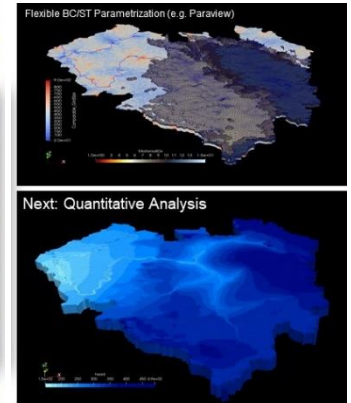
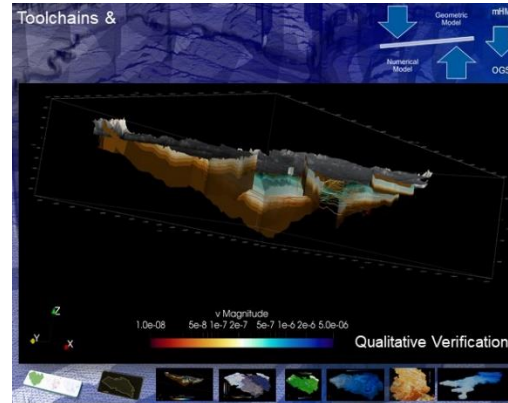


“Regionale Grundwassermodellierung“ Veranstaltung im Modul Modellierung von Hydrosystemen

Einführung /Grundwasserströmungsgleichung

Dr. Erik Nixdorf

12.07.2024



Arbeitsschwerpunkte

- Strömung und Transport in gekoppelten hydrologischen Systemen
- Analyse von Grundwasserströmungsprozessen auf der Einzugsgebietsskala mittels numerischer Prozessmodellierung
- Regionalisierung von hydrogeologischen Parametern mit Methoden des Maschinellen Lernens
- GIS-Analysen und -Workflowprogrammierung
- Konzipierung und Durchführung hydrologischer/hydrogeologischer Feldversuche und Messkampagnen

Lehrveranstaltungen

Aktuelle Lehrveranstaltungen

Hydrosystemanalyse (TU Dresden)

Catchment Scale Groundwater Modelling (GRAES, Peking)

Vergangene Lehrveranstaltungen

- Hydrological and Hydrogeological Field Methods (Graduiertenschule HIGRADE)



Hauptberufliche Anstellung:
Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
Forschungs- und Entwicklungszentrum Bergbaufolgen (FEZB)

Gastanstellung:
Helmholtzzentrum für Umweltforschung
Department Umweltinformatik
Kontakt: erik.nixdorf@ufz.de

Regionale Grundwassersysteme

- Was wissen Sie schon aus den vergangenen Veranstaltungen?
 - Modellierungskonzepte, Modellkalibrierung, -evaluierung, Sensitivitätsanalyse (Block I)
 - Strömungsgleichungen und Numerische Lösungsverfahren (FDM und FEM)
 - Advektiv-dispersiver Transport
 - Eingabe/Ausgabe für Simulationen mit OpenGeoSys 6
 - Vieles mehr aus anderen Lehrveranstaltungen 😊

Die Unterlagen zum Kurs finden sie auf Nextcloud:

link: <https://nc.ufz.de/s/fmmJb6mz3DzTXGf>

pw: Grundwasser_2024

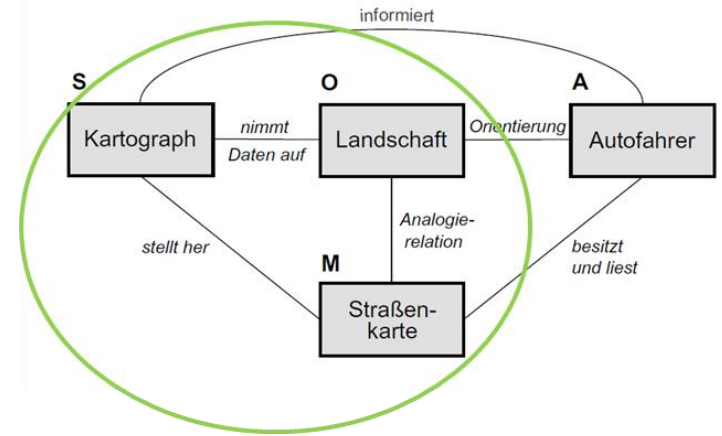
Regionale Grundwassersysteme -Aufbau

3 Teile, 2mal Vorlesung und 1mal Übung, Ende gegen **18:10**

- *V0: Ziel und Zweck numerischer Grundwasserströmungsmodelle*
 - V1: Grundwasserströmungsgleichung
 - Herleitung der Grundwassergleichung in der Potentialform
 - Diskussion der Parameter des Grundwasserleiters
 - Analytische Lösungen
 - V2: Parametrisierung und Randbedingungen
 - Räumlich-zeitliche Dimensionalität und Diskretisierung
 - Randbedingungen und Quellterme
 - Übung mit OpenGeoSys und ParaView
 - Analytische Lösungen vs. OpenGeoSys
-

Zweck von Grundwasserströmungsmodellen

- **Modell:** (vereinfachendes) Abbild einer (partiellen) Realität, dem Original
- „Modell ist stets **Modell-wovon-wozu-für wen.**“ (Steinmüller)
- Das „wozu“ im Kontext der Grundwasserhydrologie:
 - Wie wird das Pumpverhalten den Grundwasserspiegel in der Nordchinesischen Ebene in den nächsten 100 Jahren beeinflussen?
 - Wie lange wird es dauern bis Schadstoffe aus einer alten Industrieanlage in Tokyo das Grundwasser erreichen
 - Wie lange wird es dauern bis die Tagebaurestseen im Lausitzer Braunkohlerevier geflutet sind?



Definition „Modellierung“:
Entwicklung, Formung oder
Herstellung eines Modells.

→ Ein Grundwassermodell ist ein Werkzeug zur quantitativen Beantwortung dieser Fragen

Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

■ Oman: Eindringen von Meer-/Salzwasser

- Die Studie befasst sich mit der numerischen Modellierung der dichteabhängigen Strömung von Salzwasserintrusion in küstennahe Grundwassersysteme
- 3D dichte-abhängige gekoppelte numerische Simulation mit OpenGeoSys für das Projekt IWAS-Oman
- Ziel war die Bewertung des langfristigen Sanierungspotentials des Küstengrundwasserleiters

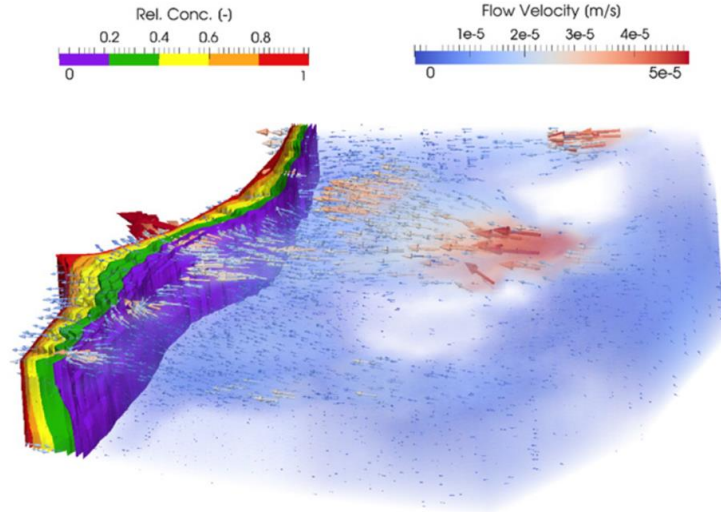
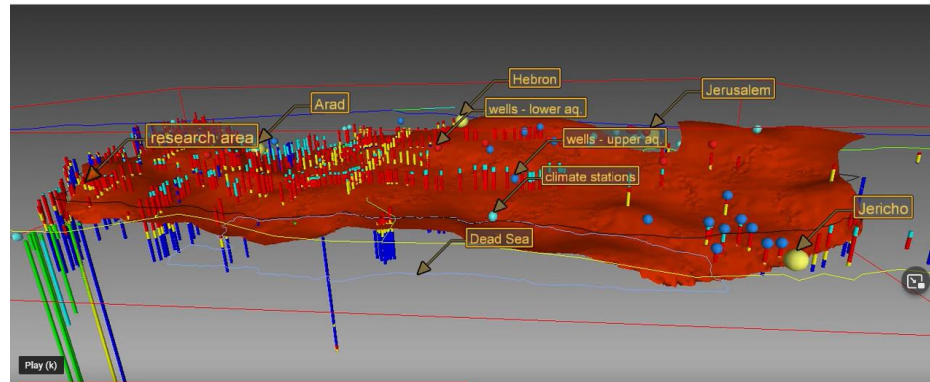


Figure: Heterogeneous flow field in groundwater model domain, natural saltwater intrusion for steady state conditions (M. Walther et al., 2012)

Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

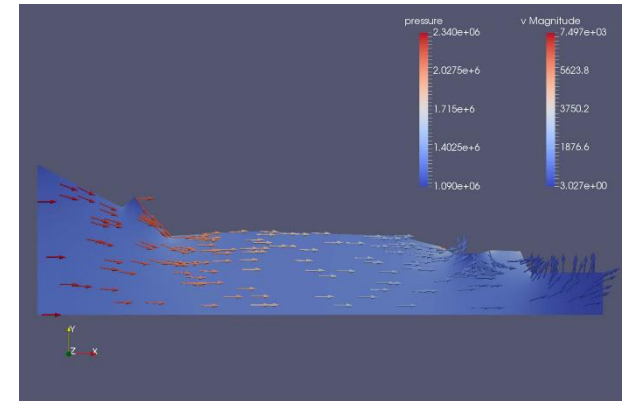
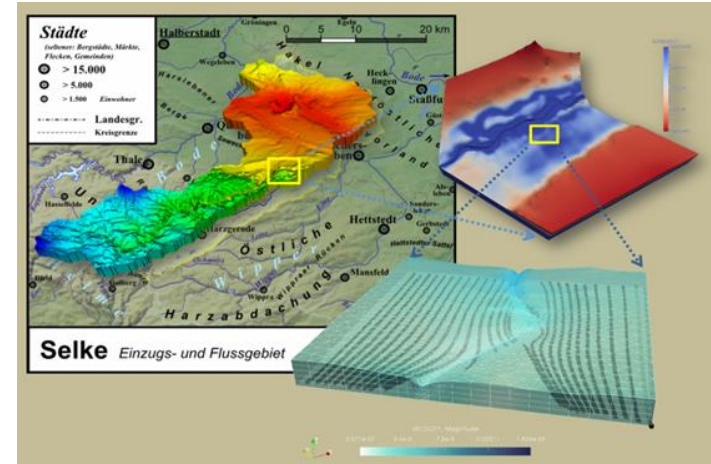
- **Westliches Einzugsgebiet des Toten Meeres**
 - Die Grundwasserressourcen im Nahen Osten sind durch die ariden/semi-ariden klimatischen Bedingungen stark begrenzt
 - Die Studie befasst sich mit der räumlich-zeitlich heterogenen Quantifizierung der Grundwasserneubildung. Das Untersuchungsgebiet umfasst dabei eine Größe von 4000 km²



Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

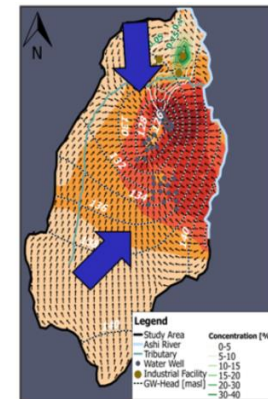
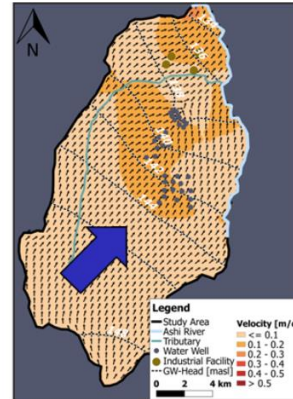
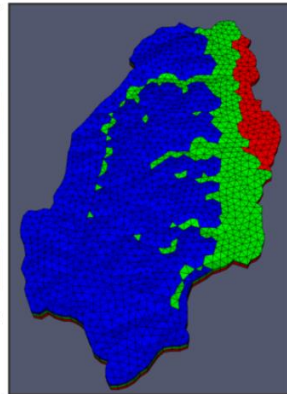
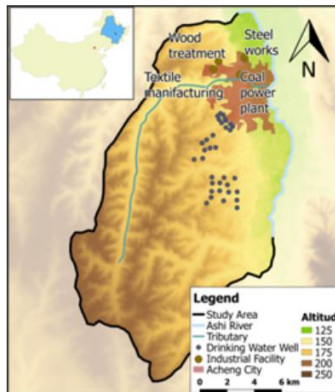
■ TERENO: Selke Catchment

- Mit OpenGeoSys wurden numerische Modellierungsstudien durchgeführt um Prozesse auf verschiedenen räumlich-zeitlichen Skalen im Selke-Einzugsgebiet zu untersuchen
- Es wurde ein Kaskadenmodellierungsansatz gewählt um die relevanten Prozesse auf jeder Skala zu erfassen und Randbedingungen zu übertragen
- 2D und 3D numerische Grundwasserströmungs- und Transportmodelle wurden auf der Mäander, Hanglagen-, Teileinzugs- und Einzugsgebietsebene erstellt und durch Randbedingungen miteinander verbunden.



Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

- **Modellierung des Schadstofftransports im Songliao Einzugsgebiet (Sustain H2O)**
 - Untersuchung des Grundwasserverhaltens und des Schadstofftransports im Aquifersystem des Demonstrationsgebietes Ashi mittels instationärer 3D-Modellierung
 - Die Auswirkungen des künftigen Wasserbedarfs auf die Sicherheit der Wasserversorgung wurden simuliert, wobei sowohl die Ausbreitung von Schadstoffen aus Altlasten als auch der Eintrag von Nitrat aus der Landwirtschaft betrachtet



Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

- **Ausbreitung von Microcystin im Chao-See**
 - Ein dreidimensionales transienten Modell des Einzugsgebiets des Chao-Sees quantifiziert den Transport des Algentoxins Microcystin im Untergrund und im Grundwasser.
 - Das Absenken des Wasserspiegels des Chao-Sees und die daraus resultierende Änderung der Grundwasserströmungsrichtung reduziert oder stoppt eine großflächige Ausbreitung von Microcystin aus dem See. Die verbleibende Microcystin-Komponente wird schnell im Aquifer zudem schnell abgebaut

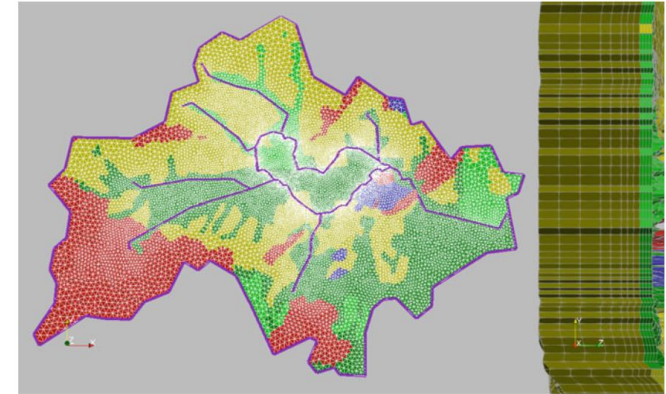


Fig. 7.3 Finite element mesh based on a simplified geometry (left) and a cross-section of a three dimensional mesh (right). Colored according to the finite elements corresponding material group

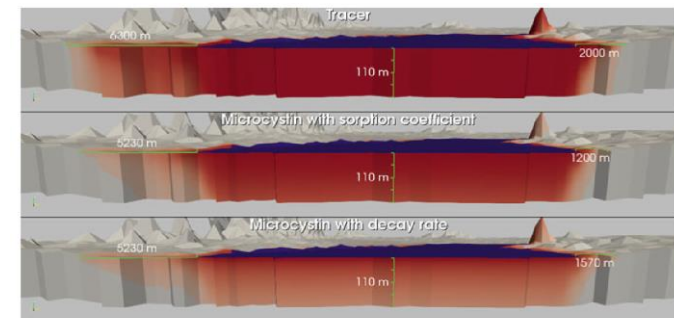
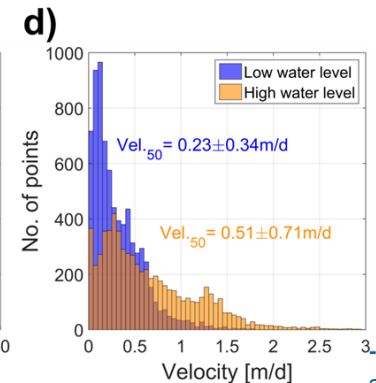
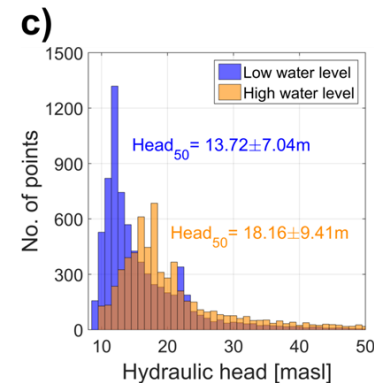
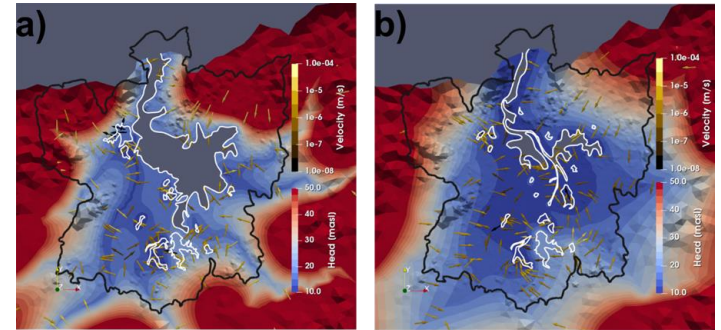


Fig. 7.7 Comparison of the spreading (red colour) of the three mass transport components by means of a cross section at 1120 days

Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

■ Grundwasserdynamiken im Poyang See Becken, China

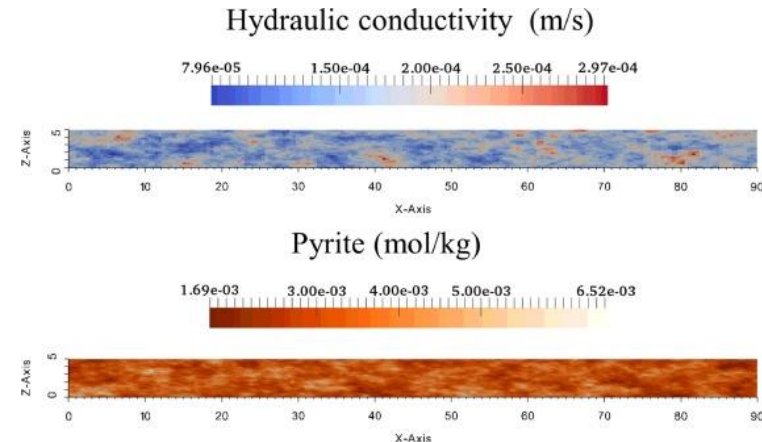
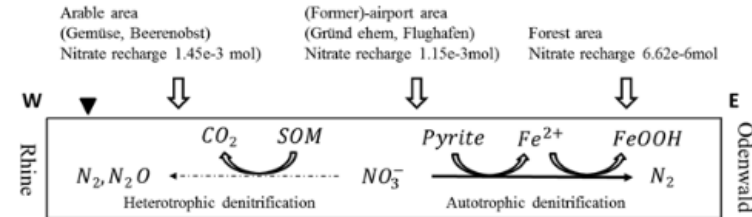
- Ziel des Projekts war es die Wechselwirkungen zwischen Landnutzungs- und Wasserressourcenveränderung unter dem Klimawandel und schnell zunehmenden menschlichen Aktivitäten zu untersuchen.
- OpenGeoSys wurde eingesetzt, um ein planares zweidimensionales numerisches Modell zu erstellen, dass das Grundwasserregime in der Kernregion des Poyang-Sees während der Hochwasser- und Trockenzeit simuliert.
- Saisonale Grundwasserstände und Strömungsgeschwindigkeiten rund um den See sowie das saisonale Austauschvolumen zwischen dem See und den Feuchtgebieten sowie die Verweilzeiten im Aquifer wurden durch numerische Modellierung bestimmt.



Grundwassermodelle: HC Prozesse

▪ Reaktiver Mehrkomponententransport: Fallstudie Hessisches Ried

- Das Hessische Ried, einer der wichtigen Grundwasserspeicher für die dicht besiedelte Rhein-Main-Region in Deutschland, ist das Anwendungsbeispiel für reaktive Mehrkomponenten-Transportsimulationen. Seit Jahrzehnten werden in dieser Region stickstoffbasierte Düngemittel verwendet, um die Produktivität der Böden zu steigern.
- OpenGeoSys und PHREEQC sind gekoppelt, um den reaktiven Mehrkomponententransport in heterogenen porösen Aquiferen zu simulieren.
- Der Massentransport wird in jedem Zeitschritt von OpenGeoSys simuliert, und ein geochemischer Löser wird zur Berechnung der lokalen chemischen Reaktionen eingesetzt



Anwendungsbeispiele: Referenzen

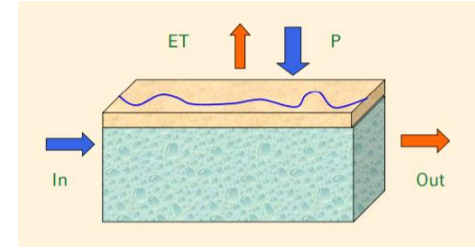
- M. Walther, J.-O. Delfs, J. Grundmann, O. Kolditz, R. Liedl. Saltwater intrusion modeling: Verification and application to an agricultural coastal arid region in Oman, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Volume 236, Issue 18, 2012, Pages 4798-4809, ISSN 0377-0427, <https://doi.org/10.1016/j.cam.2012.02.008>.
- M. Walther, L. Bilke, J.-O. Delfs, Th. Graf, J. Grundmann, O.Kolditz, R. Liedl. Assessing the saltwater remediation potential of a three-dimensional, heterogeneous, coastal aquifer system, *Environmental Earth Sciences*, Volume 72, Number 10, 2014, Pages 3827-3837,ISSN 1866-6299, doi="10.1007/s12665-014-3253-2.
- Sachse, A., Fischer, C., Laronne, J. B., Hennig, H., Marei, A., Kolditz, O., & Rödiger, T. (2017). Water balance estimation under the challenge of data scarcity in a hyperarid to Mediterranean region. *Hydrological processes*, 31(13), 2395-2411.
- Siebert, C., Rödiger, T., Mallast, U., Gräbe, A., Guttman, J., Laronne, J. B., ... & Vachtman, D. (2014). Challenges to estimate surface-and groundwater flow in arid regions: The Dead Sea catchment. *Science of the Total Environment*, 485, 828-841.
- Wollschläger, U., Attinger, S., Borchardt, D., Brauns, M., Cuntz, M., Dietrich, P., ... & Hildebrandt, A. (2017). The Bode hydrological observatory: a platform for integrated, interdisciplinary hydro-ecological research within the TERENO Harz/Central German Lowland Observatory. *Environmental Earth Sciences*, 76(1), 29.
- Nixdorf E, Trauth N. (2018). Evaluating the reliability of time series analysis to estimate variable riparian travel times by numerical groundwater modelling. *Hydrological Processes*. 2018;32:408–420. <https://doi.org/10.1002/hyp.11428>
- Nixdorf, E., Trauth, N., Kalbacher, T., Fleckenstein, J. H., & Kolditz, O. (2018). Modelling the impact of water management in former lignite pits on groundwater regime and catchment boundaries in the Central German Lowlands. In *EGU General Assembly Conference Abstracts* (Vol. 20, p. 19478).
- Dongsheng Liu, Jian Zhao, Woo-Hyun Jeon, Jin-Yong Lee, Erik Nixdorf, Thomas Kalbacher, Holger Weiß (2018). Study on hyporheic exchange and solute transport across river bed-to-bank continuum under transient hydrological conditions. In *EGU General Assembly Conference Abstracts* (Vol. 20, EGU2018-3524-8).

Anwendungsbeispiele: Referenzen

- Nixdorf, E, Sun Y, Su J, Wang Q, Wang T, Kolditz O, Xi B. 2018. Groundwater Risk Sources Identification and Risk Reduction Management in the Song-Liao-River-Basin. In: Chinese Water Systems: Volume 1: Liaohe and Songhuajiang River Basins. Springer. S. 349-398.
- Mao L, Danfeng J, Chifei C, Sun Y, Su J, Xi B, Nixdorf E. 2016. Groundwater Vulnerability Partition in Ashi River Basin. Research of Environmental Sciences 29 (12): 1773–1781
- Sachse A, Nixdorf E, Jang E, Rink K, Fischer T, Xi B, et al. 2017. OpenGeoSys-Tutorial: Computational Hydrology II: Groundwater Quality Modeling. Springer.
- Volpi, G., Magri, F., Colucci, F., Fisher, T., De Caro, M., & Crosta, G. B. (2018). Modeling highly buoyant flows in the Castel Giorgio: Torre Alfina deep geothermal reservoir. Geofluids, 2018.
- Schelenz, S., Vienken, T., Shao, H., Firmbach, L., & Dietrich, P. (2017). On the importance of a coordinated site characterization for the sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface in urban areas: a case study. Environmental Earth Sciences, 76(2), 73.
- E. Jang, W. He, H. Savoy, P. Dietrich, O. Kolditz, Y. Rubin, C. Schüth, T. Kalbacher, Identifying the influential aquifer heterogeneity factor on nitrate reduction processes by numerical simulation, Advances in Water Resources, Volume 99, 2017, Pages 38-52, ISSN 0309-1708, <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2016.11.007>. He, W., Beyer, C., Fleckenstein, J. H., Jang, E., Kolditz, O., Naumov, D., and Kalbacher, T.: A parallelization scheme to simulate reactive transport in the subsurface environment with OGS#IPhreeqc 5.5.7-3.1.2, Geosci. Model Dev., 8, 3333-3348, <https://doi.org/10.5194/gmd-8-3333-2015>, 2015.

Modellbildungsprozess

$$P + In_{sub} + In_{sur} = Out_{sub} + Out_{sur} + ET + \Delta soil + \Delta gw$$



Konzeptionelles Modell

Mathematisches Modell

Black-Box Modelle

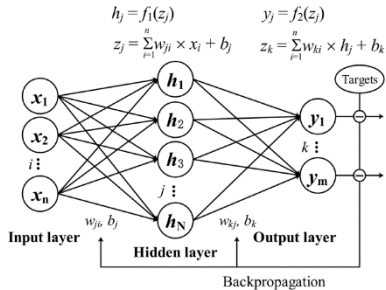
Nutzen empirische/statische Zusammenhänge zwischen Variablen

Prozessbasierte Modelle

Nutzen die physikalischen Grundgleichungen

$$(\phi\beta_f + \beta_m)\rho \frac{\partial P}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\rho \frac{k}{\mu} \nabla (P + \rho gz) \right)$$

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \frac{K_{i,j}^x \Delta t}{S_{i,j} \Delta x^2} u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n + \frac{K_{i,j}^y \Delta t}{S_{i,j} \Delta y^2} u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n + \frac{Q_{i,j}}{S_{i,j}}$$



$$h_j = f_1(z_j)$$

$$y_j = f_2(z_j)$$

$$z_j = \sum_{i=1}^n w_{ji} \times x_i + b_j$$

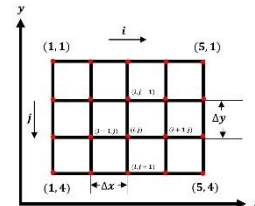
$$z_k = \sum_{i=1}^m w_{ki} \times h_j + b_k$$

Analytisch

Vereinfachte Gleichungen ermöglichen formale direkte Lösung

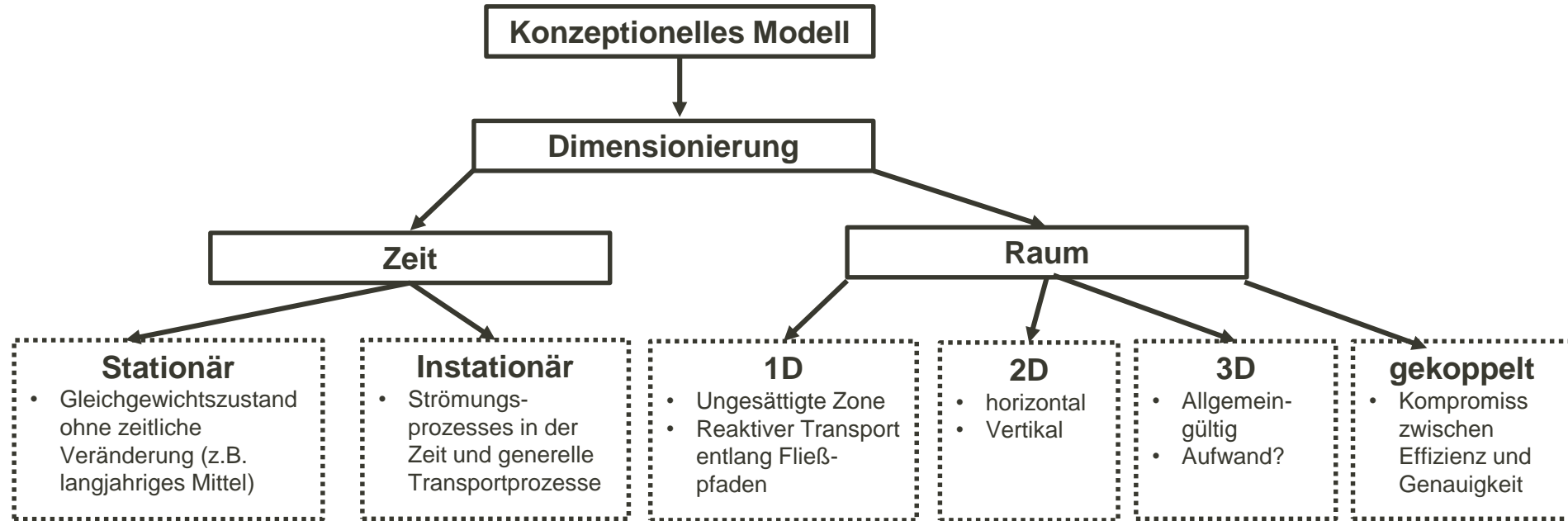
Numerisch

Approximierte (diskretisierte) Gleichungen resultieren in einer Matrixgleichung, die iterativ gelöst werden kann



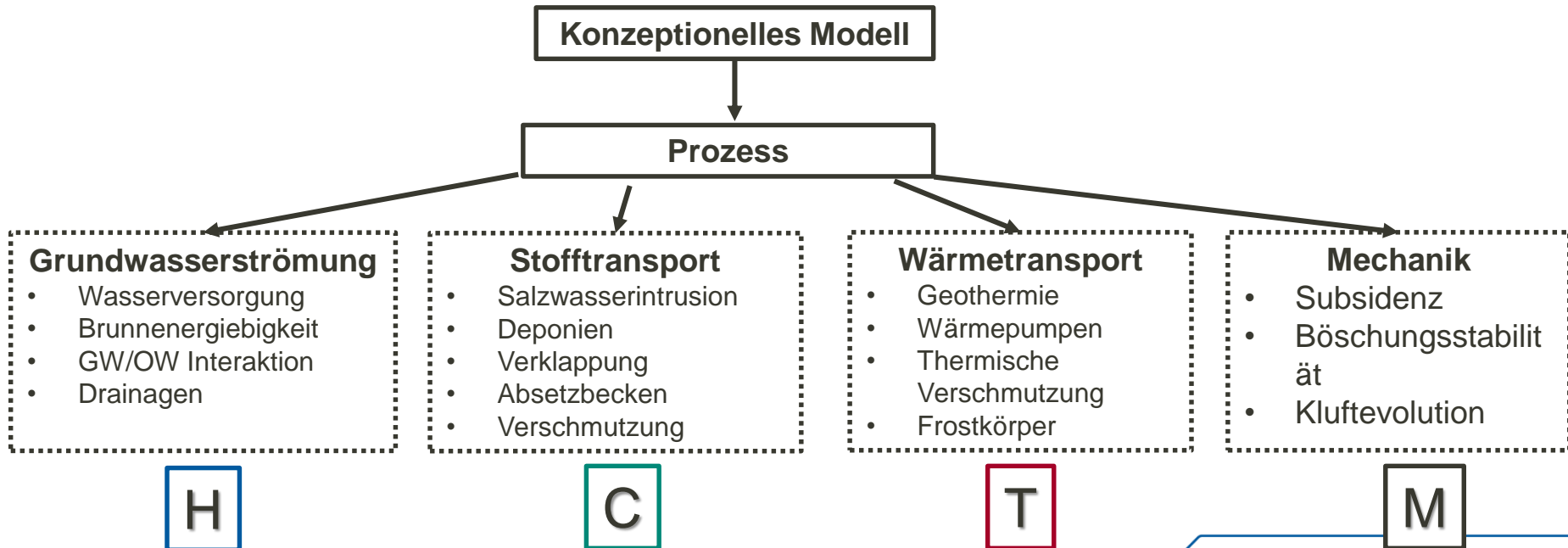
$$Q = 2\pi \cdot k_f \cdot M \cdot \frac{h_2 - h_1}{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)}$$

Modelauswahl: Dimensionen



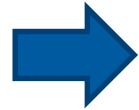
Modellauswahl: Prozesse I

- Welche Prozesse soll das Modell abbilden (Überlegungen aus dem Konzeptionelles Modell):



Modelauswahl: Prozesse II

- Je nach Prozessauswahl ergeben sich verschiedene Zielgrößen und Unterprozesse



Hauptprozess	Abhängige Variable	Anwendungsabhängige Komponenten
Strömung	Fluiddruck, Standrohrspiegelhöhe, Grundwasserflurabstand Sättigung, ...	Poren/Kluft/Karstaquifere Teilsättigung Einphasen/zweiphasen Strömung Ungespannt/gespannte GWL
Wärmetransport	Temperatur, Enthalpie, Innere Energie	Dieselben wie Strömung + Konvektion Wärmeleitung Strahlung
Stofftransport	Konzentration	Dieselben wie Strömung + Konvektion Dispersion Reaktion
Mechanik	Verformung Spannung	Elastische Medien Plastische Medien Viskoelastische Medien

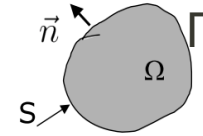
Modelauswahl: Prozesse III

- Je nach Prozessauswahl ergibt sich ein unterschiedlicher Datenbedarf, für Grundwasserströmung zum Beispiel (nach Hölting):
 - Geländehöhen, Geologie, Basis und Oberfläche der relevanten Schichten (Grundwasserleiter, Grundwassernichtleiter)
 - Vorflutpotenziale an Oberflächengewässern
 - Flächendifferenzierte hydraulische Parameter wie **Durchlassigkeitsbeiwerte**, **Speicherkoeffizienten**, **Porosität**
 - Grundwassergleichen und repräsentative Grundwasserstandsganglinien von Grundwassermessstellen
 - Wechselwirkungen zwischen Oberflächengewässern und Grundwasser (Wasserstände und **Leakagekoeffizienten**)
 - Standorte und Mengen für Entnahmen und Versickerungen
 - Flächendifferenzierte Grundwasserneubildung
 - Niederschlag und Verdunstung auf offenen Wasserflächen
- Für Stoff- und Wärmetransport sowie Mechanik erhöht sich der Datenbedarf (z.B. Konzentrationsverteilung, Dispersivitäten, thermische Leitfähigkeit, Wärmekapazität, etc...)

Erhaltungsgesetz

- **Numerischen Grundwassermodelle** basieren auf der **Zerlegung** eines Systems in Teilgebiete und der Aufstellung von **Bilanzgleichungen** (partielle Differentialgleichungen) für jedes Gebiet

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} S(x, t) dx = - \int_{\Gamma} \langle J(x, t) | n(x) \rangle d\sigma + \int_{\Omega} Q(x, t) dx,$$

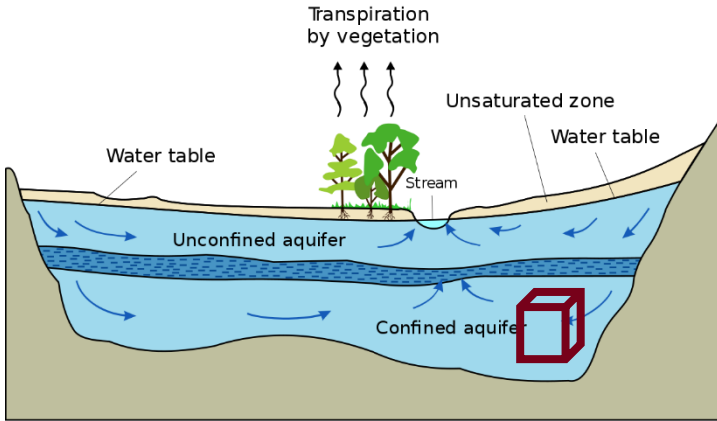






In Worten: $\left\{ \begin{array}{l} \text{Akkumulations} \\ \text{rate für } S \text{ in } \Omega \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Fluss von } J \text{ in } \Omega \\ \text{durch die} \\ \text{Oberfläche } \Gamma \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Quellen und} \\ \text{Senken in } \Omega \end{array} \right\}$

Die Kontinuitätsgleichung kann mit dem Gaußschen Integralsatz hergeleitet werden:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}[\rho v] - Q_m = 0 \quad \text{mit} \quad S = \rho(x, t, p, X, T)$$

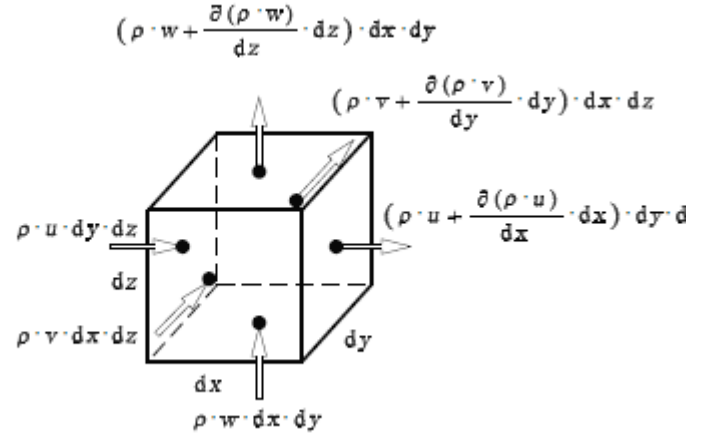
Massenerhaltungsgesetz für ein Kontrollvolumen



-  High hydraulic-conductivity aquifer
-  Low hydraulic-conductivity confining unit
-  Very low hydraulic-conductivity bedrock
-  Direction of ground-water flow

$$\vec{v}_f = \begin{pmatrix} u \\ v \\ z \end{pmatrix}$$

$$\frac{dV}{dt} = 0$$



$$V_{Pores} = \phi V$$

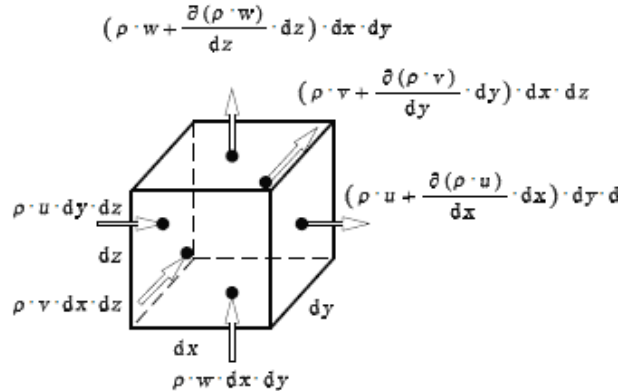
$$\rho = \rho_f$$

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d(\phi \rho_f V)}{dt} = V \phi \frac{d\rho_f}{dt} + V \rho_f \frac{d\phi}{dt} + \cancel{\rho_f \phi \frac{dV}{dt}} = V \frac{d(\phi \rho_f)}{dt}$$

<https://tinyurl.com/veafz3ch>

Massenerhaltungsgesetz für ein Kontrollvolumen

Änderung der Masse in einem Volumenelement über die Zeit = Σ des einströmenden Massenstroms in das Volumenelement - Σ des ausströmenden Massenstroms aus dem Volumenelement



links: $\dot{m} = \rho_f \cdot u \cdot dy \cdot dz$

Taylor Reihe

rechts: $\dot{m} = \left(\rho_f \cdot u + \frac{\partial(\rho_f \cdot u)}{\partial x} \cdot dx \right) \cdot dy \cdot dz$



Schauen wir uns das ganze Element mit den Kantenlängen dx , dy and dz and dem Volumen $dV = dx \cdot dy \cdot dz$ an

Massenbilanz in einem Kontrollvolumen

- mathematischen Ausdruck für die zeitliche Änderung der Masse im Volumenelement

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} dx dy dz = & \left(\phi\rho_f u - \left(\phi\rho_f u + \frac{\partial(\phi\rho_f u)}{\partial x} dx \right) \right) dy dz + \\ & \left(\phi\rho_f v - \left(\phi\rho_f v + \frac{\partial(\phi\rho_f v)}{\partial y} dy \right) \right) dx dz + \\ & \left(\phi\rho_f w - \left(\phi\rho_f w + \frac{\partial(\phi\rho_f w)}{\partial z} dz \right) \right) dx dy \end{aligned}$$

- Resultiert in:
$$\frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\phi\rho_f u)}{\partial x} + \frac{\partial(\phi\rho_f v)}{\partial y} + \frac{\partial(\phi\rho_f w)}{\partial z} = 0$$

- Umschreiben und Quellterme:
$$\frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} + \operatorname{div}[\phi\rho_f \mathbf{v}_f] - Q_m = 0$$

Druckbasierte Gleichung

- Wie definieren wir die Druckabhängigkeiten
- Wie hängt die Dichte vom Druck ab?
- Ist die Dichte eine geeignete Primärvariable? **Nein**

$$(1) \quad \frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} + \text{div}[\phi\rho_f\mathbf{v}_f] - Q_m = 0$$

- Anwendung der Ketten- und Produktregel auf den ersten Term:

$$(2) \quad \frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} = \left(\rho_f \frac{\partial\phi}{\partial p} + \phi \frac{\partial\rho_f}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t}$$

Massenänderungsrate durch Porenraumveränderung

Dichteänderung des Wassers

Druckbasierte Gleichung

- (2) in (1)

$$\left(\rho_f \frac{\partial \phi}{\partial p} + \phi \frac{\partial \rho_f}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div}[\rho_f \phi \mathbf{v}_f] - Q_m = 0$$

- Der Term in den Klammern wird (in der oberflächennahen Hydrogeologie) oft als Summe zweier Konstanten, der Matrixkompressibilität und der Fluidkompressibilität, gesehen:

$$(\rho_f((1 - \phi)\beta_m + \phi\beta_f)) \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div}[\rho_f \phi \mathbf{v}_f] - Q_m = 0$$



$$\beta_m = \frac{1}{(1 - \phi)} \frac{\partial \phi}{\partial p}$$

$$\beta_f = \frac{1}{\rho_f} \frac{\partial \rho_f}{\partial p}$$

Rocks	Porosity (%)
Fractured basalt	0.05 - 0.50
Karst limestone	0.05 - 0.50
Sandstone	0.05 - 0.30
Limestone, dolomite	0.00 - 0.20
Shale	0.00 - 0.10
Fractured crystalline rock	0.00 - 0.10
Dense crystalline rock	0.00 - 0.05
Unconsolidated Deposits	
Gravel	0.25 - 0.40
Sand	0.25 - 0.50
Silt	0.35 - 0.50
Clay	0.40 - 0.70

From groundwatergeek.com

Druckbasierte Gleichung

- Wenn wir keine dichtegetriebene Strömung berücksichtigen (z.B. Salzwasserintrusion), kann ρ_f in Gleichung (2) als Konstante betrachtet werden und die Gleichung damit dividiert werden:

$$\left((1 - \phi)\beta_m + \phi\beta_f \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div}[\phi v_f] - \frac{Q_m}{\rho_f} = 0$$

- Der Termin der Klammer entspricht dem **spezifischen Speicherkoeffizienten** geteilt mit der **Fluidichte** und der **Gravitationskonstanten**. Das Verhältnis kann zu einer neuen Konstante S' zusammengefasst werden:

$$S'_s \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div}[\phi v_f] - Q_V = 0 \quad Q_V = \text{volumetric source term}$$

- Das **Darcy Gesetz** gesetzt kann angewandt werden um die Fluidgeschwindigkeit zu ersetzen:

$$\phi v_f = -\frac{\kappa}{\mu} \text{grad}(p + \rho_f g z)$$

Druckbasierte Gleichung

- Wir erhalten:

$$\dot{S} \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left[\frac{\kappa}{\mu} \operatorname{grad}(p + \rho_f g z) \right] - \frac{Q_V}{\rho_f} = 0$$

- Zwei Fluideigenschaften ρ_f , die Fluidichte und μ , die dynamische Viskosität
- κ ist die intrinsische Permeabilität des porösen Mediums
- S' ist der zuvor eingeführte Speicherterm
- Die druckbasierten Grundwassergleichung können für die numerische Modellierung unter hinzuziehen von Rand- und Anfangsbedingungen genutzt werden

Potentialbasierte Form

▪ Hydraulisches Potential: $H = \frac{p}{\rho_f g} + z$

▪ Hydraulische Leitfähigkeit: $K = \frac{\kappa g \rho_f}{\mu}$

▪ Speicherkoeffizient $S = \hat{S} g \rho_f$

- Potential-basierte Form für Strömung durch ein anisotropes gesättigtes poröses Medium:

$$S \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}[K \operatorname{grad} H] - Q_V = 0$$

Speicherkoeffizient

$$S \frac{\partial H}{\partial t} - \text{div}[K \text{grad } H] - Q_V = 0$$

- In transienten Simulationen beschreibt der **Speicherkoeffizient S [-]** die Aufnahme/Abgabe von Wasser aus dem Speicher eines porösen Mediums
- Der **spezifische Speicherkoeffizient S_s [L-1]** entspricht dem Volumen an Wasser, das aus dem Speicher abgegeben wird pro Einheitsvolumen Grundwasserleiter und pro Einheitsabnahme im Potential.

$$S_s = \frac{S}{M} = \frac{-\Delta V_W}{V \Delta h}$$

- In **gespannten** Aquifern ermöglicht Kompression (Wasser+Matrix) den Wasseraustausch, in **ungespannten** Aquifern durch Entwässerung der Poren → S_{ungespannt} >> S_{gespannt}

Values of specific yield, from Johnson (1967)

Material	Specific Yield (%)		
	min	avg	max
<i>Unconsolidated deposits</i>			
Clay	0	2	5
Sandy clay (mud)	3	7	12
Silt	3	18	19
Fine sand	10	21	28
Medium sand	15	26	32
Coarse sand	20	27	35
Gravelly sand	20	25	35
Fine gravel	21	25	35
Medium gravel	13	23	26
Coarse gravel	12	22	26

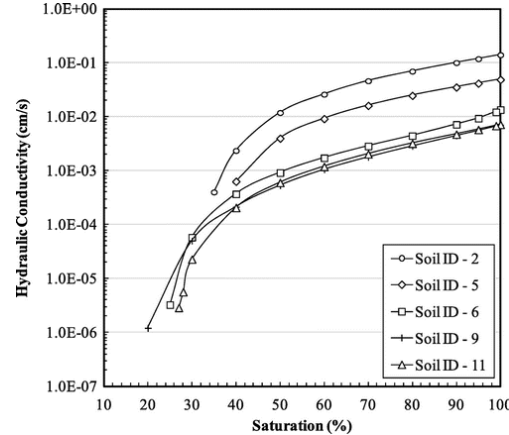
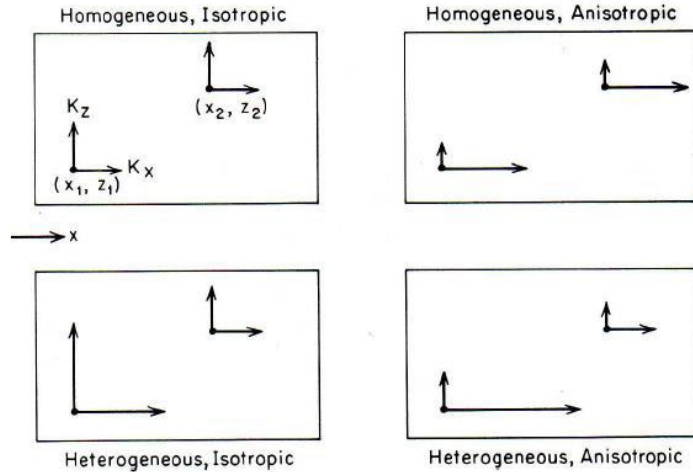
Table 4 Values of specific storage for given values of aquifer compressibility assuming porosity equal to 15 % (After Younger, 1993)

Typical Lithologies	Aquifer Compressibility (m ² /kg)	Specific Storage (m ⁻¹)
Clay	10 ⁶	9.81x10 ³
Silt, fine sand	10 ⁷	9.82x10 ⁴
Medium sand, fine gravel	10 ⁸	9.87x10 ⁵
Coarse sand, medium gravel, highly fissured rock	10 ⁹	1.05x10 ⁶
Coarse gravel, moderately fissured rock	10 ¹⁰	1.63x10 ⁶
Unfissured rock	10 ¹¹	7.46x10 ⁷

ungespannt

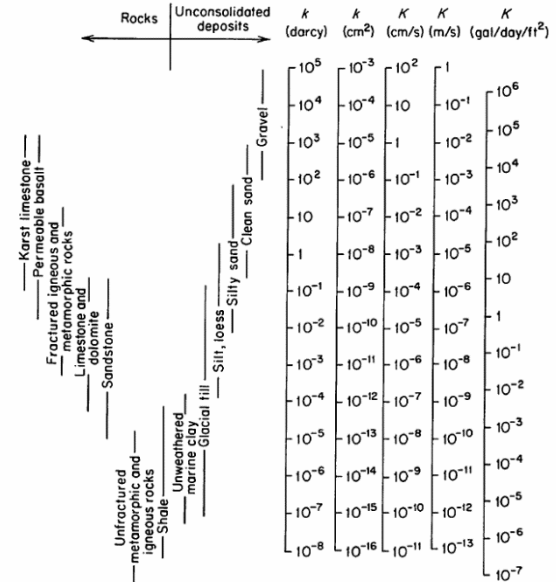
gespannt

Hydraulische Leitfähigkeit

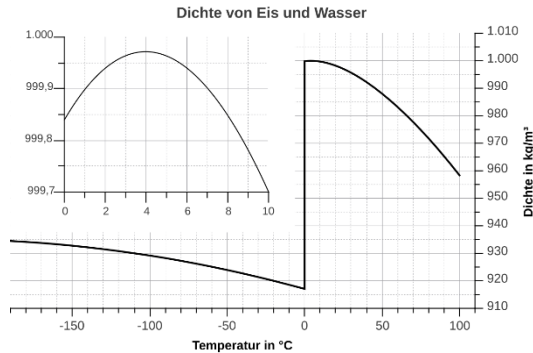


- Hydraulische Leitfähigkeit ist ein Tensor und abhängig von Strömungsrichtung, Aquifertyp und Sättigung
- Für isotope, homogene Bedingungen gilt:

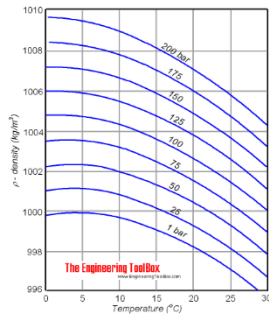
$$S \frac{\partial H}{\partial t} - K \Delta H - Q_V = 0$$



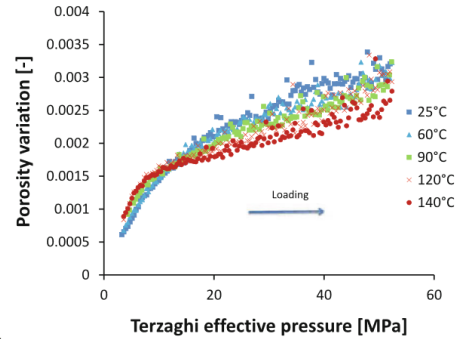
Diskussion der Koeffizienten



Temperaturabhängigkeit der Wasserdichte
(Wikipedia)



Druckabhängigkeit der Wasserdichte



Druckabhängigkeit der Porosität in Sandstein (Hassan et al, 2014)

Table 1
Porosity Models in Select GSFs

GSF code	Porosity model	Matrix compressibility
FEHM (Zyvoloski et al, 2011)	$\phi = \phi_0 + \beta_m (P - P_0)$	$\beta_m = d\phi / dP$
PFLOTRAN (Lichtner et al, 2015)	$\phi = 1 - (1 - \phi_0) e^{-\beta_m (P - P_0)}$	$\beta_m = (1 - \phi)^{-1} (d\phi / dP)$
STOMP ^a (White & Oostrom, 2000)	$\phi = 1 - (1 - \phi_0) e^{-\beta_m (P - P_0)}$	$\beta_m = (1 - \phi)^{-1} (d\phi / dP)$
ECLIPSE ^b (Espelund, 2015; Pettersen, 2006)	$\phi = \phi_0 e^{\beta_m (P - P_0)}$	$\beta_m = d\phi / dP$
BOAST ^c (Fanchi et al, 1982)	$\phi = \phi_0 e^{\beta_m (P - P_0)}$	$\beta_m = \phi^{-1} (d\phi / dP)$
TOUGH2 ^{b,d} (Pruess et al, 1999)	$\phi = \phi_0 e^{\beta_m (P - P_0)}$	$\beta_m = \phi^{-1} (d\phi / dP)$

^aCompressibility is calculated from specific storage.

^bPorosity model is available, but it is unclear if it is the default.

^cBOAST has β_m as part of the total compressibility.

^dAssumes isothermal conditions.

Implementation im Code (Birdsell et al, 2014)

Vertical, drained compressibilities^[5]

Material	β (m ² /N or Pa ⁻¹)
Plastic clay	$2 \times 10^{-6} - 2.6 \times 10^{-7}$
Stiff clay	$2.6 \times 10^{-7} - 1.3 \times 10^{-7}$
Medium-hard clay	$1.3 \times 10^{-7} - 6.9 \times 10^{-8}$
Loose sand	$1 \times 10^{-7} - 5.2 \times 10^{-8}$
Dense sand	$2 \times 10^{-8} - 1.3 \times 10^{-8}$
Dense, sandy gravel	$1 \times 10^{-8} - 5.2 \times 10^{-9}$
Ethyl alcohol ^[6]	1.1×10^{-9}
Carbon disulfide ^[6]	9.3×10^{-10}
Rock, fissured	$6.9 \times 10^{-10} - 3.3 \times 10^{-10}$
Water at 25 °C (undrained) ^[7]	4.6×10^{-10}
Rock, sound	$< 3.3 \times 10^{-10}$
Glycerine ^[6]	2.1×10^{-10}
Mercury ^[6]	3.7×10^{-11}

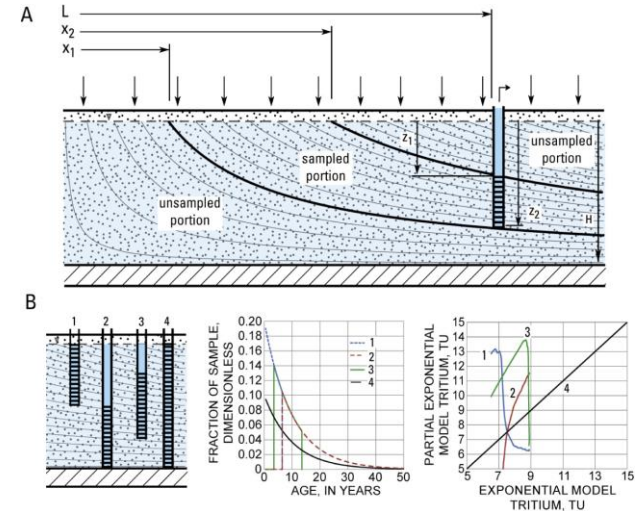
Analytische Lösungen

- Benchmarking von numerischen mathematischen Modellen
- Vermeidung unnötiger Komplexität (Transient, 3D, etc)
- Abschätzung Parametersensitivitäten und Unsicherheiten
- Schärfen der „Modellierintuition“ (Haitjema, 2006)

A homogeneous aquifer with constant thickness (H), and porosity (ϕ), and uniform recharge rate (r) has the following depth-dependent age relation (Vogel, 1967):

$$T(z) = -\frac{H\phi}{r} \ln\left(\frac{H-z}{H}\right) \quad (3)$$

$$\tau_s = \tau_{aq} = \left(\frac{H\phi}{r}\right)$$



Jurgens et al 2016; Vogel 1967

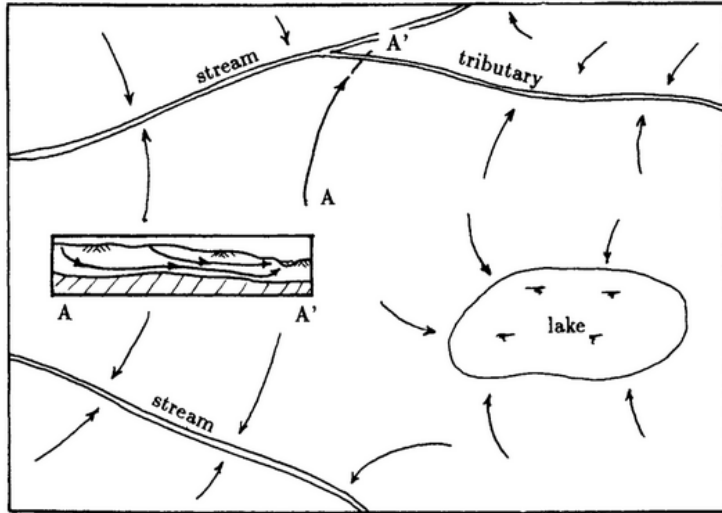
Analytische Modelle und Numerische Modelle

Analytische Modelle	Numerische Modelle
Geringe Rechenzeiten	Iterative Lösungen einer Gleichungsmatrix erfordert höhere Rechenzeiten
Kontinuierlich in Raum und Zeit	Diskret in Raum und Zeit
Benötigen simple Systemgeometrien und Randbedingungen	Lösung transienter, heterogener 3D Systeme mit komplexen Randbedingungen
Einfache Analytische Lösungen sind per Hand lösbar/ komplexere benötigen Computerprogramme	Fast immer Nutzung von Spezialsoftware

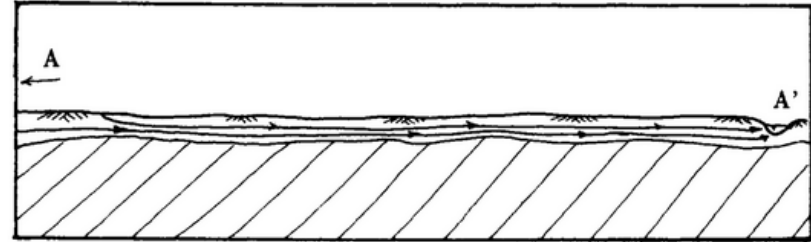


Analytische Lösungsverfahren mit komplexen Geometrien und Randbedingungen sind möglich für lineare Systeme → Analytic Element Method

Einfache Lösungen, Beispiel



3D Fließfeld in einem regionalen Aquifer
(Hajtema et al, 2006)



Profilschnitt A-A' im wahren Maßstab

- Oft ist der Grundwasserfluss weitgehend horizontal (Fließweglänge \gg Aquifermächtigkeit)
- Dupuit-Forchheimer-Annahme: Grundwasserpotenziale ändern sich nicht mit der Tiefe
- Reduktion eines 3D-Problems auf ein 2D-Problem

Lösungen mit reduzierter Dimensionalität

- Integration über die Tiefe (z-Richtung) führt zur zweidimensionalen Grundwassergleichung ($\partial h / \partial z = 0$, $\partial K / \partial z = 0$)

$$S \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}[KM \operatorname{grad} H] - Q_V = 0$$

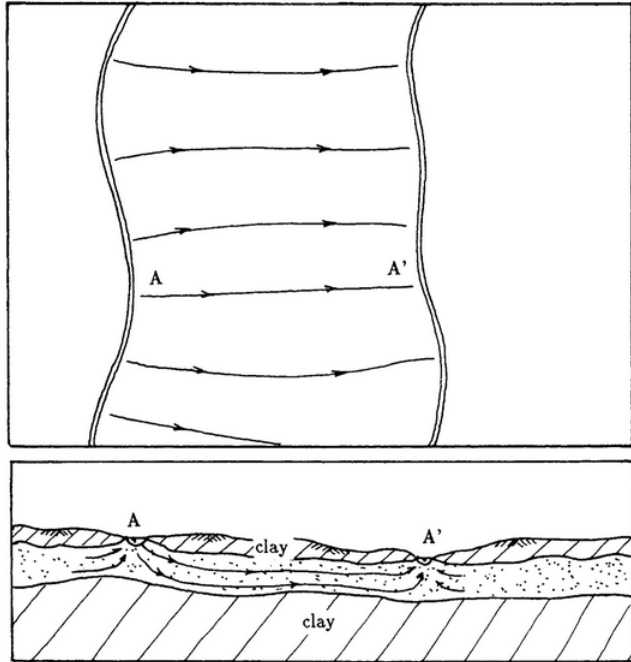
Gespannt, linear

$$S_y \frac{\partial H}{\partial t} - \operatorname{div}[KH \operatorname{grad} H] - Q_V = 0$$

Ungespannt, nichtlinear

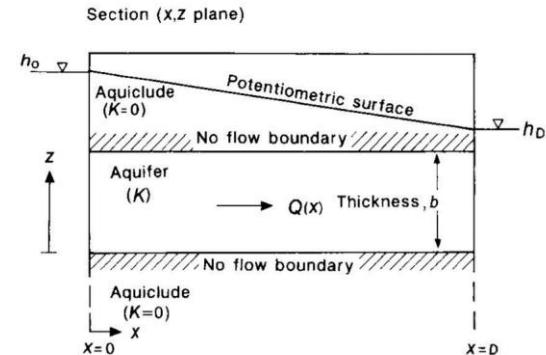
- Das Produkt aus Hydraulischer Leitfähigkeit (K) und Aquifermächtigkeit (M) wird auch als Transmissivität (T) bezeichnet
- Beachten Sie, S, ist der Speicherkoeffizient und S_y der „specific yield“, ~ effektive Porosität

Einfache Lösungen: 1D Problem

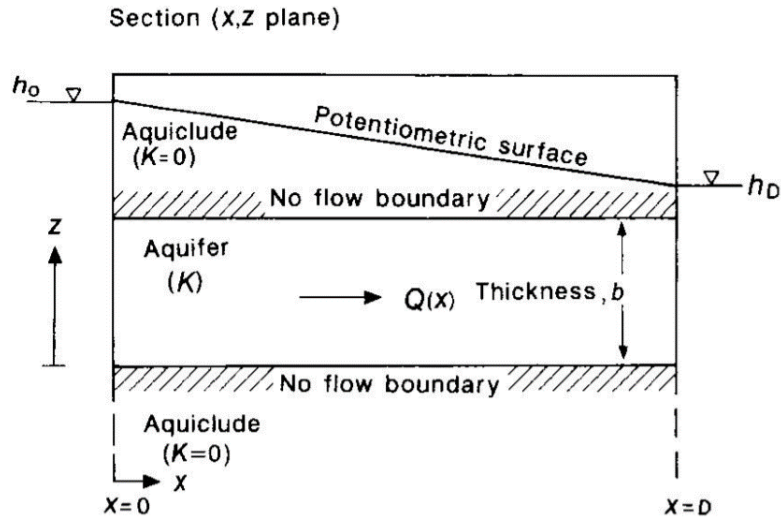


Hajtema et al, 2006

- Grundwasserströmung zwischen zwei Flüssen in einem gespannten Aquifer.
- Annahme: Die Strömung durch den Querschnitt repräsentiert das regionale Fließverhalten und die Dupuit-Forchheimer Annahme gilt
- Wir erhalten ein 1D Problem



Einfache Lösungen, Beispiel



~~$$S \frac{\partial H}{\partial t} - \text{div}[KM \text{grad } H] - Q_V = 0$$~~

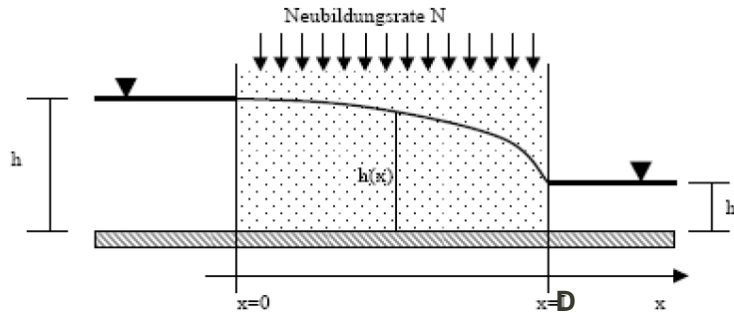


$$h(x) = \frac{h_D - h_0}{D} x + h_0$$

- Aber was ist mit dem spezifischen Durchfluss:

$$q_x = -K \frac{\partial H}{\partial x} = -K \frac{h_D - h_0}{D}$$

Einfache Lösungen, Beispiel



$$h(x=0) = h_0$$

$$h(x=L) = h_L$$

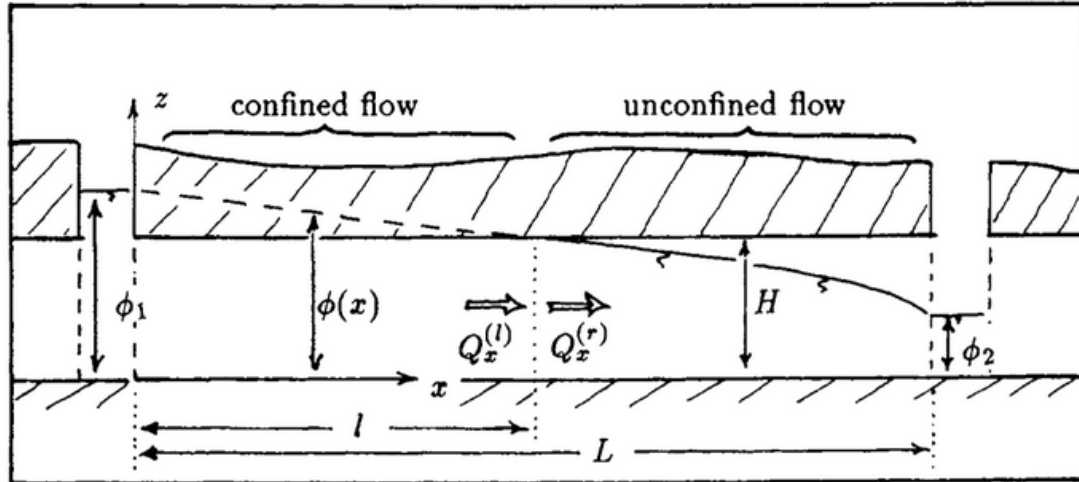
- Ungespannter Aquifer mit Grundwasserneubildung
- Annahmen: Die teilgesättigte Zone ist dünn und hat eine geringe Leitfähigkeit \rightarrow Vernachlässigbar

$$S_y \frac{\partial H}{\partial t} - \text{div}[KH \text{grad } H] - Q_V = 0$$



$$h^2(x) = \frac{h_D^2 - h_0^2}{D} x + h_0^2 + \frac{N}{K} x(D - x)$$

Einfache Lösungen, Beispiele

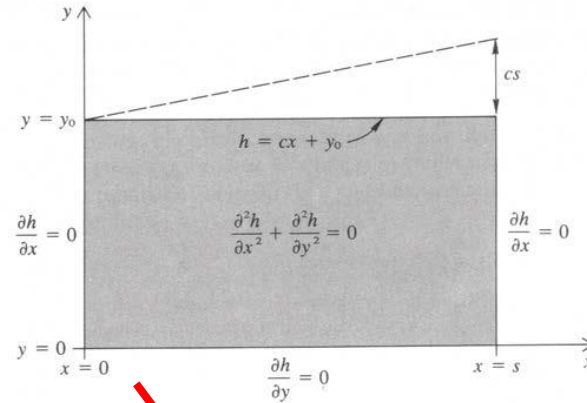
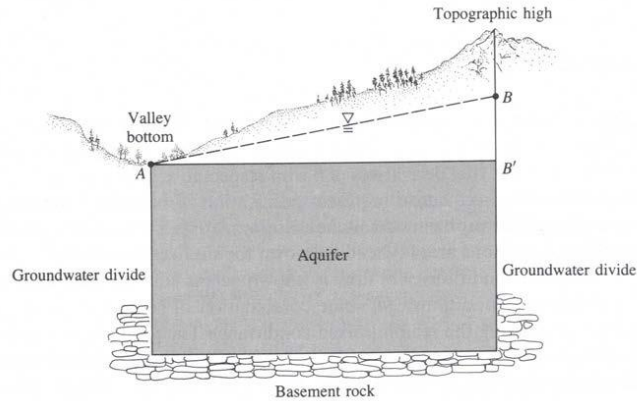


- Mischform:
- Lösung über Massenbilanz am Übergang gespannt/ungespannt

$$l = \frac{2HL(H - \phi_1)}{\phi_2^2 - 2H\phi_1 + H^2}$$

Einfache Lösungen, Beispiel

- Gespannter 2D Aquifer zwischen zwei Wasserscheiden (Toth Strömung)



~~$$S_y \frac{\delta H}{\delta t} - \text{div}[KH \text{grad } H] - Q_V = 0$$~~

$$h(x, y) = y_0 + \frac{cs}{2} - \frac{4cs}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\cos[(2m+1)\pi x / s] \cosh[(2m+1)\pi y / s]}{(2m+1)^2 \cosh[(2m+1)\pi y_0 / s]}$$

Analytische Lösungen

- Fennemore and Hantzche (1983)

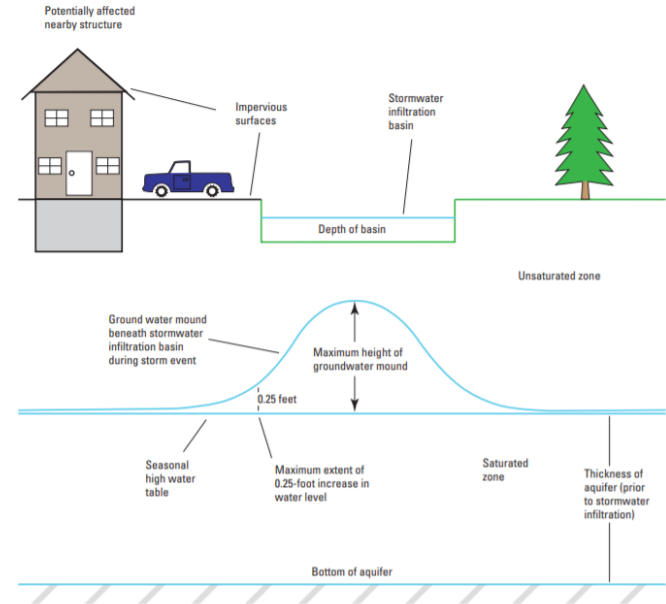
$$z_m = IC \left(\frac{L}{4} \right)^n \left(\frac{1}{K\bar{h}} \right)^{0.5n} \left(\frac{t}{S_y} \right)^{1-0.5n}$$

- Haitjema (1995)

$$\Delta h = \frac{NL^2}{8\bar{T}}$$

- Erkenntnis für die Modellierung:

- Kalibrierung auf Wasserstände ergibt nur Aussagen über das Verhältnis Neubildung/Transmissivität
- Kalibrierung ist insensitive für hohe Transmissivitäten und im Umfeld von Randbedingungen
- **Viele Weitere “Faustregeln” sind ableitbar!!!**



Grundwasserhügel