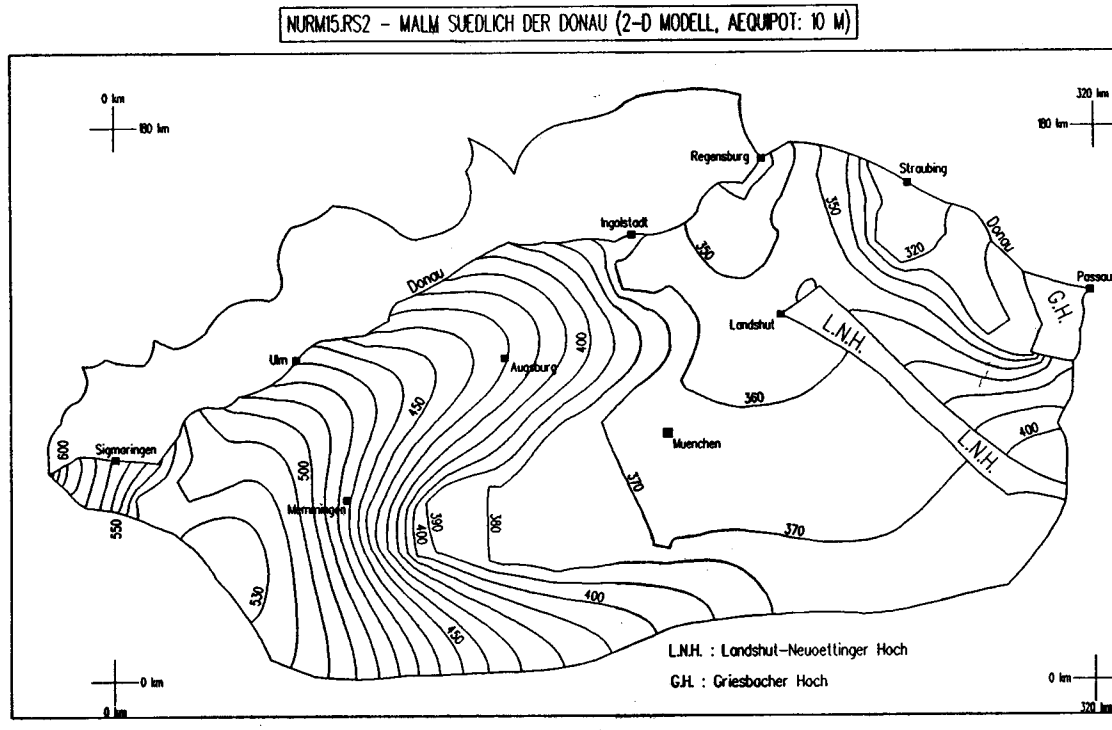


Abbildung 11: Grundwassergleichen im Malmaquifer südlich der Donau für die Variante "NURM15".

Transmissivitäten		Infiltrationen		
Klasse	Wert $[m^2/s]$	Klasse	Wert $[mm/Jahr]$	Wert $[m^3/s \cdot m^2]$
01	$1.0 \cdot 10^{-5}$	01	0.0315	$1.0 \cdot 10^{-12}$
11	$1.0 \cdot 10^{-3}$	11	0.0189	$0.6 \cdot 10^{-12}$
12	$1.0 \cdot 10^{-2}$	12	0.0189	$0.6 \cdot 10^{-12}$
13	$5.0 \cdot 10^{-4}$	13	0.0189	$0.6 \cdot 10^{-12}$
14	$1.0 \cdot 10^{-4}$	14	0.0031	$1.0 \cdot 10^{-13}$
15	$1.5 \cdot 10^{-5}$	15	0.0252	$0.8 \cdot 10^{-12}$
16	$3.0 \cdot 10^{-5}$	16	0.0000	$0.0 \cdot 10^{+00}$

Abbildung 12: Transmissivitäten und Infiltrationen für die Variante "NURM15".

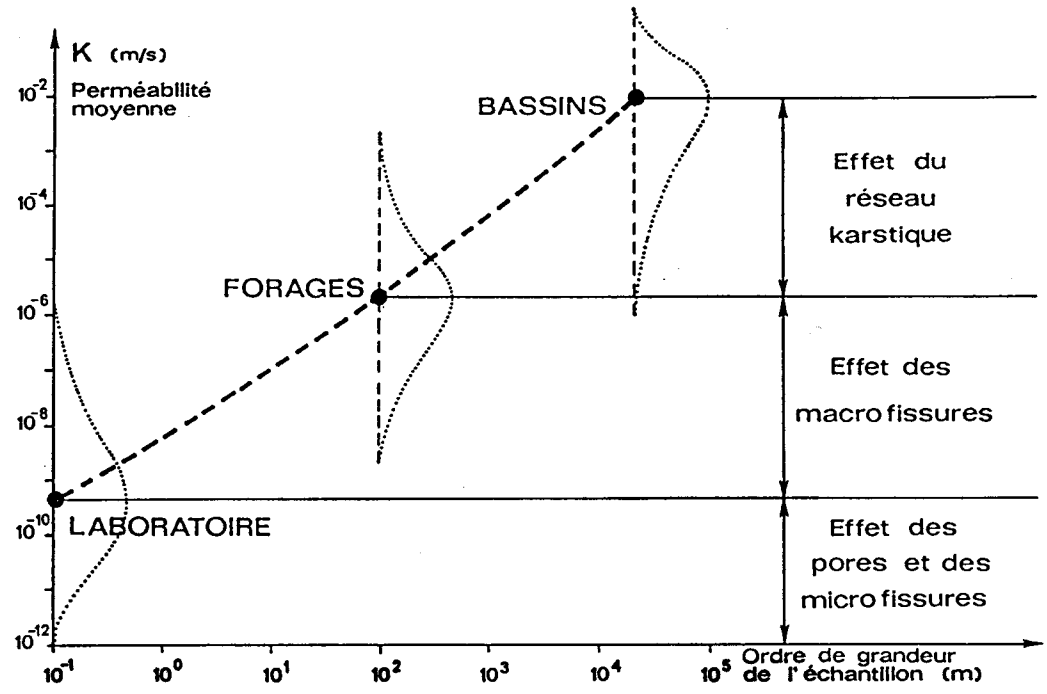


Abbildung 13: Maßstabseffekt in Karstaquiferen nach KIRALY (1975).

Donau ausfließen, wo die entsprechenden Potentiale vorgegeben sind: $0.023\,[m^3/s]$ bis Regensburg und $0.005\,[m^3/s]$ bei Straubing. Diese Werte sind unwahrscheinlich klein, sie können aber erhöht werden, indem man die Transmissivitäten und die Infiltrationen gleichzeitig mit der gleichen Zahl (> 1) multipliziert. Mit fünfzigmal größeren Transmissivitäten und Infiltrationen erhält man haargenau dieselbe Potentialverteilung wie in der Variante "NURM15", aber die Grundwasserneubildung (etwa $1.6\,[mm/Jahr]$) und die Exfiltration an der Donau (etwa $1.15\,[m^3/s]$ bis Regensburg und $0.25\,[m^3/s]$ bei Straubing) werden fünfzigmal größer sein. Die entsprechenden regionalen Permeabilitäten — $5.0 \cdot 10^{-3}\,[m/s]$ bis $5.0 \cdot 10^{-6}\,[m/s]$ — scheinen ziemlich groß, aber noch durchaus vertretbar (siehe z.B. den Maßstabseffekt in Abbildung 13).

Mit der 2-D Simulation des Eichungskriteriums kann man also auf jedem Element das *Verhältnis der Transmissivität zur Infiltration* bestimmen, nicht aber den Absolutwert der Transmissivitäten oder der Infiltrationen. Insbesondere kann man nicht entscheiden ob die eingegebenen Infiltrationen überhaupt möglich sind, weil das 2-D Modell "schluckt" alles was vorgegeben wird. Um die Unterschiede zwischen dem 2-D Modell und dem 3-D Modell besser erfassen zu können, sind einige Feststellungen zu treffen:

a. Die freie Grundwasseroberfläche, die Tertiärmächtigkeit und die wichtigsten Nebenvorfluter der Donau (Isar, Inn, Lech, Iller) können in das 2-D Modell nicht eingebaut werden, also haben sie keinen Einfluß auf die simulierten Resultate.

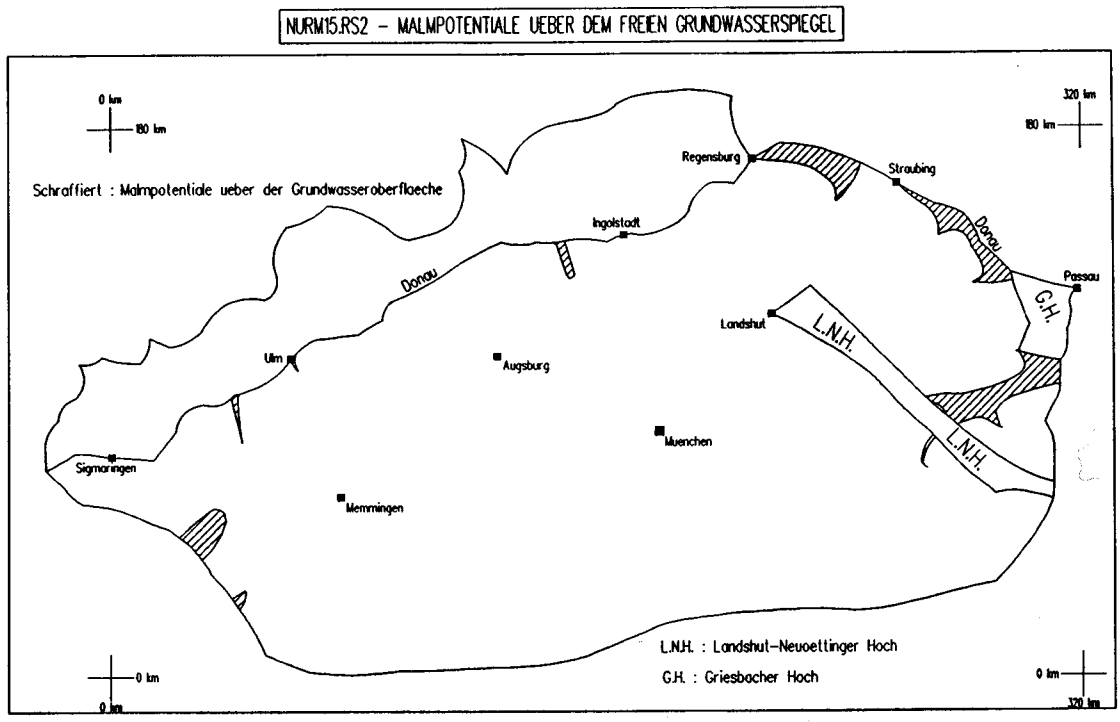


Abbildung 14: Potentiale über dem freien, oberflächenahen Grundwasserspiegel für die Variante "NURM15".

b. Im 2-D Modell sind die Infiltrationen überall auf der ganzen Malmoberfläche eingegeben, ausgenommen an den Kontenpunkten mit vorgeschriebenem Potential. In der Variante "NURM15" z.B. ist eine Grundwasserneubildung auch über die der Donau benachbarten Elemente — insbesondere zwischen Regensburg und Passau — vorgegeben.

c. Die Infiltrationswerte können "frei", d.h. ohne Beschränkung verändert werden bis man eine dem Eichungskriterium ähnliche Potentialverteilung erhält.

d. Die Potentialverteilung im abgedeckten Malmaquifer nördlich der Donau kann die Lösung des 2-D Modells südlich der Donau überhaupt nicht beeinflußen.

Dank den obigen Annahmen kann die von ANDRES und FRISCH (1981) entworfene Potentialverteilung ohne große Schwierigkeiten mit einem 2-D Modell simuliert werden, aber die hierfür getroffenen Annahmen sind nicht überall zutreffend. Insbesondere Punkte *b.* und *c.* können zu Widersprüchen führen. Abbildung 14 zeigt z.B., daß an einigen Stellen des Modells (zwischen Regensburg und Passau, im Inntal, im Tal der Schüssen) die Malmpotentiale über dem freien, oberflächennahen Grundwasserspiegel liegen. An diesen Stellen muß das Grundwasser *aus dem Malm nach oben fließen*, also kann hier keine nach unten gerichtete Infiltration stattfinden. Im 2-D Modell muß man aber überall Infiltrationen eingeben um das Eichungskriterium simulieren zu können (siehe Punkt *b.*), was natürlich in Widerspruch mit der

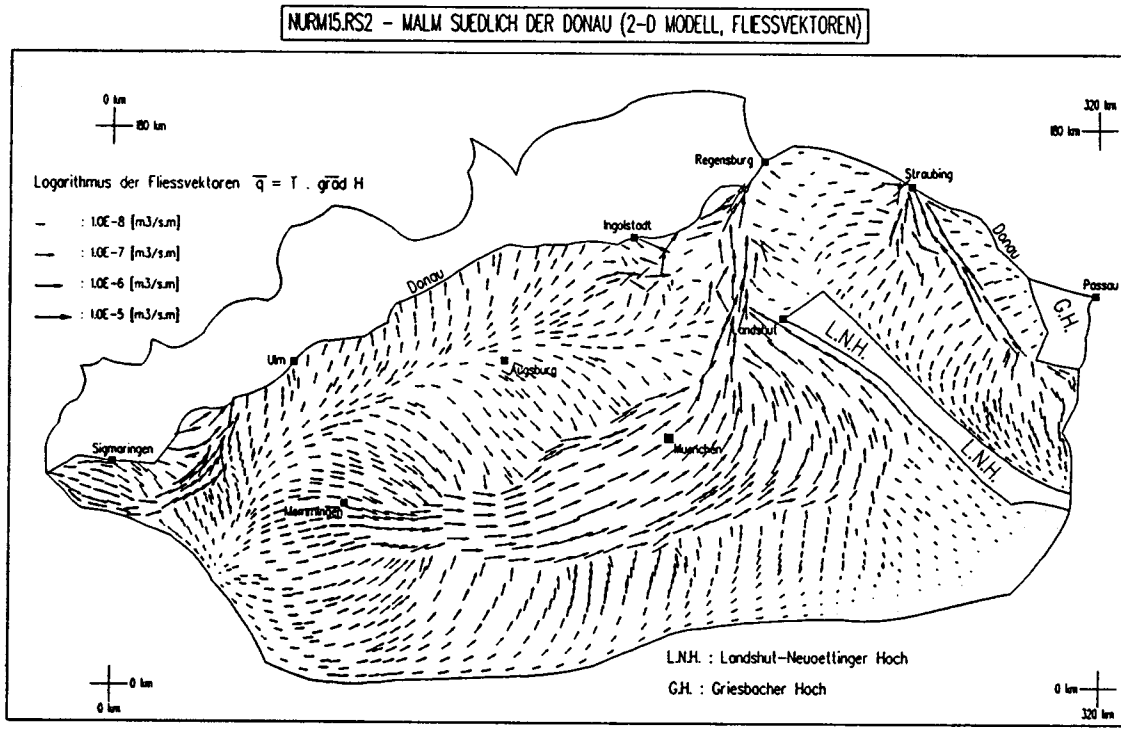


Abbildung 15: Fließvektoren für die Variante "NURM15".

"3-D Realität" steht. Gibt man auf den betroffenen Elementen eine *Exfiltration* an, dann werden die Aequipotentiale an diesen Stellen natürlich anders verlaufen. Nach diesen Überlegungen könnte man übrigens vermuten, daß auch die Aequipotentiale von ANDRES und FRISCH (1981) nach einer *2-D Vorstellung der Grundwasserbewegung* im Malmaquifer konstruiert wurden. Es besteht also die Möglichkeit, daß die Grundwassergleichen zwischen Regensburg und Passau, sowie im Inntal anders verlaufen als das im Eichungskriterium angenommen war.

Immerhin, auch wenn die 2-D Modellresultate mit Unsicherheiten behaftet sind dürfte man annehmen, daß die Grundwasserneubildung an der Malmoberkante unter $1.6\,[mm/Jahr]$ liegt und die Exfiltration längs der Donau weniger als $1.4\,[m^3/s]$ beträgt. Abbildung 15 zeigt die Fließvektoren für die Variante "NURM15", wobei die Vektorlängen in logarithmischem Maßstab dargestellt sind. Hier handelt es sich keineswegs um "Fließgeschwindigkeiten", sondern um spezifische Durchflüsse ("specific discharge") nach dem Darcy-Gesetz.

10.8.3 Übertragung der 2-D Modellresultate auf ein 3-D Modell.

Die 3-D Geometrie ist in den vorigen Abschnitten ausführlich beschrieben. Abgesehen von kleineren Veränderungen (wie z.B. die Unterteilung einiger Elemente südlich von Regensburg) wird die gleiche Geometrie für die Endversionen benutzt (siehe Blockdiagramm und Profile in Abbildungen 16 und 17).

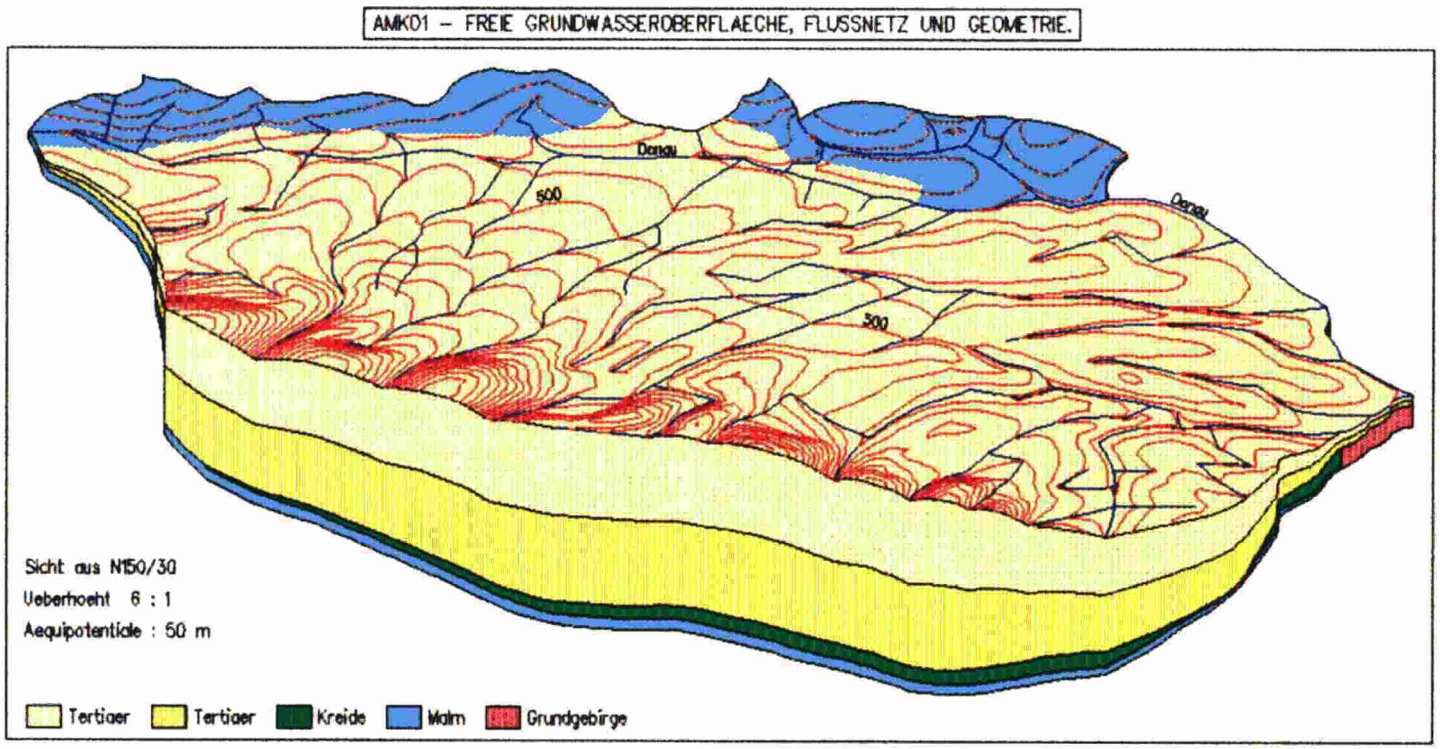


Abbildung 16: Geometrie des 3-D Modells.

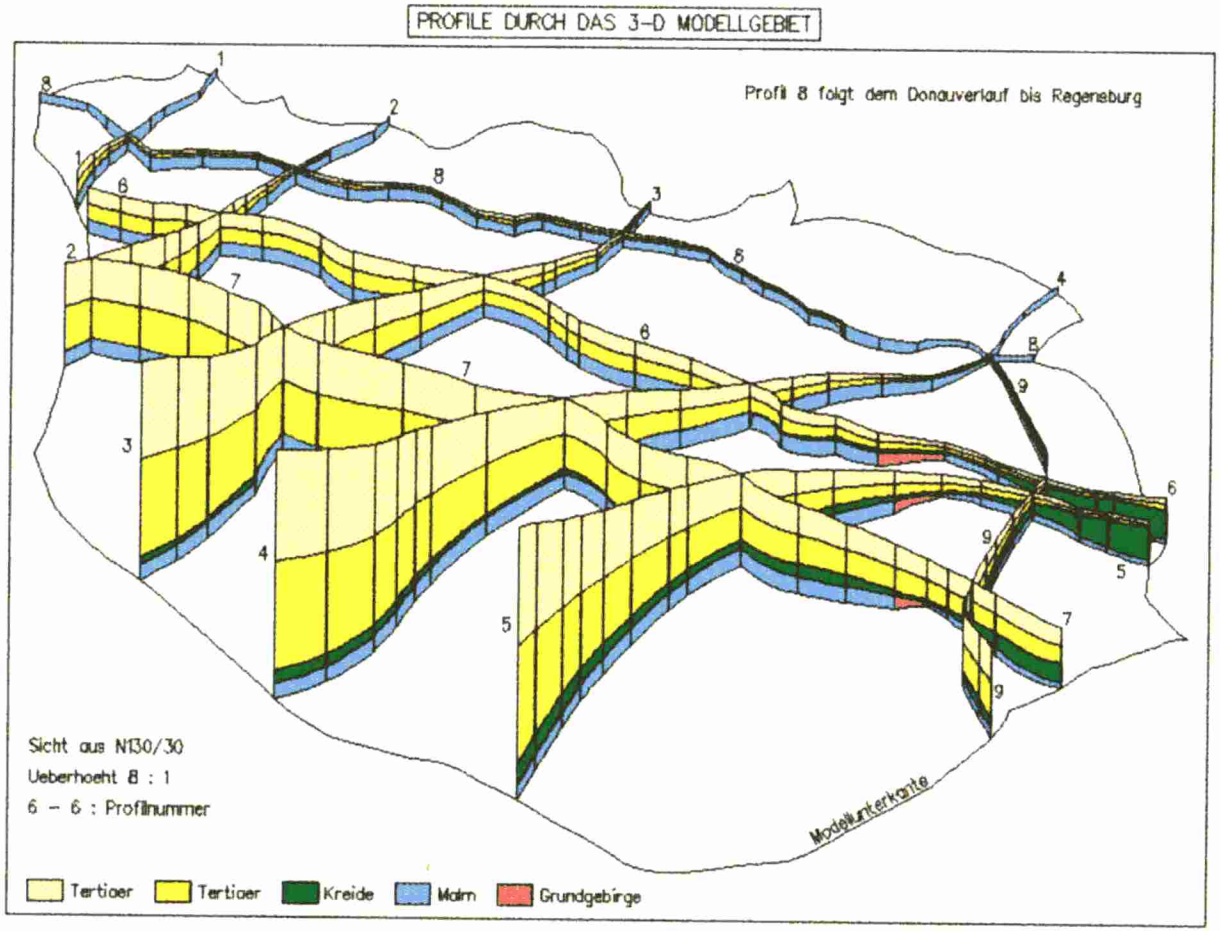
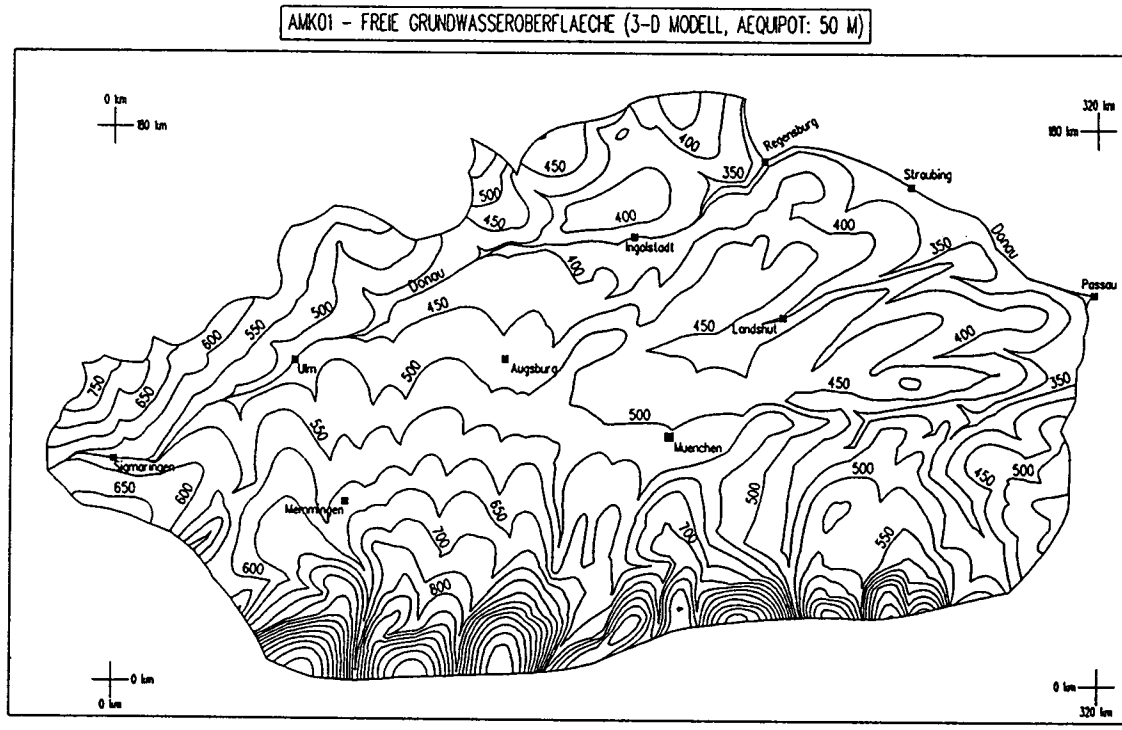
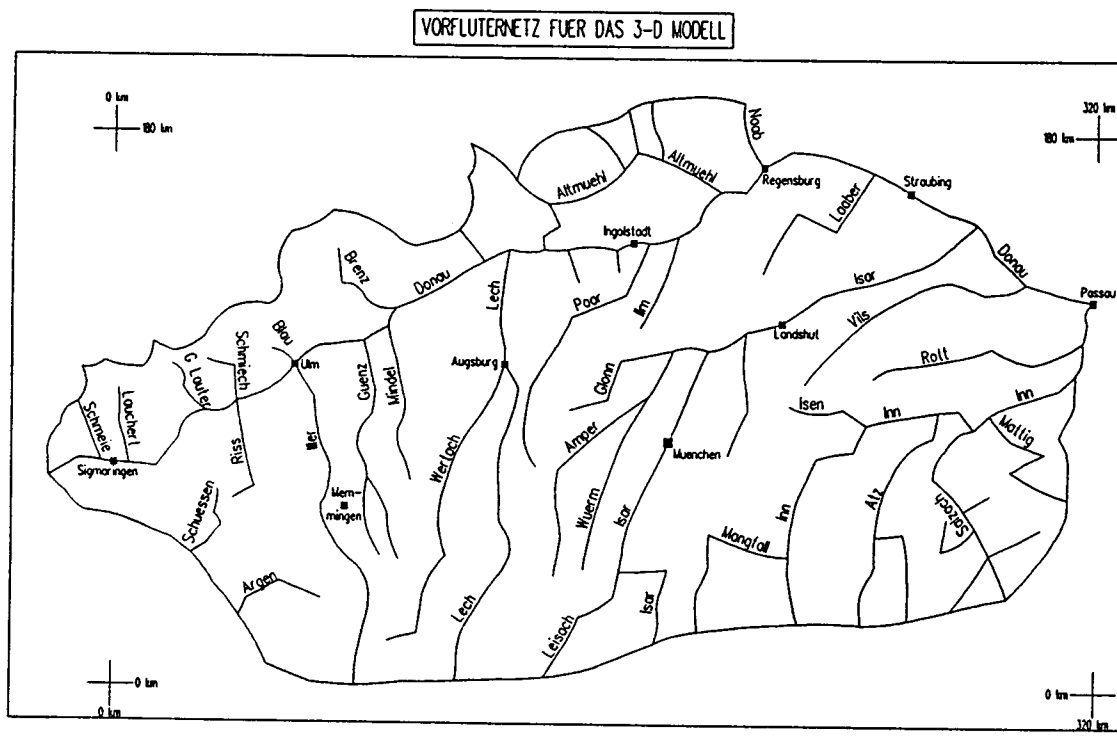


Abbildung 17: Profile durch das Modellgebiet.





Abbildungen 18 und 19: Freie Grundwasseroberfläche und Vorfluternetz für das 3-D Modell.

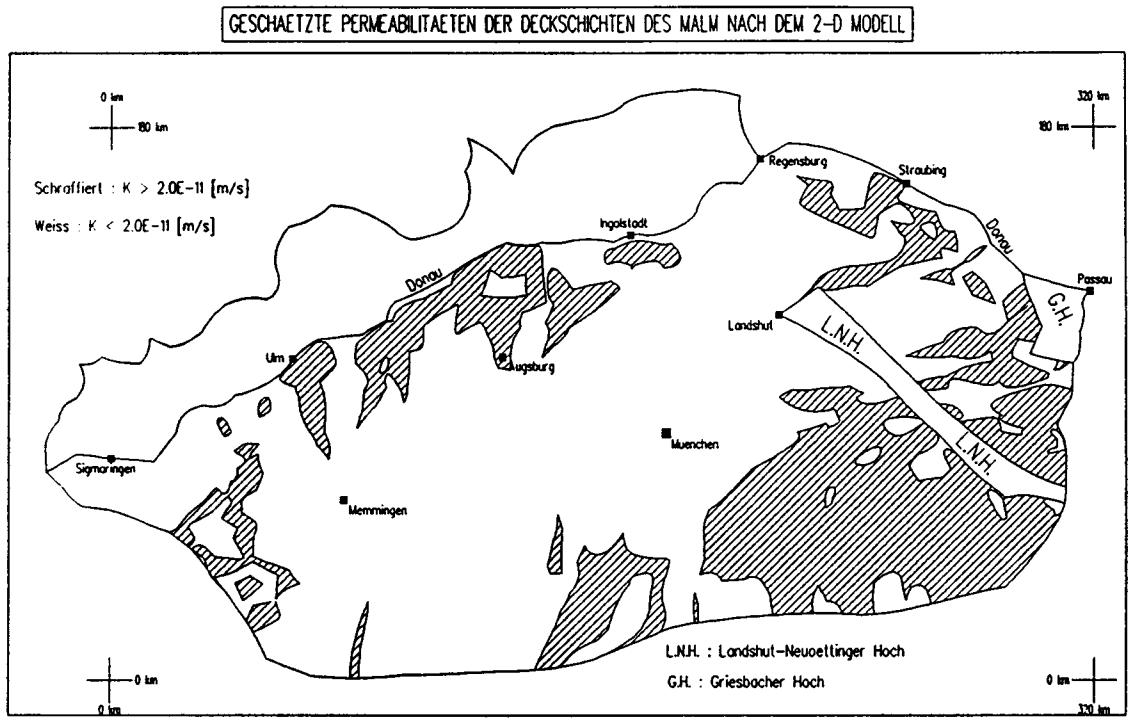


Abbildung 20: Geschätzte Permeabilitäten der Deckschichten.

Die *Randbedingungen* sind wie folgt vorgegeben:

- Nach unten und seitlich ist das Modell durch Nullflußflächen begrenzt.
- Die obere Modellgrenze ist durch den ungespannten und mit Fixpotentialen vorgegebenen freien Grundwasserspiegel bestimmt (siehe Abbildung 18).
- Die Form des freien Grundwasserspiegels ist hauptsächlich durch die Höhenlage der wichtigsten Lokalvorfluter beeinflußt (siehe Abbildung 19).

Die Versuchung ist groß, die mit dem 2-D Modell erhaltene Parameterverteilung (d.h. Transmissivitäten des Malm und Grundwasserneubildung an der Malmoberkante in der Variante "NURM15") einfach auf das 3-D Modell zu übertragen. Die erste 3-D Variante "AMK01" wird zeigen, ob diese Übertragung überhaupt möglich ist und ob man damit die gleiche Malmpotentialverteilung wie in der Variante "NURM15" erhält.

Die Übertragung der 2-D Transmissivitäten kann ohne große Schwierigkeiten ausgeführt werden. Die den 3-D Malmelementen zugeteilten Permeabilitäten sind etwa zwei Größenordnung kleiner als die entsprechenden Transmissivitäten im 2-D Modell. Die Verteilung der Permeabilitätsklassen im 3-D Malmaquifer ist in Abbildung 21 dargestellt und Abbildung 23 liefert die numerischen Werte für jede Klasse. Dabei wurde angenommen, daß die Malmmächtigkeit südlich der Donau etwa 400 bis 600 m beträgt.

Eine direkte Übertragung der mit dem 2-D Modell erhaltenen Grundwasserneubildung auf die Malmoberkante des 3-D Modells ist dagegen nicht möglich und hier liegt eine der grundlegenden Unterschiede zwischen 2-D und 3-D Modellen. Im 3-D Modell muß das Grundwasser durch die Tertiär- und Kreidesedimente sickern, bevor es in den Malmaquifer hineinfließen kann. Wo und wieviel Grundwasser in den Malm hineinsickert, das hängt hauptsächlich von der Verteilung der Permeabilitäten und der Gradienten in den Deckschichten ab. Insbesondere sollten die Permeabilitäten des Tertiärs so gewählt werden, daß die Grundwasserneubildung an der Malmoberkante des 3-D Modells größenordnungsmässig gleich der mit dem 2-D Modell erhaltenen Grundwasserneubildung bleibt.

Für eine erste Abschätzung kann man die von ANDRES und FRISCH (1981) benutzte Methode anwenden. Der Malm wird als Leaky-Aquifer betrachtet und es wird einfach das Darcy-Gesetz angewendet, indem man eine nicht unbedingt zutreffende Hypothese annimmt, nämlich, daß die Gradienten in den Deckschichten überall vertikal verlaufen:

$$Q = K_m \cdot \frac{\Delta h}{M}$$

hierin bedeuten:

Q = Grundwasserneubildung an der Malmoberkante in $[m^3/s \cdot m^2]$

K_m = Mittelwert der Permeabilitäten in den Deckschichten in $[m/s]$.

Δh = Potentialdifferenz zwischen der freien Grundwasseroberfläche in den Deckschichten des Malm und der Karstwasserdruckfläche in $[m]$.

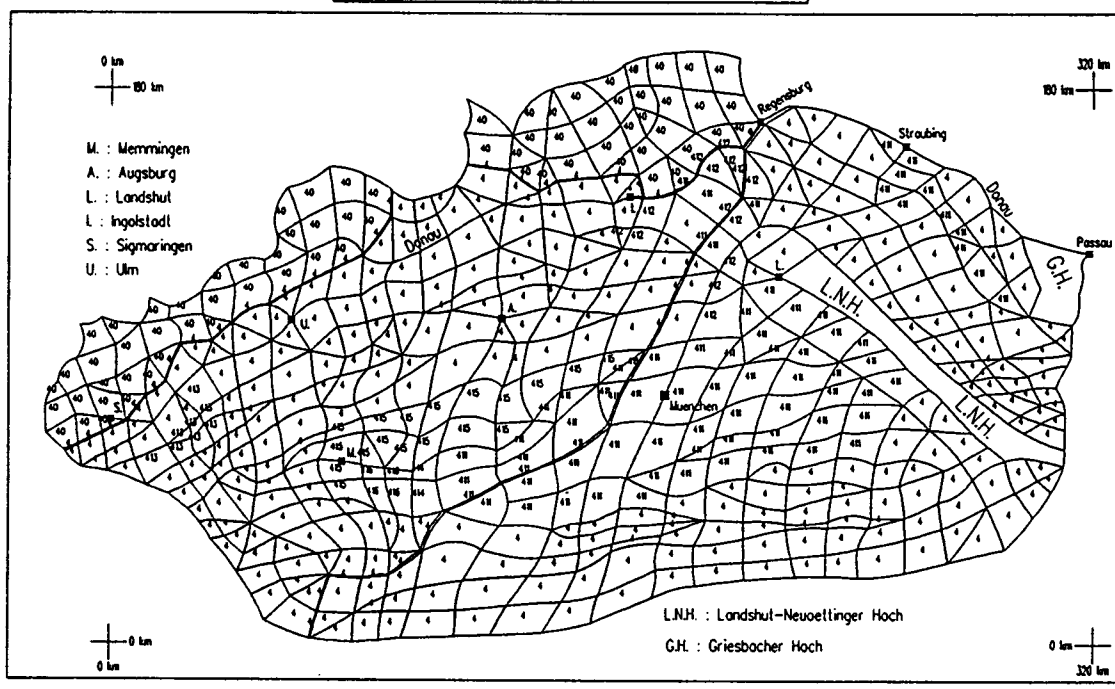
M = Mächtigkeit der Deckschichten über dem Karstaquifer in $[m]$.

Das 2-D Modell liefert die indirekt erhaltene Grundwasserneubildung an der Malmoberkante, so wie die simulierte Karstwasserdruckfläche im Malm. Aus der 3-D Geometrie kennt man die Mächtigkeit der Deckschichten über dem Karstaquifer und somit kann die vertikale Permeabilität der Deckschichten über das ganze Modellgebiet berechnet werden. Abbildung 20 zeigt die Verteilung der geschätzten Permeabilitäten für eine Grundwasserneubildung von $0.0315\,[mm/Jahr]$, welche der Infiltrationsklasse 1 des 2-D Modells entspricht. Die geschätzten Werte liegen meistens unter $1.0 \cdot 10^{-11}\,[m/s]$. Die etwas höheren Werte – über $2.0 \cdot 10^{-11}\,[m/s]$ – zeigen einfach den Einfluß der Regionalvorfluter, wo Δh kleiner ist.

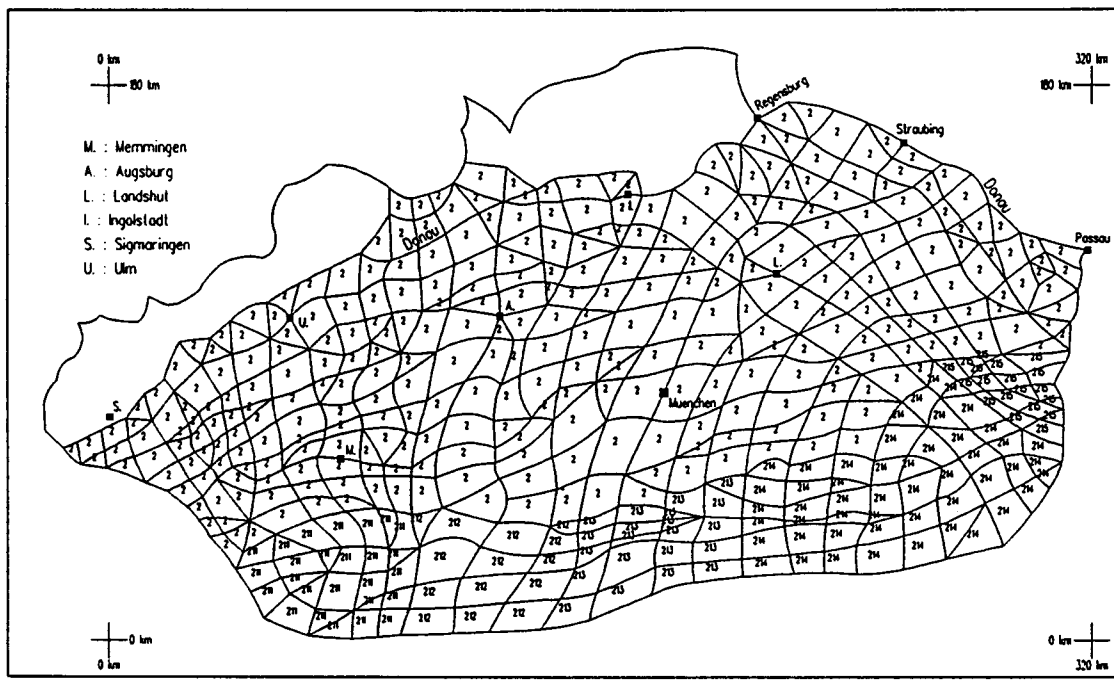
Die Verteilung der Permeabilitätsklassen in den Deckschichten ist in Abbildung 22 dargestellt und die numerischen Werte sind aus Abbildung 23 ersichtlich.
Diese Verteilung ist natürlich ähnlich der Verteilung der Infiltrationsklassen im 2-D Modell.

Das Blockdiagramm von Abbildung 24 gibt einen Überblick über die Variante "AMK01". Die lokalen Fließsysteme sind im Tertiär stellenweise stark ausgebildet und dies bedeutet, daß die Grundwasserneubildung unter den Vorfluterzonen etwas

AMKOLLM3 - PERMEABILITAETSKLASSEN, MALM (3-D MODELL)



AMKOLLM3 - PERMEABILITAETSKLASSEN, TERTIAER (3-D MODELL)



Abbildungen 21 und 22: Permeabilitätsklassen im Malm und im Tertiär.

Variante "AMK01" - 3-D Modell

Permeabilitäten in [m/s] für die verschiedenen Permeabilitätsklassen. Die Verteilung der Permeabilitätsklassen in der Kreide (wo vorhanden) ist dieselbe wie im Tertiär (siehe Abbildung 22).

Klasse	Wert	Bemerkung
1	1.250E-11	Tertiär (obere Schichten)
111	0.750E-11	
112	0.750E-11	
113	0.750E-11	
114	0.125E-11	
115	1.000E-11	
2	1.250E-11	Tertiär (untere Schichten)
211	0.750E-11	
212	0.750E-11	
213	0.750E-11	
214	0.125E-11	
215	1.000E-11	
3	1.250E-11	Kreide
311	0.750E-11	
312	0.750E-11	
313	0.750E-11	
314	0.125E-11	
315	1.000E-11	
4	0.200E-07	Malm (nicht verkarstet)
40	1.000E-05	(abgedeckt)
411	0.200E-05	
412	0.200E-04	(verkarstet)
413	1.000E-06	
414	0.200E-06	
415	0.300E-07	
416	0.600E-07	
5	1.000E-09	Grundgebirge (L.N.H.)
50	1.000E-09	(G.H.)
601	1.000E-04	Vertikale 2-D Elemente zwischen
602	1.000E-04	Malm und Donau (bis Bad Gögging
603	1.000E-04	und bei Straubing)

Abbildung 23: Permeabilitätswerte für die Variante "AMK01".

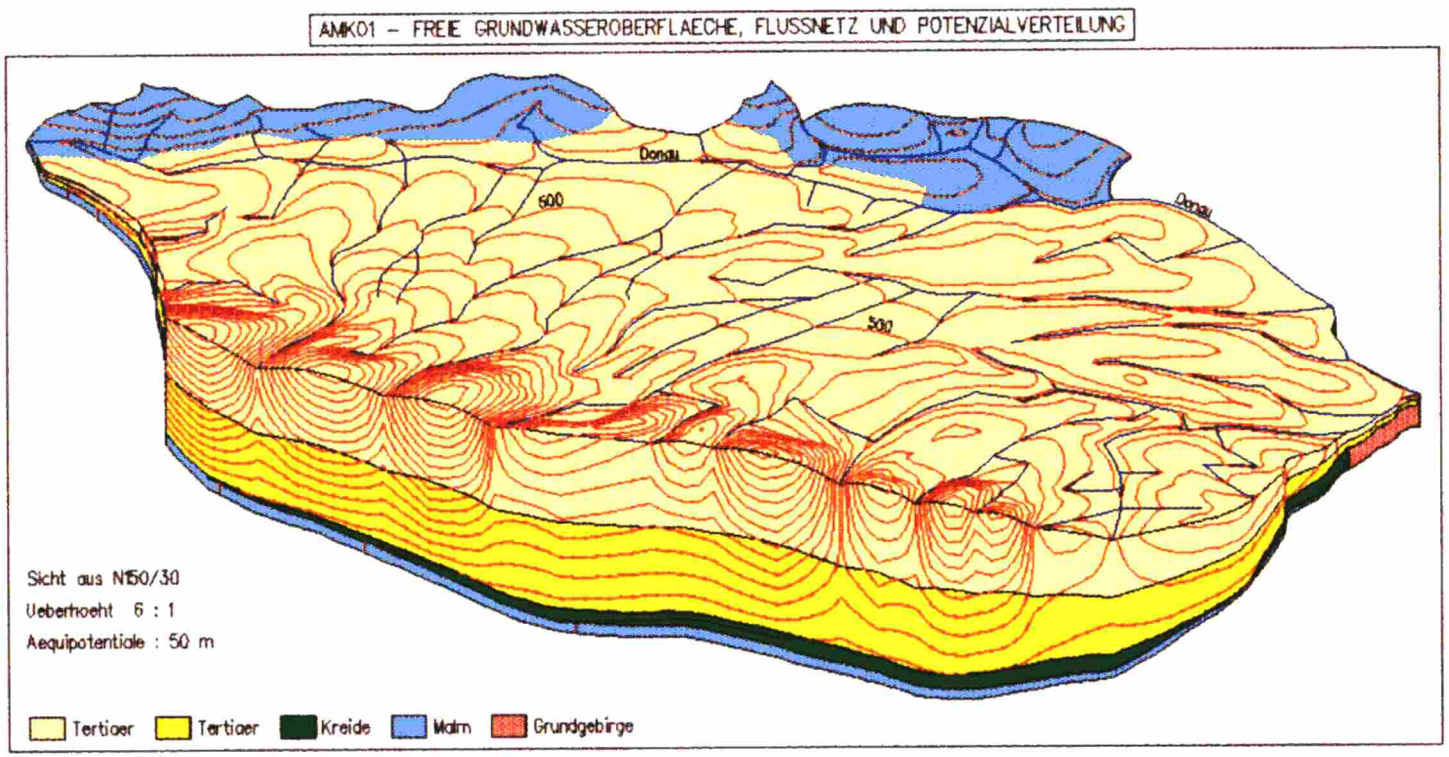
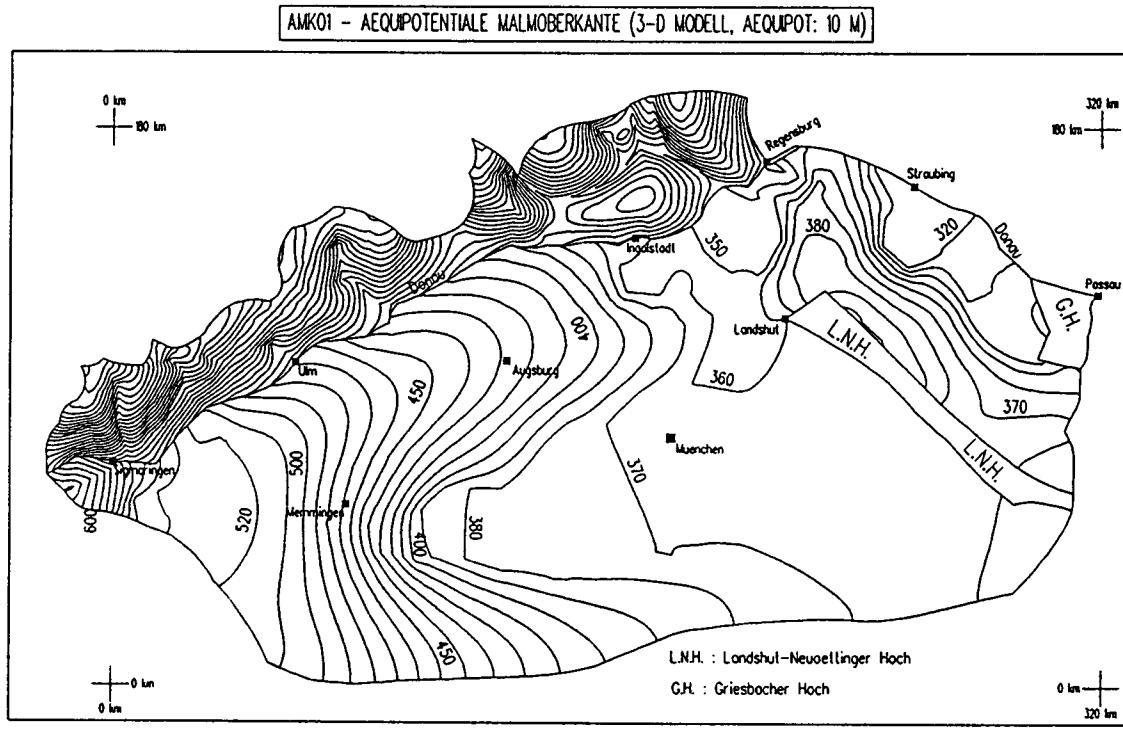
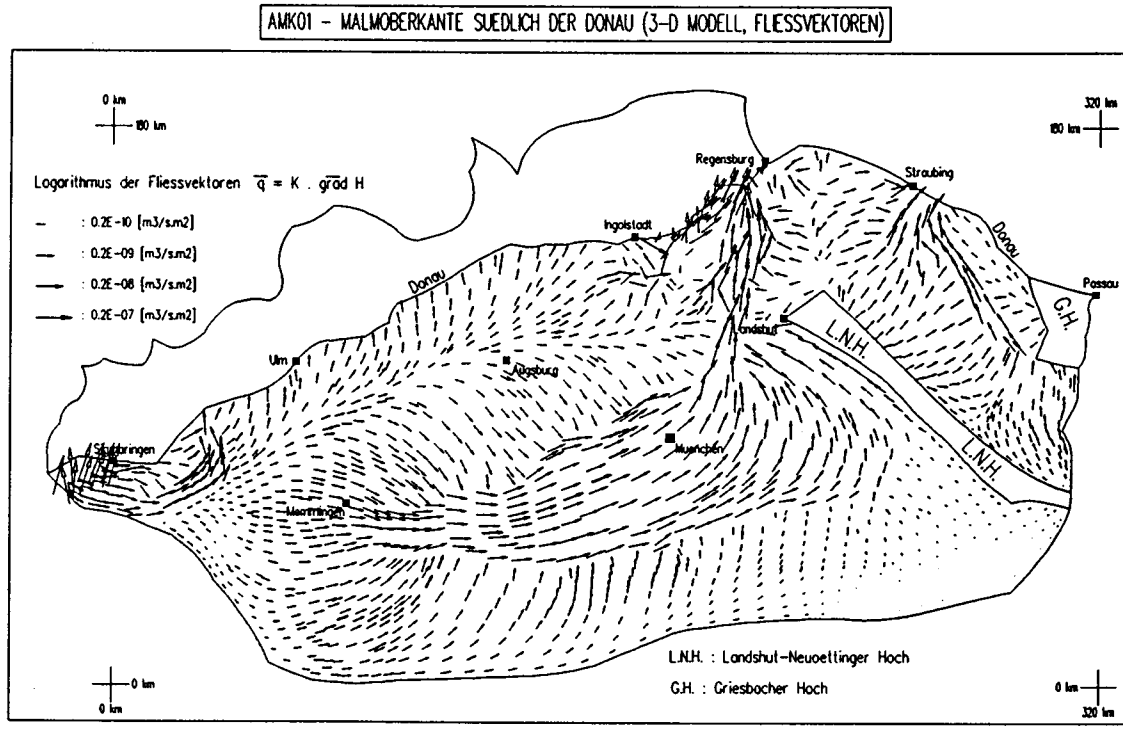


Abbildung 24: Variante "AMK01".





Abbildungen 25 und 26: Variante "AMK01": Equipotentiale und Fließvektoren auf der Malmoberkante.

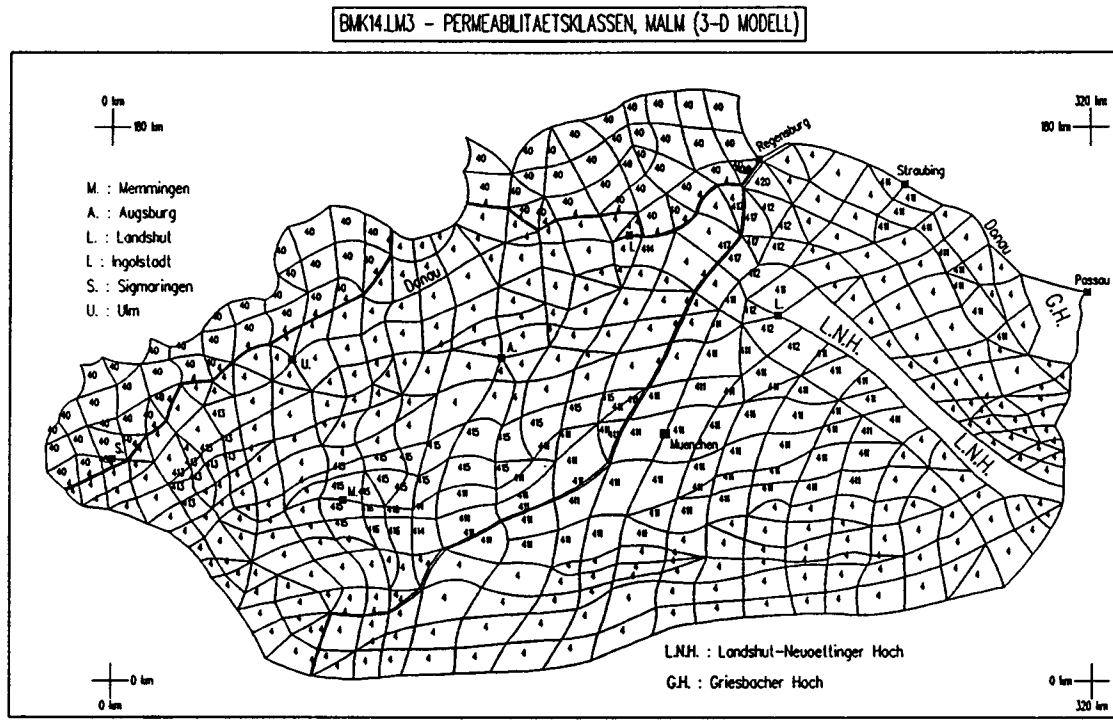
kleiner sein könnte als dazwischen. Die Potentialverteilung an der Malmoberkante ist in Abbildung 25 dargestellt und die Übereinstimmung mit dem 2-D Modell ist – trotz der vielen Vereinfachungen – erstaunlich gut (vergleiche mit Abbildung 11). Unterschiede gibt es natürlich auch. Der Einfluß des Landshut-Neuöttinger Hochs (d.h. höhere Potentiale als im 2-D Modell) und der Einfluß des Inntales (d.h. tiefere Potentiale als im 2-D Modell) machen sich z.B. im 3-D Modell deutlich bemerkbar. Die Bilanzierung zeigt, daß die totale Grundwasserneubildung an der Malmoberkante südlich der Donau etwas kleiner ist als im 2-D Modell: $0.025\,[m^3/s]$, statt $0.028\,[m^3/s]$ in der Variante "NURM15". Die horizontale Projektion der Fließvektoren an der Malmoberfläche ist in Abbildung 26 dargestellt und die spezifischen Durchflüsse sind diesmal in $[m^3/s \cdot m^2]$ angegeben. Wenn diese Werte mit der Malmmächtigkeit multipliziert werden, kann man die 3-D Resultate (Abbildung 26) direkt mit den 2-D Resultaten (Abbildung 15) vergleichen.

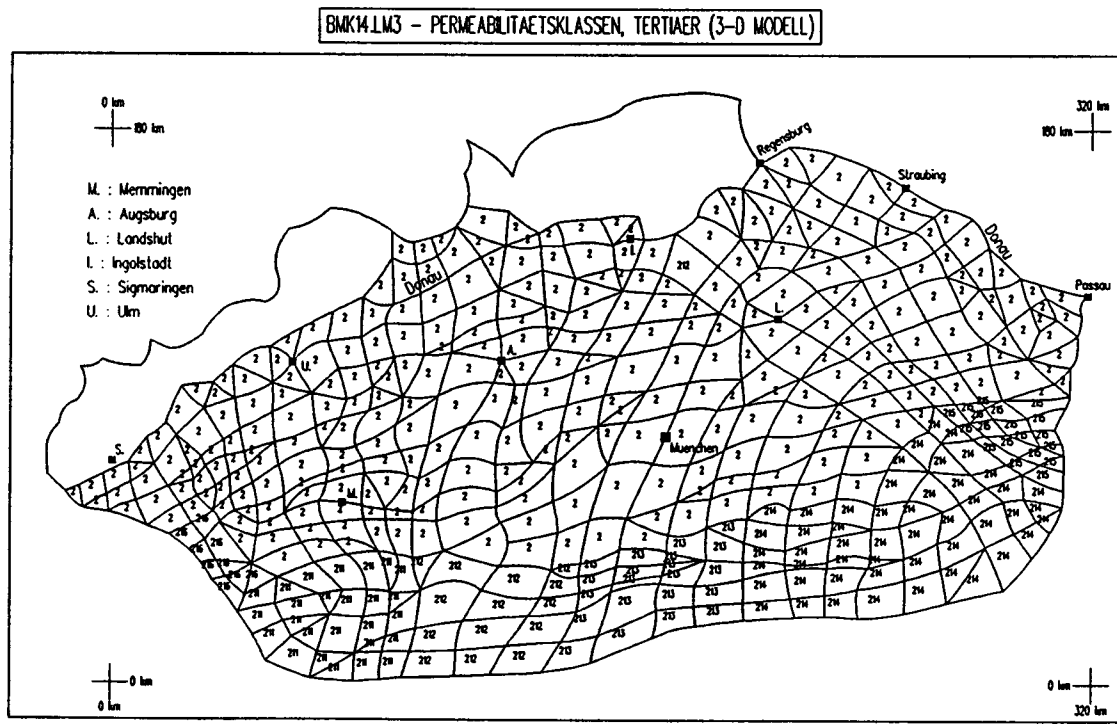
Eine kleine Bemerkung soll noch über die Verbindung zwischen Donau und Malmaquifer gemacht werden. Im 3-D Modell fließt die Donau weitgehend auf sehr wenig permeablen Tertiärsedimenten und bis auf wenige Stellen besteht keine direkte Verbindung zwischen Donau und Malmaquifer. Im 2-D Modell mußte man die Fixpotentiale längs der Donau vorgeben, um vernünftige Resultate erhalten zu können; auch nach der Potentialkarte von ANDRES und FRISCH (1981) scheint die Donau eine ausgeprägte Vorflutwirkung zu besitzen. Die Verbindung zwischen Donau und Malmaquifer mußte also auch im 3-D Modell verstärkt werden. Dies geschah durch die Einführung von vertikalen 2-D Elementen längs der Donau bis Bad Gögging und auf einer kurzen Strecke bei Straubing (siehe auch die Permeabilitätswerte in Abbildung 23).

Man kann die Variante "AMK01" noch nicht als Schlussversion gelten lassen, weil die Permeabilitätswerte, die Durchflußmengen und die Grundwasserneubildung unwahrscheinlich klein sind, wie das schon im 2-D Modell der Fall war. Die Potentialverteilung muß auch besser an die von ANDRES und FRISCH (1981) gezeichnete Potentialkarte angepasst werden, indem man den Hauptvorflutbereich mehr nach Regensburg verlegt und den "Potentialwall" südlich Bad Gögging besser simuliert. Immerhin gibt die Variante "AMK01" eine ausgezeichnete Anfangslösung für die "Trial and Error" - Methode und die anderen 3-D Versionen.

10.8.4 Vorschlag für eine 3-D Endversion: die Variante "BMK14".

Die Version "BMK14" wurde aus der Version "AMK01" abgeleitet, indem man die simulierte Lösung an die von ANDRES und FRISCH (1981) gezeichnete Potentialkarte besser angepasst und realistischere Permeabilitätswerte angenommen hat. Diese "bessere Anpassung" betrifft eigentlich nur das Modellgebiet südlich der Donau, weil im abgedeckten Malm die Grundwasseroberfläche mit Fixpotentialen vorgegeben ist und für alle Varianten gleich bleibt. Alle Einzelheiten des Eichungskriteriums konnten natürlich nicht simuliert werden; dazu waren die benutzten Elemente stellenweise zu groß und die Verteilung der Permeabilitätsklassen zu einfach. Immerhin simuliert die Variante "BMK14" die wichtigsten Züge der Potentialkarte





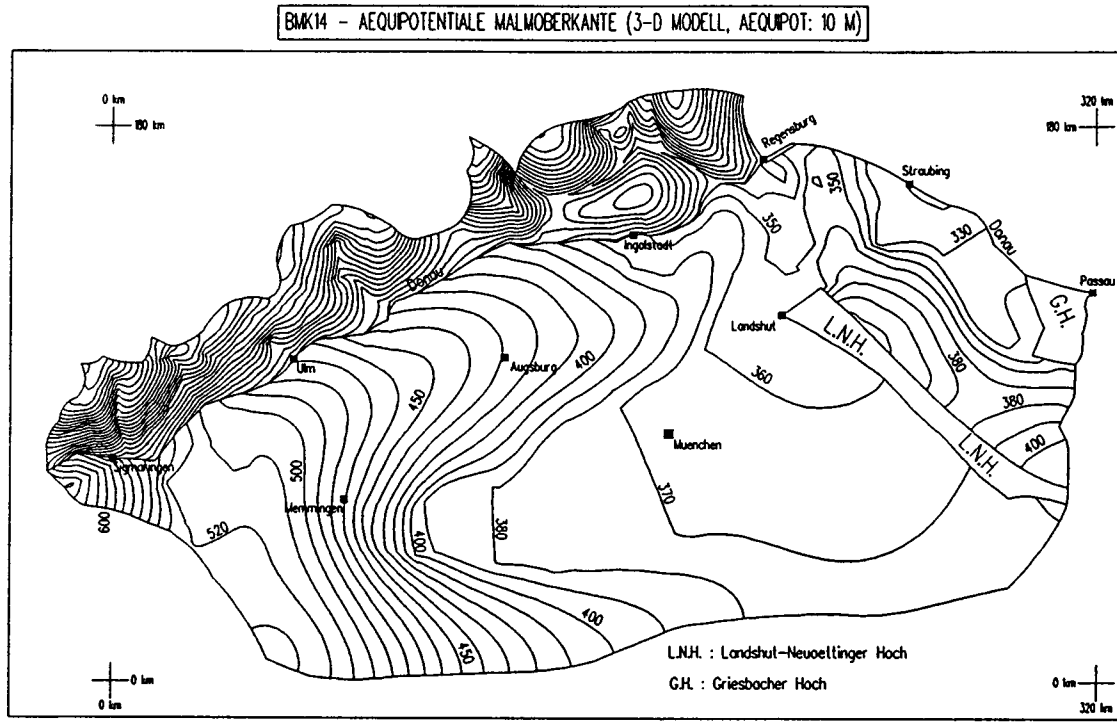
Abbildungen 27 und 28: Permeabilitätsklassen im Malm und im Tertiär für die Variante "BMK14".

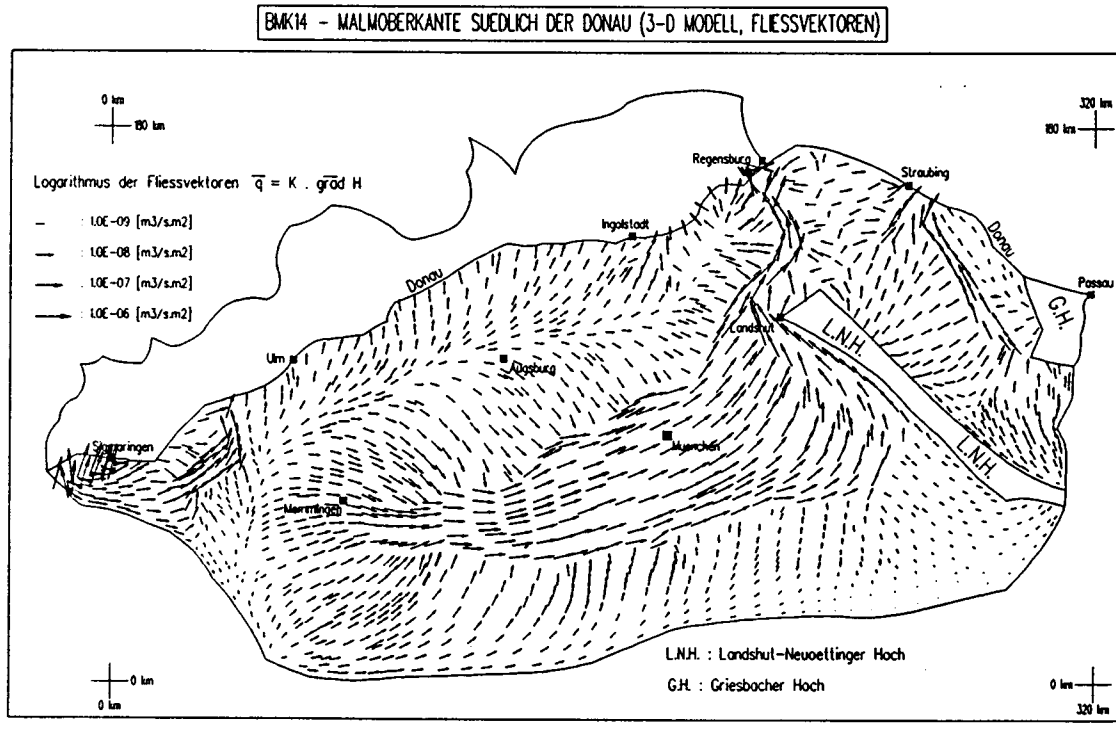
Variante "BMK14" - 3-D Modell

Permeabilitäten in [m/s] für die verschiedenen Permeabilitätsklassen. Die Verteilung der Permeabilitätsklassen in der Kreide (wo vorhanden) ist dieselbe wie im Tertiär (siehe Abbildung 28).

Klasse	Wert	Bemerkung
1	6.250E-10	Tertiär (obere Schichten)
111	6.000E-10	
112	3.750E-10	
113	3.750E-10	
114	1.250E-10	
115	1.000E-09	
116	5.000E-10	
2	6.250E-10	Tertiär (untere Schichten)
211	6.000E-10	
212	3.750E-10	
213	3.750E-10	
214	1.250E-10	
215	1.000E-09	
216	5.000E-10	
3	6.250E-10	Kreide
311	6.000E-10	
312	3.750E-10	
313	3.750E-10	
314	1.250E-10	
315	1.000E-09	
4	1.000E-06	Malm (nicht verkarstet)
40	1.000E-04	(abgedeckt)
411	1.000E-04	
412	1.000E-03	(verkarstet)
413	5.000E-05	
414	1.000E-05	
415	1.500E-06	
416	3.000E-06	
417	5.000E-06	
420	1.500E-04	
5	5.000E-08	Grundgebirge (L.N.H.)
50	5.000E-08	(G.H.)
601	5.000E-03	Vertikale 2-D Elemente zwischen
602	5.000E-03	Malm und Donau (bis Bad Gögging)
603	5.000E-03	
611	1.000E-03	Vertikale 2-D Elemente zwischen
612	1.000E-03	Malm und Donau (bei Straubing)
613	1.000E-03	

Abbildung 29: Permeabilitätswerte für die Variante "BMK14".





Abbildungen 30 und 31: Variante "BMK14": Equipotentiale und Fließvektoren auf der Malmoberkante.

von ANDRES und FRISCH (1981) und die geographische Lage der simulierten Äquipotentiale scheint auch — mindestens in diesem Maßstab — annehmbar zu sein.

Abbildung 27 und 28 zeigen die Verteilung der Permeabilitätsklassen im Malm und im Tertiär; die dazugehörenden numerischen Werte sind in der Tabelle der Abbildung 29 ersichtlich. Die Äquipotentiale und die horizontale Projektion der Fließvektoren an der Malmoberkante sind in den Abbildungen 30 und 31 dargestellt. Schließlich geben zwei Blockdiagramme (Abbildung 32 und 33) und die Profile von Abbildung 34 einen Überblick über die Variante "BMK14".

In der Variante "BMK14" wurde der Hauptvorflutbereich des Malm mehr nach Regensburg verlegt (siehe die Elemente mit Permeabilitätsklassen 412 und 420 in Abbildung 27), wodurch auch der "Potentialwall" südlich von Bad Gögging besser simuliert werden konnte. Die angenommenen Permeabilitätswerte sind etwa 50 mal größer als in der Variante "AMK01" (vergleiche Abbildung 23 mit Abbildung 29). Dementsprechend sind auch die Durchflußmengen und die Grundwasserneubildung an der Malmoberfläche größer und realistischer geworden. Die simulierte Absenkung bei Straubing ist hingegen etwas kleiner als in der Variante "AMK01".

Die *globale Grundwasserneubildung* an der bedeckten Malmoberkante *südlich der Donau* beträgt etwa $1.40\,[m^3/s]$; dies entspricht einem Mittelwert von $1.27\,[mm/Jahr]$. Natürlich sind die Quelltermintensitäten an der Malmoberkante nicht homogen verteilt, aber sie überschreiten nur an wenigen Stellen den Wert von $2.0\,[mm/Jahr]$ (siehe Abbildung 35). Östlich des Landshut - Neuöttinger Hochs befindet sich das Einzugsgebiet des *Straubinger Systems.* Die Grundwasserneubildung beträgt $0.14\,[m^3/s]$ für dieses Einzugsgebiet (etwa $0.92\,[mm/Jahr]$), wobei diese Menge fast ausschließlich bei Straubing an drei Knotenpunkten ausfließt und zwar dort, wo die Donau und der Malmaquifer durch vertikale 2-D Elemente in Verbindung stehen. Dementsprechend beträgt die aus dem bedeckten Malmaquifer kommende Exfiltration $1.26\,[m^3/s]$ bis Regensburg. Man muß betonen, daß diese Werte sich nur auf die in der Variante "BMK14" angenommene Permeabilitätsverteilung beziehen, welche zwar annehmbar erscheint, aber doch weitgehend hypothetisch ist. Wenn man die gleiche Verteilung der Permeabilitätsklassen beibehält und alle Permeabilitätswerte mit der gleichen Zahl N multipliziert, dann ändert sich das simulierte Potentialbild nicht, aber die Grundwasserneubildung und die Durchflußmengen werden größer (wenn $N \geq 1$), beziehungsweise kleiner (wenn $N \leq 1$). Die hier angenommenen Permeabilitätswerte müßten also noch durch empirische Messungen und Beobachtungen kontrolliert oder bestätigt werden.

Die Variante "BMK14" zeigt, daß das Potentialbild des Eichungskriteriums mit einer relativ einfachen Permeabilitätsverteilung und mit relativ einfachen Randbedingungen simuliert werden kann. Folglich zeigt sie auch, unter welchen Bedingungen das von ANDRES und FRISCH (1981) gezeichnete Potentialbild als plausibel angenommen werden kann. Die wichtigste Voraussetzung betrifft nicht so sehr den Absolutwert der Permeabilitäten sondern viel mehr die *Struktur des Permeabilitätsfeldes im Malm.* Zwei hochpermeable (verkarstete) Zonen müssen vorhan-

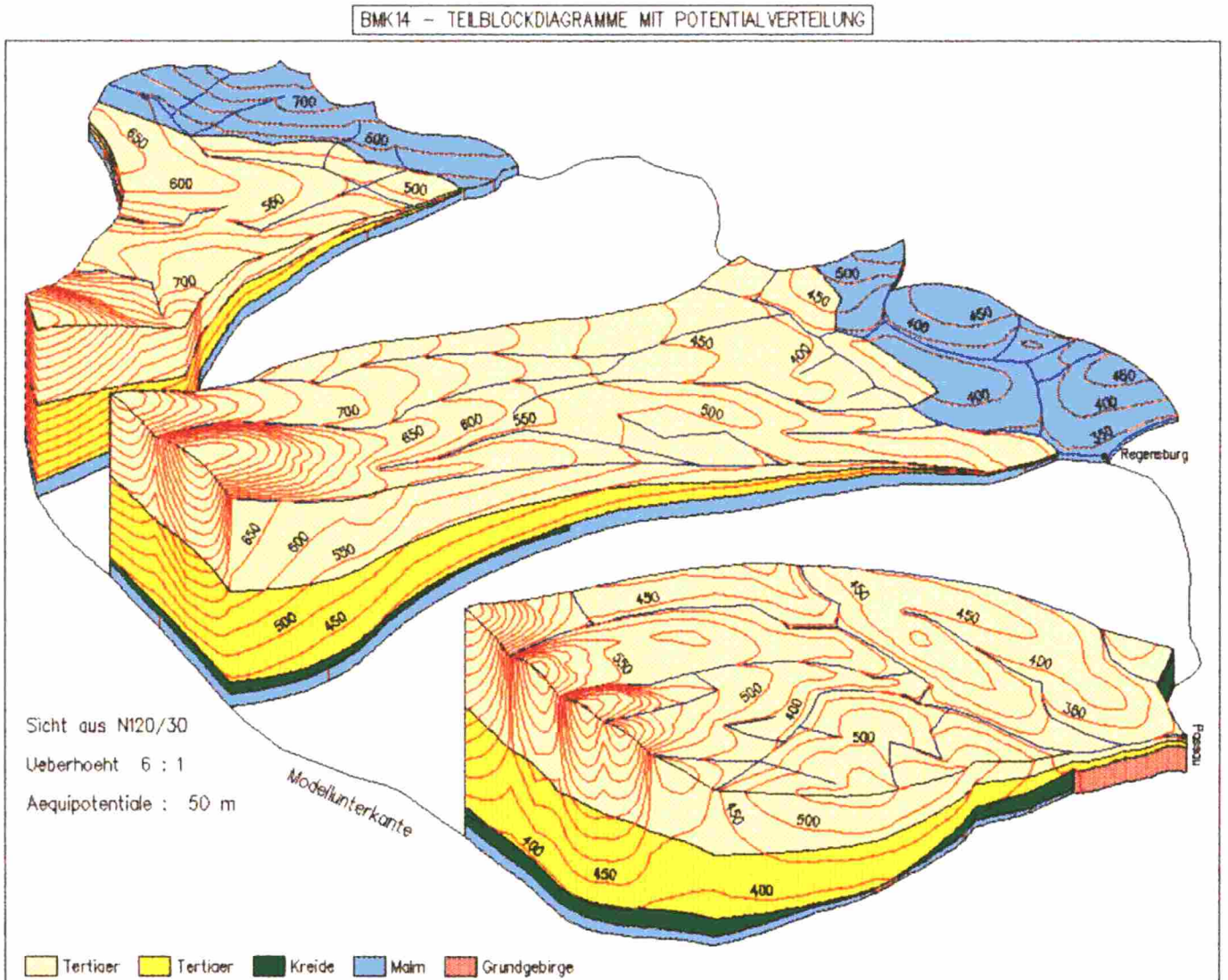


Abbildung 32: Variante "BMK14".

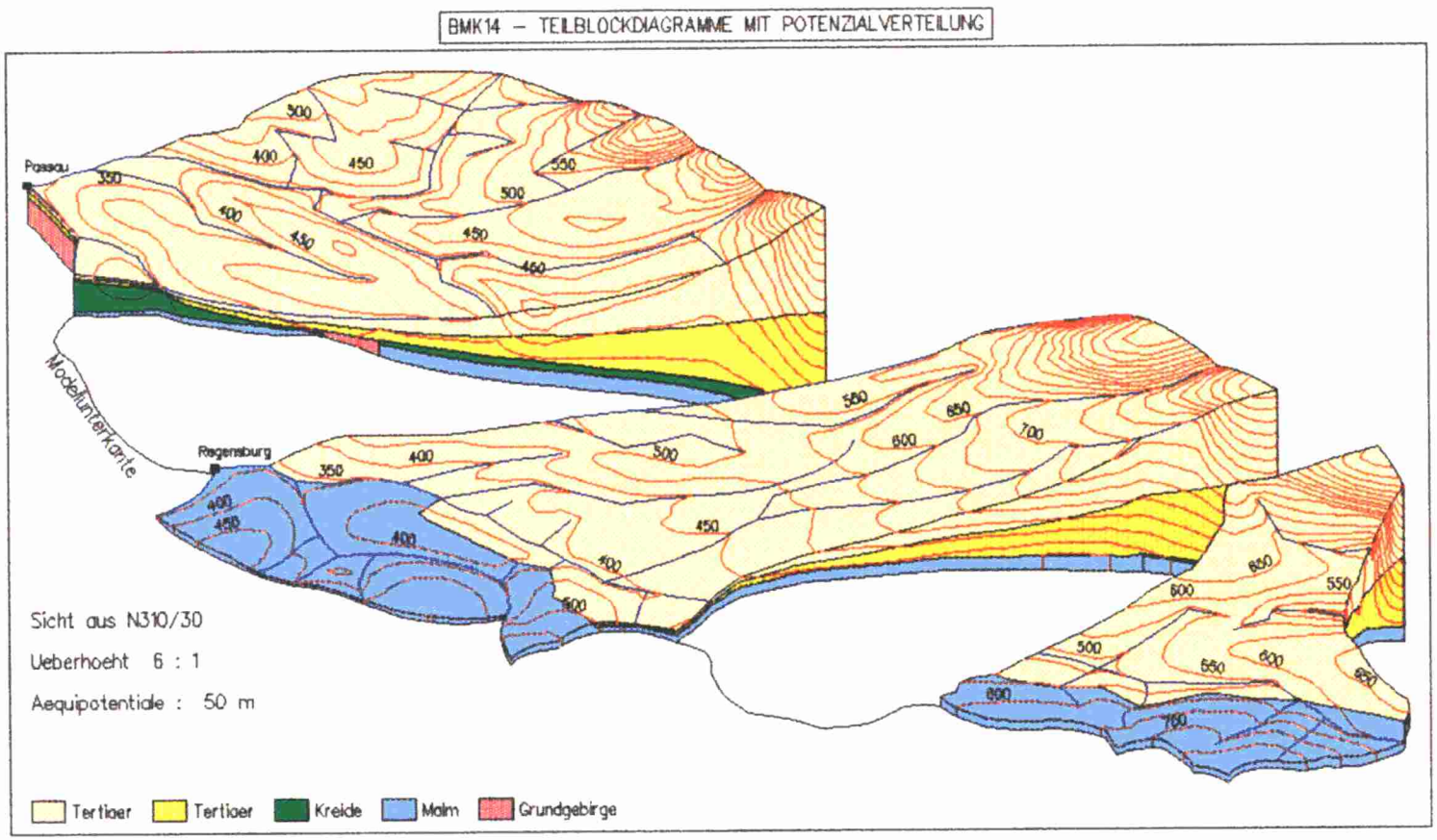


Abbildung 33: Variante "BMK14".

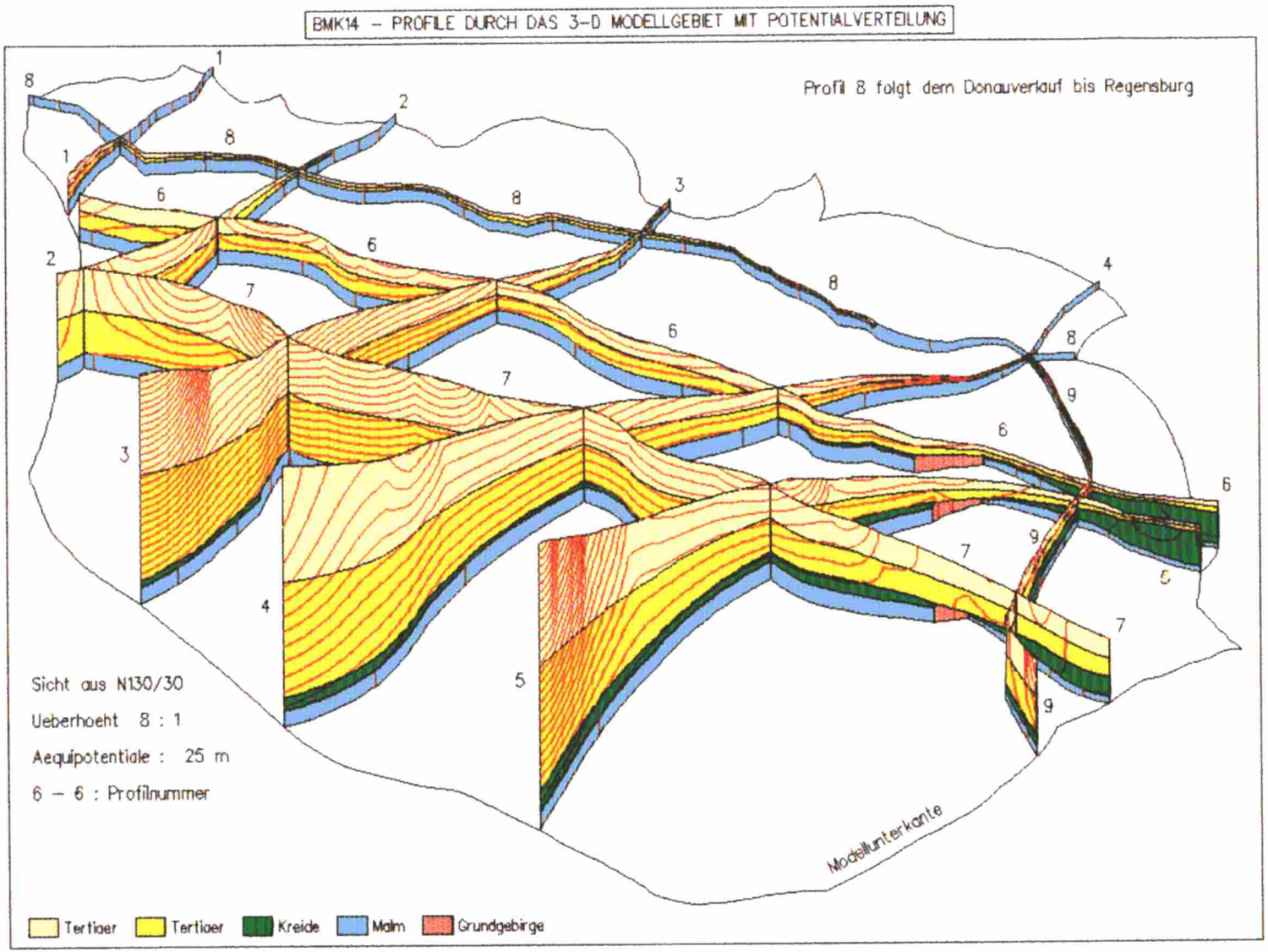


Abbildung 34: Variante "BMK14".

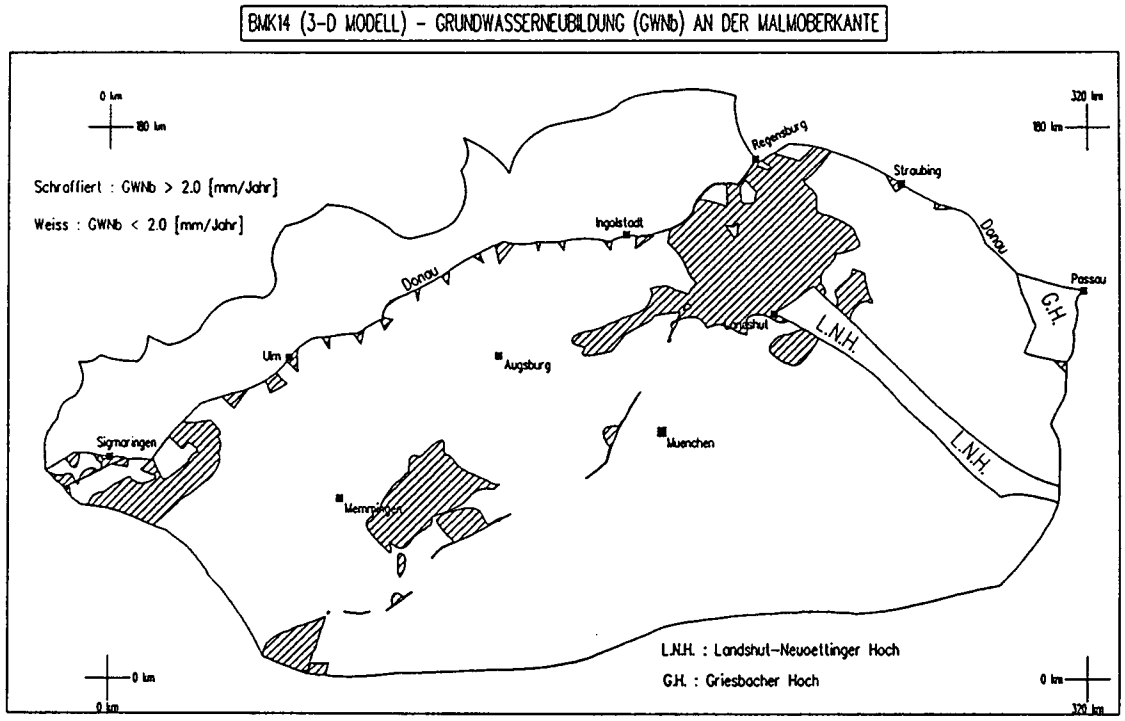


Abbildung 35: Grundwasserneubildung an der Malmoberkante für die Variante "BMK14" (3-D Modell).

den sein und beide Zonen müssen mit dem Hauptvorfluter (Donau) in direkter Verbindung stehen:

- Die erste Zone beginnt an der Iller und zieht über München und Landshut nach Regensburg wo eine direkte Verbindung mit der Donau vorhanden ist (siehe die Elemente mit den Permeabilitätsklassen 411, 412 und 420 in Abbildung 27). Diese "Drainage-Zone" ist nötig, um die große Einmuldung des Potentialfeldes südlich von Regensburg zu simulieren.

- Die zweite, kleinere Zone erstreckt sich westlich der Donau zwischen Straubing und dem Griesbacher Hoch (siehe die Elemente mit der Permeabilitätsklasse 411 in Abbildung 27). Diese Zone ist von mächtigen Kreide- und Tertiärsedimenten überlagert und die Verbindung mit der Donau muß durch "markante Störungszonen" begünstigt sein (ANDRES und FRISCH, 1981). Diese Zonen wurden im Modell durch vertikale 2-D Elemente simuliert.

Abgesehen von einigen Ausnahmen (Umgebung von Buchau und Saulgau, Bereich zwischen Ingolstadt und Bad Gögging) kann man im restlichen Teil des bedeckten Malmaquifers ziemlich einheitliche Permeabilitäten annehmen. In den Deckschichten des Malm (Tertiär, Kreide) ist die Struktur des Permeabilitätsfeldes noch einfacher: nur am Südrand des Molassebeckens muß man etwas niedrigere Durchläßigkeiten annehmen.

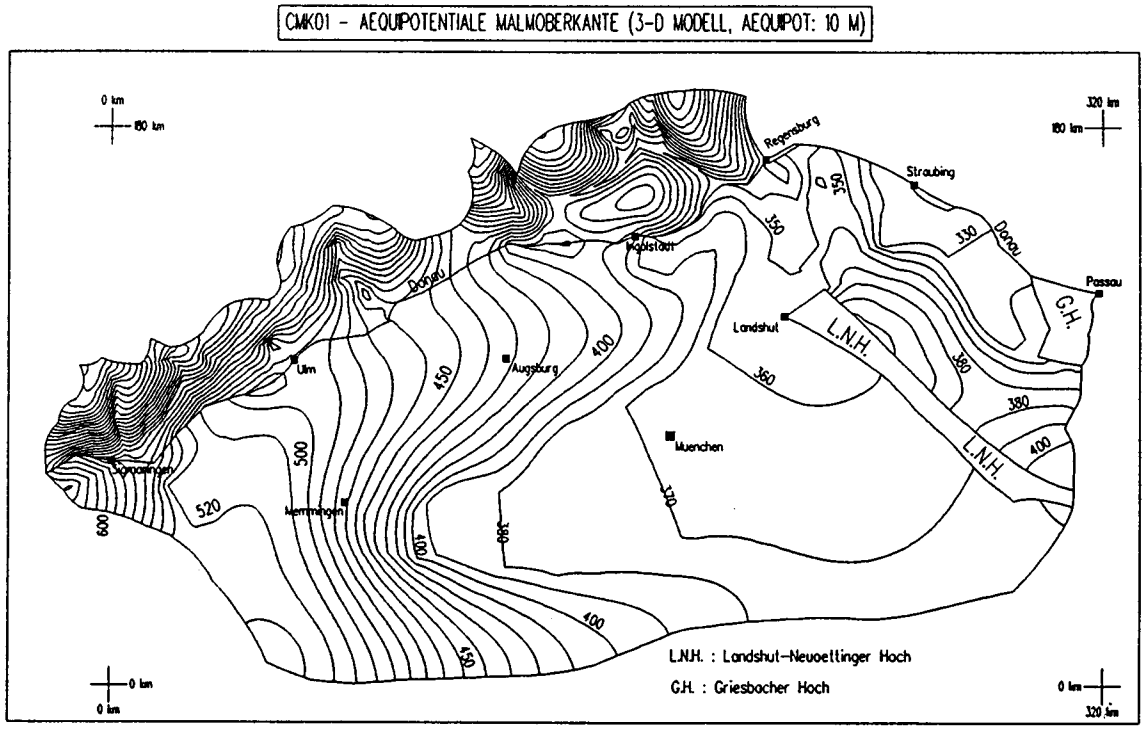


Abbildung 36: Variante "CMK01": Equipotentiale an der Malmoberkante (3-D Modell).

Eine gewisse indirekte Verbindung zwischen Donau und Malmaquifer scheint auch oberhalb Bad Gögging nötig zu sein, dort wo die Donau weitgehend auf sehr wenig permeablen Tertiärsedimenten fließt. Ohne diese verbesserte Verbindung erhält man ein verändertes Potentialbild wie in der Variante "CMK01" (siehe Abbildung 36), wo ein direkter Kontakt zwischen Malm und Donau nur an zwei Stellen besteht: oberhalb von Ulm und oberhalb von Neuburg a. d. Donau.

Verglichen mit dem Eichungskriterium sind die simulierten Malmpotentiale etwas zu hoch östlich von Landshut und etwas zu tief im Bereich des Inntales. Trotz dieser Abweichungen wurde nicht versucht, die Potentialkarte von ANDRES und FRISCH (1981) auch in diesen Bereichen zu simulieren, weil die Modellresultate logischer zu sein scheinen. Die hohen Potentiale bauen sich in der wenig permeablen Grundgebirgsscholle des Landshut-Neuöttinger Hochs auf und der Vorfluteffekt des Inntales vermindert die aus dem Tertiär kommende Grundwasserneubildung an der Malmoberkante (siehe die Exfiltrationszonen in Abbildung 37). Man sollte hier untersuchen, ob die vorhandenen Potentialmessungen mit dem simulierten Potentialbild in Wiederspruch stehen oder nicht.

Eine Bemerkung soll noch über den nördlich der Donau liegenden *abgedeckten Malmkarst* gemacht werden, obwohl die Simulation des offenen Karstes nicht das Hauptziel des Forschungsvorhabens war. Wie schon erwähnt, ist die freie Grundwasseroberfläche im offenen Karst mit Fixpotentialen vorgegeben, so daß sie für alle

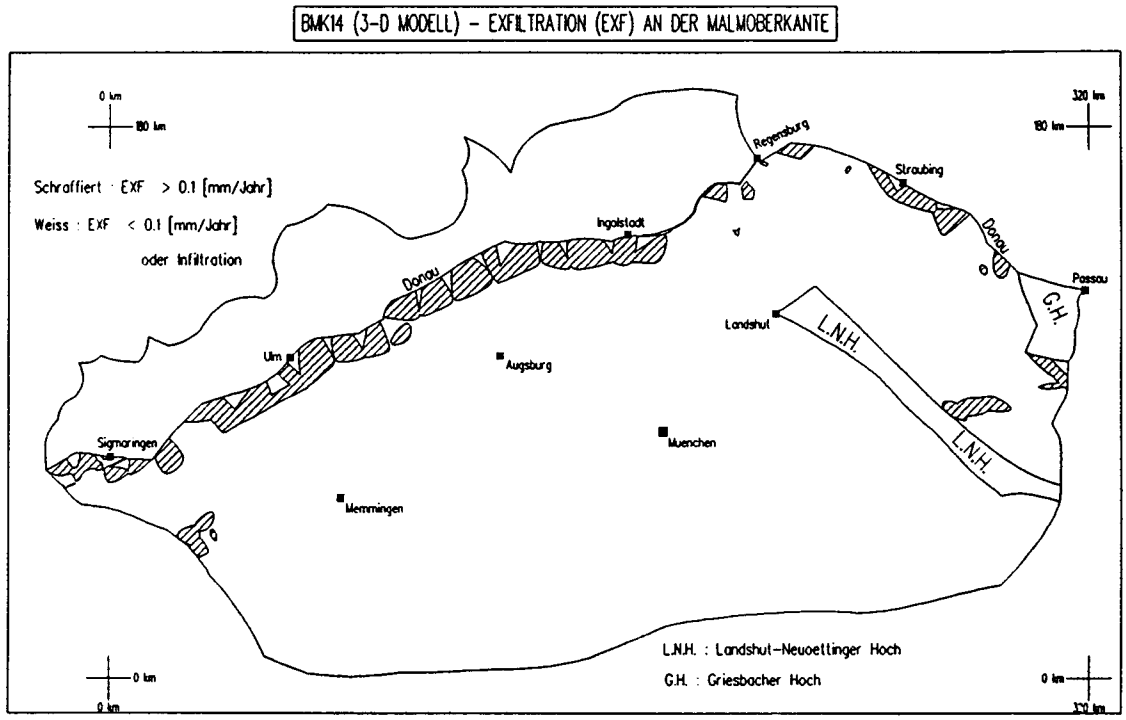


Abbildung 37: Exfiltrationszonen an der Malmoberkante für die Variante "BMK14" (3-D Modell).

Varianten gleich bleibt. An den Knotenpunkten, wo die Fixpotentiale vorgegeben sind, berechnet das Modell die Quellterme (Infiltration oder Exfiltration), welche von den Gradienten und von den Permeabilitäten der abgedeckten Malmelemente abhängen (siehe Permeabilitätsklasse 40 in den Abbildungen 27 und 29). In den oben erwähnten 3-D Varianten (AMK01, BMK14, CMK01) sind die Elemente zu groß, um die komplizierte freie Karstgrundwasseroberfläche und die entsprechenden Gradienten in allen Einzelheiten und mit allen kleinen Vorflutern simulieren zu können. Stellenweise, insbesondere im westlichen Teil des abgedeckten Malmaquifers, sind die mit Fixpotentialen vorgegebenen Gradienten zu groß, und die berechneten Quellterme scheinen eher unrealistisch. Diese lokalen Anomalien könnten mit zusätzlicher "Fleißarbeit" (d.h. mit einer Verfeinerung der Elemente oder mit einer besseren Differenzierung der Permeabilitäten) leicht beiseitigt werden. Dort wo die vorgegebene freie Karstgrundwasseroberfläche realistisch ist, erhält man eine Infiltration von 300 bis 700 $[mm/Jahr]$ im offenen Malmkarst.

Schließendlich gibt Abbildung 38 ein synthetisches Bild über die vertikale Variation der Potentiale, von oben nach unten. Die $50\,m$ - Isolinien sind an der freien Grundwasseroberfläche, an der Unterkante der ersten Tertiärelementschicht und an der Oberkante des Malmaquifers dargestellt. Man sieht hier besonders schön, daß der Einfluß der lokalen Vorfluter von oben nach unten immer kleiner wird und die lokalen Fließsysteme allmählich verschwinden.

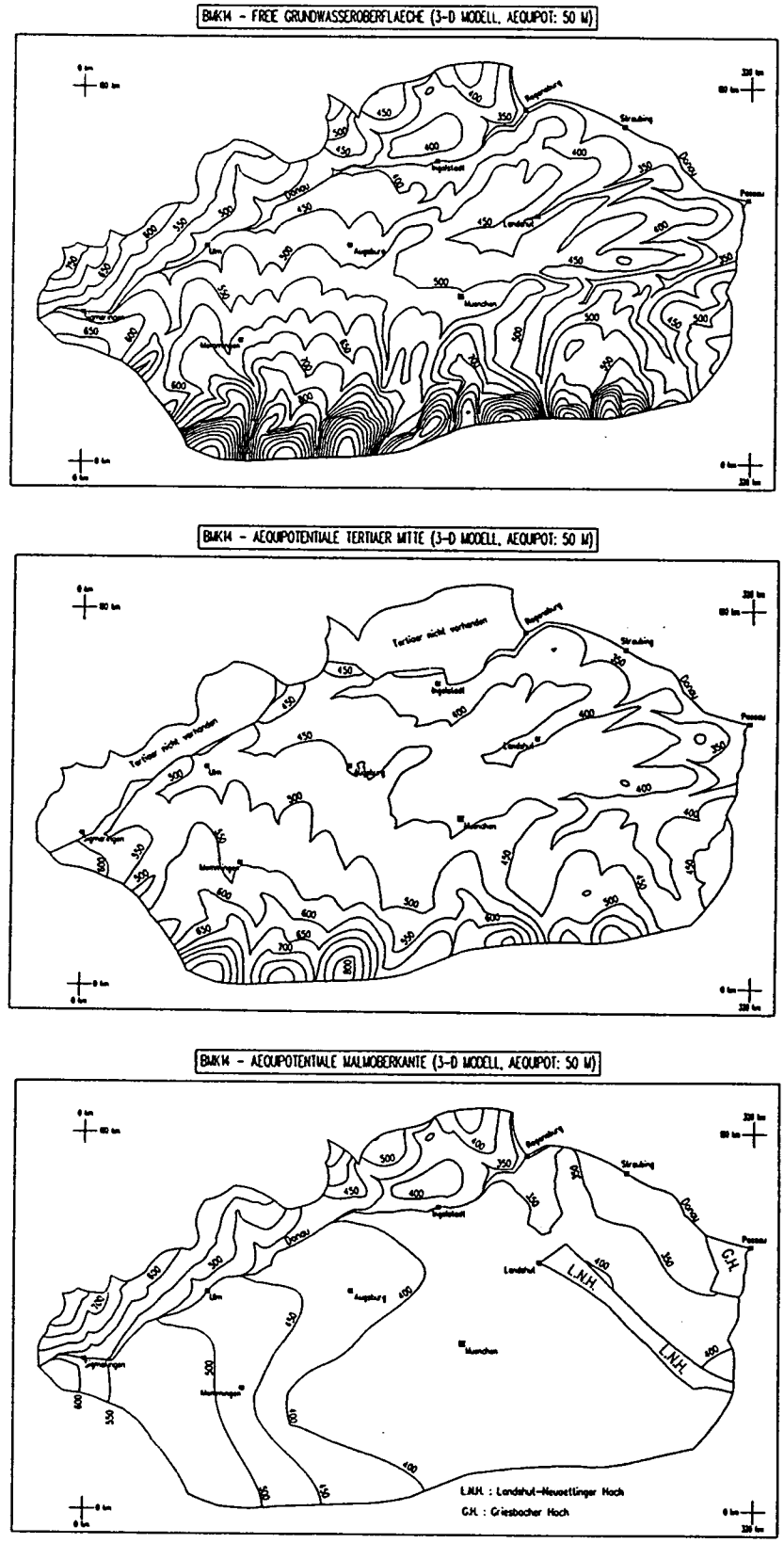


Abbildung 38: Variante "BMK14" (3-D Modell): Variation der Potentiale von oben nach unten.

Die oben ausgeführten Überlegungen zeigen, daß die von ANDRES und FRISCH (1981) vorgeschlagene *Malmpotentialkarte mit einer relativ einfachen regionalen Permeabilitätsverteilung und mit relativ einfachen Randbedingungen verträglich ist* und eine durchaus *plausible Hypothese* über die Fließvorgänge im tiefen Malmaquifer darstellt. Es sollte jedoch untersucht werden, ob diese weitgehend aus Interpolation resultierende Potentialkarte die einzige ist, die mit den vorhandenen Messungsdaten nicht in Wiederspruch steht. Andere plausible Hypothesen über die Malmpotentialverteilung würden andere Konsequenzen auf die Permeabilitätsverteilung im Malm und im Tertiär haben, was wiederum Hinweise zur Nutzung des Malmkarstwassers liefern könnte. Insbesondere muß man betonen, daß in allen 2-D und 3-D Varianten nur äquivalente, kontinuierliche Permeabilitäten eingesetzt wurden, obwohl in den verkarsteten Bereichen des Malmaquifers sehr wahrscheinlich ein weitmaschiges hochpermeables Karstnetz vorhanden ist. Die geplante Variante mit eingebauten Diskontinuitäten (Störungen und Karstnetz) konnte im Rahmen dieses Forschungsvorhabens nicht realisiert werden.

10.9 Schlußfolgerungen.

10.9.1 Eignung des Modells für Prognoseversuche.

Um die Eignung des Modells für *Prognoseversuche* beurteilen zu können, muß man die in der Einleitung (Paragraph 10.1) ausgeführten Überlegungen in Erinnerung haben. Insbesondere muß man betonen, daß das Modell nicht die Realität ist, sondern nur die Realisierung einer schematischen Darstellung des reellen Systems.

Vereinfachungen und *Unsicherheiten* sind in der schematischen Darstellung der reellen Aquiferen — d.h. im für die Simulation benutzten Datensatz — immer vorhanden. Dementsprechend werden auch die simulierten Resultate (Potentiale oder Quellterme) mit Fehlern behaftet sein und im seltensten Fall mit den reellen Werten übereinstimmen. Meistens wird durch die Eichung des Modells ("Parameteridentifizierung") versucht, die Ungenauigkeiten der simulierten Resultate möglichst klein und in akzeptablen Grenzen zu halten. Drei wichtige *Fehlerquellen* müssen erwähnt, und im Falle des Malmkarstmodells näher untersucht werden:

a. Die räumliche Diskretisierung der Aquifere in finiten Elemente (d.h. die Feinheit des Elementnetzes).

b. Die räumliche Verteilung der für die Simulation benutzten hydraulischen Parameter der Aquifere (Durchläßigkeiten und Speicherkoeffizienten)

c. Die vorgegebenen Randbedingungen des Modells (Fixpotentiale oder Quellterme)

Die Eignung des Modells für Prognoseversuche wird von den Vereinfachungen und Unsicherheiten abhängen, welche in den oben erwähnten drei Fehlerquellen enthalten sind.

Die *räumliche Diskretisierung* der Aquifere in finiten Elemente (d.h. die Feinheit des Elementnetzes) hängt in großem Maße von der Problemstellung ab. Das

Arbeitsziel des hier beschriebenen Modells war die Simulation der *großräumigen* hydrodynamischen Verhältnisse im süddeutschen Molassebecken, vor allem im tiefen Malmaquifer. Insbesondere sollten die Grundwasserneubildung und die Lage der In- und Exfiltrationszonen an der Malmoberkante bestimmt werden.

Um die Rechenzeit in annehmbaren Grenzen zu halten, mußte man in diesem großräumigen Modell (die Modelloberfläche beträgt etwa 44000 $[km^2]$ und vier Elementschichten sind vorhanden) auch die einzelnen Elemente groß anlegen, mit Seitenlängen von 5 bis 15 $[km]$. Mit quadratischen Interpolationsfunktionen kann auf einem Element höchstens eine Potentialfläche zweiten Grades simuliert werden und es besteht keine Hoffnung, mit diesem großräumigen Modell kompliziertere lokale Verhältnisse — wie z.B. die Absenkung in einem Brunnen — simulieren zu können. Diese Begrenzung besteht auch für die Eingabe der Randbedingungen: die mit Fixpotentialen vorgegebene freie Grundwasseroberfläche oder die Quellterme (Entnahme in den Brunnen oder Injektion in die Bohrungen) müssen auch großräumig definiert werden. Mit der Eingabe der Durchläßigkeiten hat man das gleiche Problem. Auch wenn mehrere Permeabilitätswerte pro Element zu Verfügung stehen und auch wenn die gemessenen Werte eine große Heterogeneität aufweisen, muß man die mittleren Durchläßigkeiten elementweise eingeben. Alle diese Vereinfachungen werden die für Prognosezwecke simulierten Resultate beeinflußen, welche eigentlich nur für großräumige Auswertungen benutzt werden sollten. Von der Diskretisierung her wäre das Modell für großräumige Prognoseversuche durchaus geeignet.

Die unter Punkt "a" diskutierte Fehlerquelle ist modelltechnisch bedingt und wäre auch dann vorhanden, wenn das Permeabilitätsfeld und die Randbedingungen in allen Einzelheiten bekannt wären. Die unter *Punkt "b" und "c" erwähnten Fehlerquellen* sind hingegen durch die *mangelhaften hydrogeologischen Kentnisse* bestimmt und *ihr Einfluß ist in den großräumigen Modellen überwiegend.* In diesem Sinne ist die Eignung des Malmkarstmodells für Prognoseversuche nur dann gesichert, wenn die in der Variante "BMK14" vorgeschlagene Hypothese über die Permeabilitätsverteilung nicht weit von der Realität entfernt ist. Die Unsicherheiten, welche dieser Hypothese anhaften, waren in der Beschreibung der Endvariante bereits erwähnt. Insbesondere muß es wiederholt betont werden, daß in der Variante "BMK14" nur *kontinuierliche Permeabilitäten* eingesetzt wurden, obwohl in den verkarsteten Bereichen des Malmaquifers sehr wahrscheinlich ein weitmaschiges hochpermeables *Karstnetz* vorhanden ist. In diesem Fall sind die Durchläßigkeiten auch in den verkarsteten Bereichen sehr heterogen — nicht nur in der horizontalen, sondern auch in der vertikalen Richtung — und das reelle Potentialfeld könnte eine viel "unregelmäßigere" Struktur aufweisen, als das im Eichungskriterium angenommen war. Dadurch wären die Abweichungen zwischen gemessenen und simulierten Werten auch beeinflußt.

Trotz der oben erwähnten Ungenauigkeiten muß man die positiven Seiten des Malmkarstmodells nicht vergessen. Das Modell ist vor allem ein *flexibles Werkzeug.* In gewissen Regionen kann man die Elemente feiner unterteilen, um lokale Modelle zu entwickeln, welche die komplizierten lokalen Verhältnisse besser simulieren. Die Randbedingungen für das lokale Modell können dann ganz oder teilweise aus dem

großräumigen Modell entnommen werden. Die auf neuen Beobachtungen oder Messungen gegründeten Hypothesen über die Permeabilitätsverteilung und die Randbedingungen können sowohl in das großräumige, als auch in die lokalen Modelle ohne große Schwierigkeiten eingeführt werden. Mit den verbesserten Parametern wird auch die Eignung des Modells für Prognoseversuche besser.

Literaturverzeichnis

Andres, G. und Frisch, H. (1981): Hydrogeologie und Hydraulik im Malmkarst des Molassebeckens und der angrenzenden Fränkisch-Schwäbischen Alb. *Schriftreihe des Bayerischen Landesamtes für Wasserwirtschaft, Heft 15, 108-117.*

Bear, J. (1972): Dynamics of fluids in porous media. *Elsevier, New York, 764 p.*

Hubbert, M.K. (1957): Darcy's law and the field equations of the flow of underground fluids. *Bull. AIHS, No 5, pp 24-59.*

Irons, B.M. (1970): A frontal solution program for finite element analysis. *Internat. Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 2, pp 5-32.*

Kinzelbach, W. (1986): Groundwater Modelling. *Elsevier Publishers, 333 p.*

Kiraly, L. (1975): Rapport sur l'état actuel des connaissances dans le domaine des caractères physiques des roches karstiques. *in: Hydrogeology of karstic terrains, A. Burger and L. Dubertret (eds), pp 53-67, Paris.*

– (1978): Les unités hydrogéologiques. *Bull. Centre d'Hydrogéologie de Neuchâtel, No 2, pp 83-216.*

– (1979): Remarques sur la simulation des failles et du réseau karstique par éléments finis dans les modèles d'écoulement. *Bull. Centre d'Hydrogéologie de Neuchâtel, No 3, pp 155-167.*

– (1985): FEM301 - A three dimensional model for groundwater flow simulation. *NAGRA Technical Report 84-49, 96 p. + program listing.*

– (1988): Large scale 3-D groundwater flow modelling in highly heterogeneous geologic medium. *in: Groundwater flow and quality modelling, E. Custodio et al. (eds), pp 761-775, NATO ASI series Vol.224.*

Klingbeil, E. (1966): Tensorrechnung für Ingenieure. *B.I. Mannheim, 194 p.*

Schwartz, H.R. (1980): Methode der finiten Elemente. *Teubner Studienbücher, Stuttgart, 320 p.*

Teichmann, H. (1964): Physikalische Anwendungen der Vektor- und Tensorrechnung. *B.I. Mannheim, 231 p.*

Zienkiewicz, O.C. (1971): The finite element methode in engineering science. *Mc. Graw-Hill, London, 521 p.*