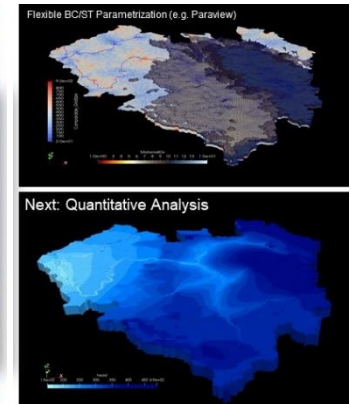
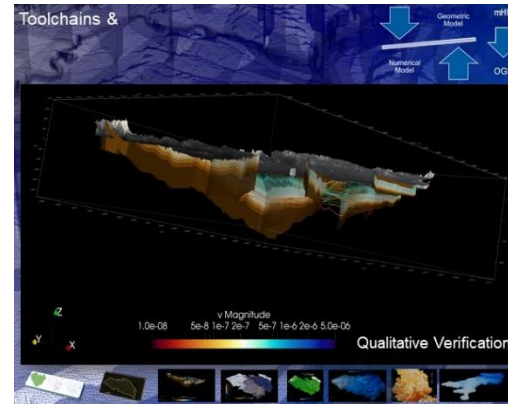


“Regionale Grundwassermodellierung“ Veranstaltung im Modul Modellierung von Hydrosystemen

Einführung /Grundwasserströmungsgleichung

Dr. Erik Nixdorf

04.07.2025



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 (CRAES, 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 Umwelteinformatik
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)
 - Eingabe/Ausgabe für Simulationen mit OpenGeoSys 6
 - Advektiv-dispersiver Transport (nächste Woche!)
 - Vieles mehr aus anderen Lehrveranstaltungen 😊

Die Unterlagen zum Kurs finden sie hier:

https://drive.google.com/drive/folders/1ufi3zoewzZXHZa1krgeGfAU1_VU9nt2k

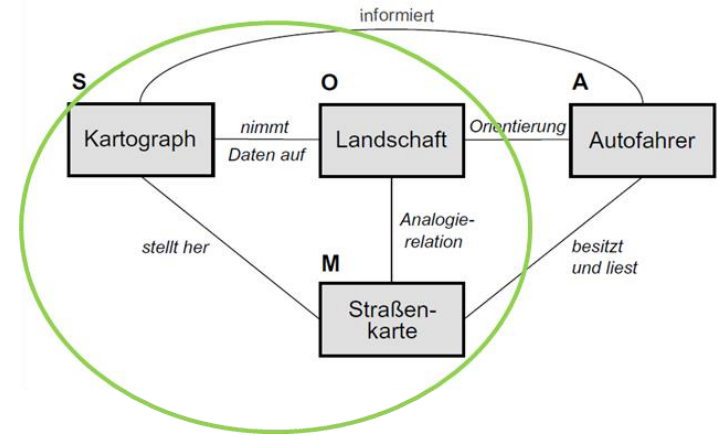
Regionale Grundwassersysteme -Aufbau

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

- *V0: Einführung und Beispiele von Grundwasserströmungsmodellen und -simulationen*
- 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

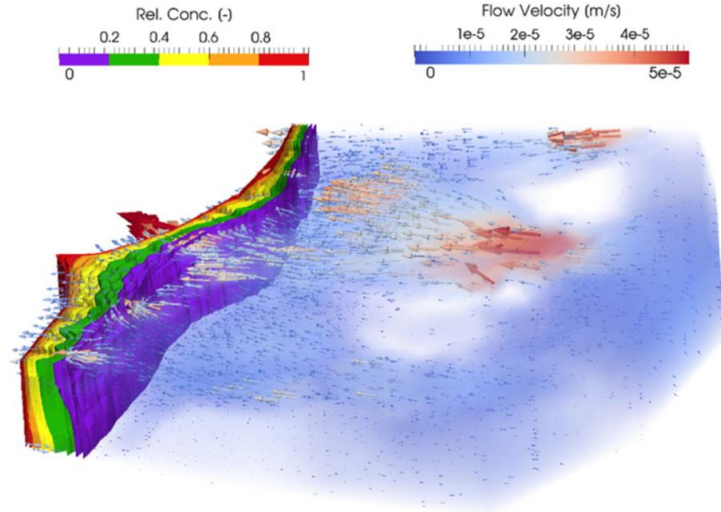
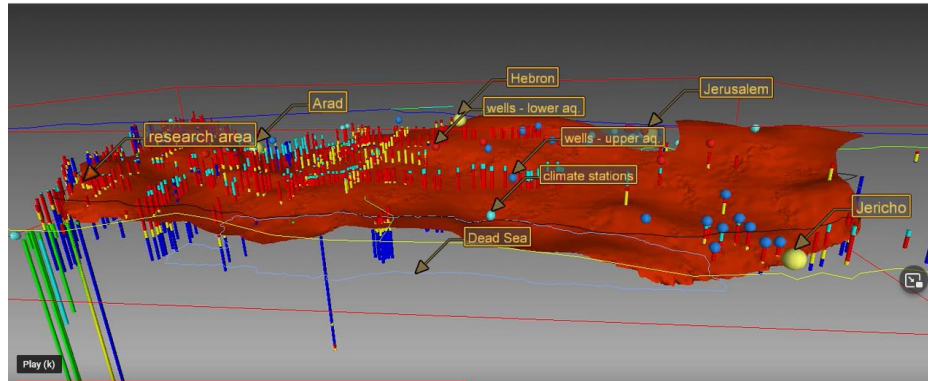


Figure: Heterogeneous flow field in groundwater model domain, natural saltwater intrusion for steady state conditions (M. Walther et al., 2012)

Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

■ Westliches Einzugsgebiet des Toten Meeres

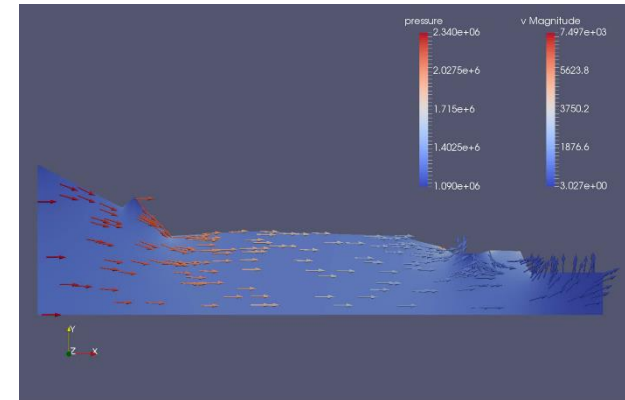
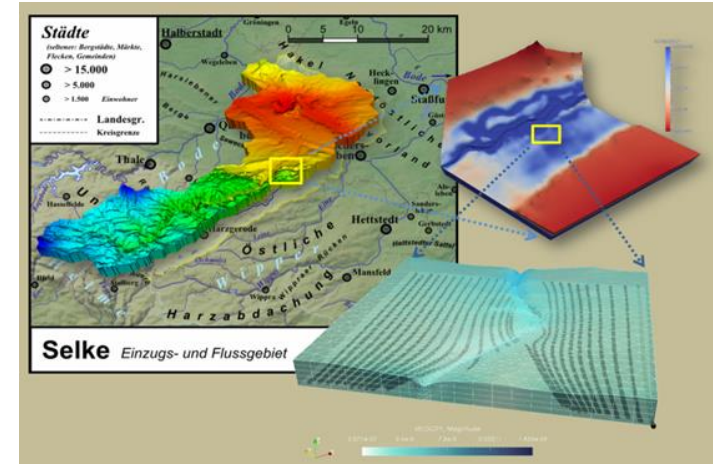
- Die Grundwasserressourcen im Nahen Osten sind durch die ariden/semi-ariden klimatischen Bedingungen stark begrenzt
- Die Studie befasst sich mit der räumlich-zeitlich heterogenen Quantifizierung der Grundwasserneubildung. Das Untersuchungsgebiet umfasst dabei eine Größe von 4000 km²



Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

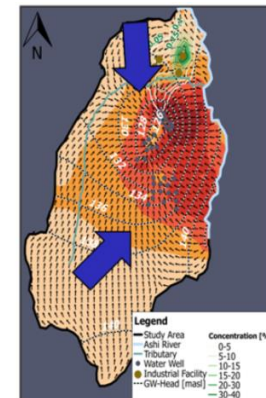
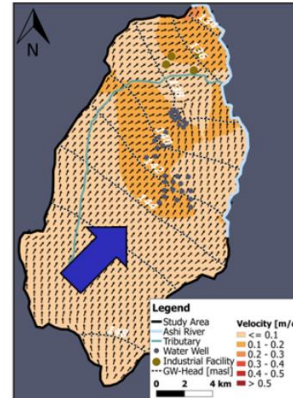
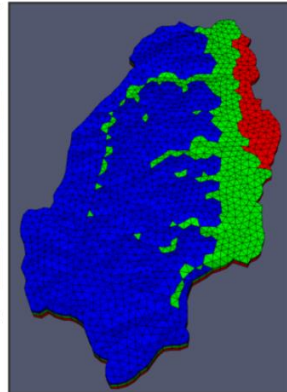
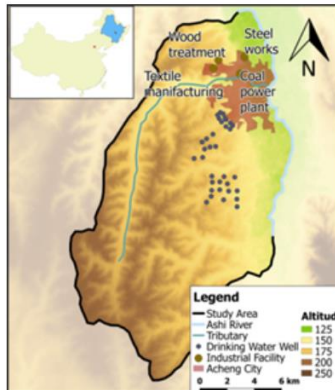
■ TERENO: Selke Catchment

- 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

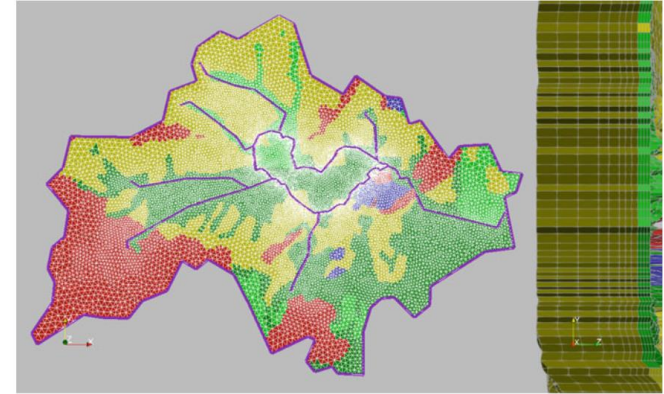


Fig. 7.3 Finite element mesh based on a simplified geometry (left) and a cross-section of a three dimensional mesh (right). Colored according to the finite elements corresponding material group

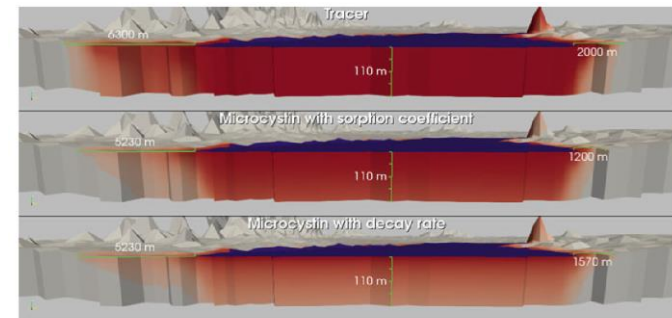
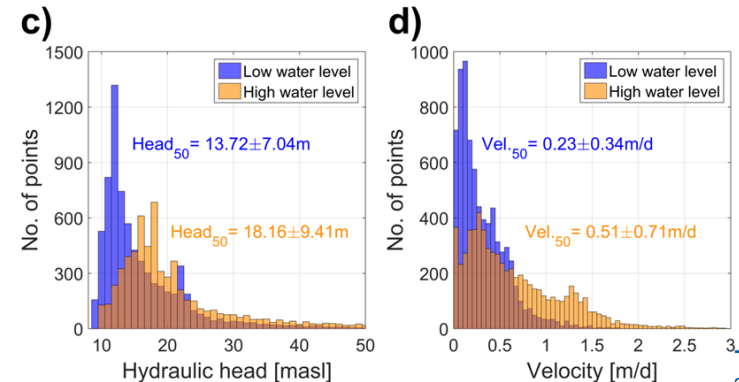
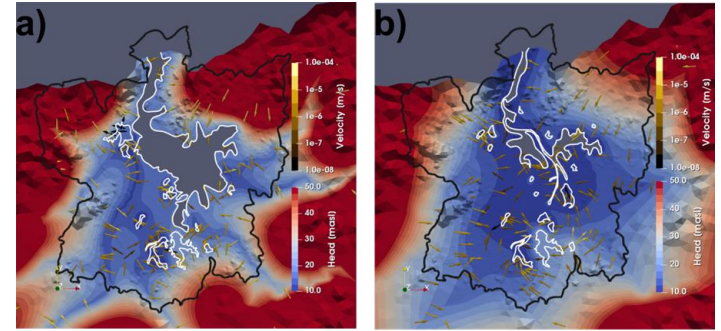


Fig. 7.7 Comparison of the spreading (red colour) of the three mass transport components by means of a cross section at 1120 days

Grundwassermodelle: Geohydraulische Fallstudien

■ Grundwasserdynamiken im Poyang See Becken, China

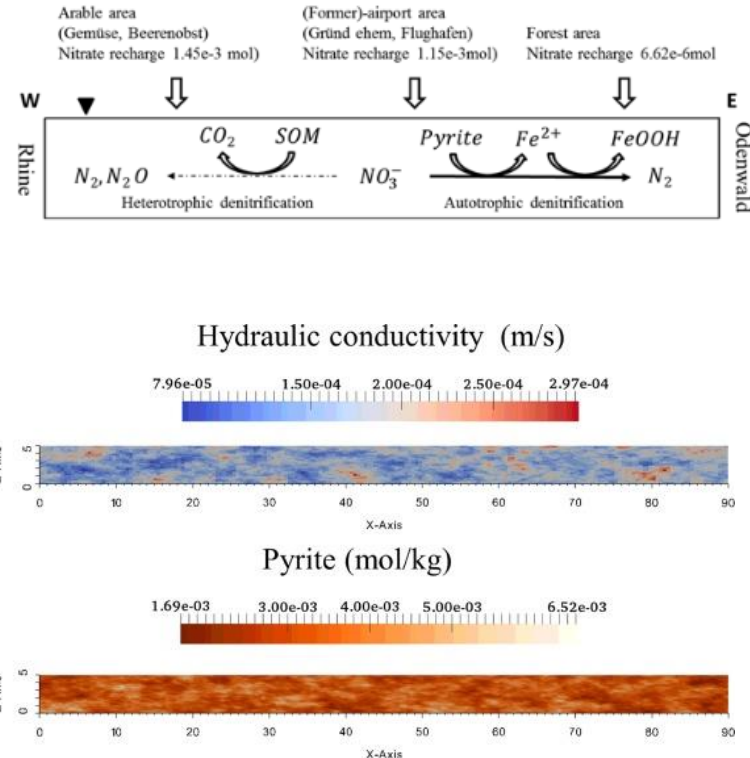
- Ziel des Projekts war es die Wechselwirkungen zwischen Landnutzungs- und Wasserressourcenveränderung unter dem Klimawandel und schnell zunehmenden menschlichen Aktivitäten zu untersuchen.
- OpenGeoSys wurde eingesetzt, um ein planares zweidimensionales numerisches Modell zu erstellen, dass das Grundwasserregime 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.



Grundwassersmodelle: 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

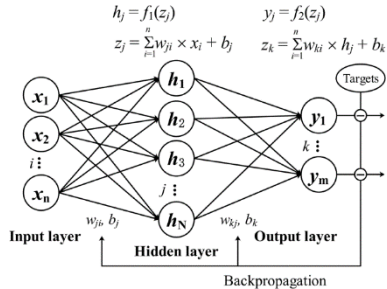
$$P + In_{sub} + In_{sur} = Out_{sub} + Out_{sur} + ET + \Delta soil + \Delta gw$$

Konzeptionelles Modell

Mathematisches Modell

Black-Box Modelle

Nutzen empirische/statistische Zusammenhänge zwischen Variablen



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

Prozessbasierte Modelle

Nutzen die physikalischen Grundgleichungen

Analytisch

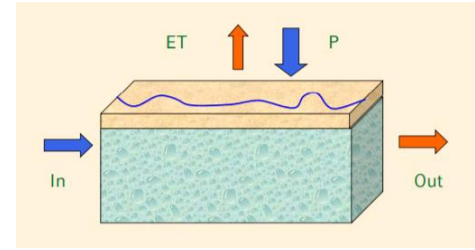
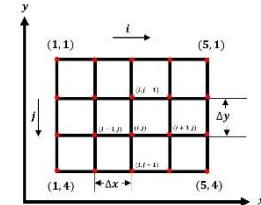
Vereinfachte Gleichungen ermöglichen formale direkte Lösung

Numerisch

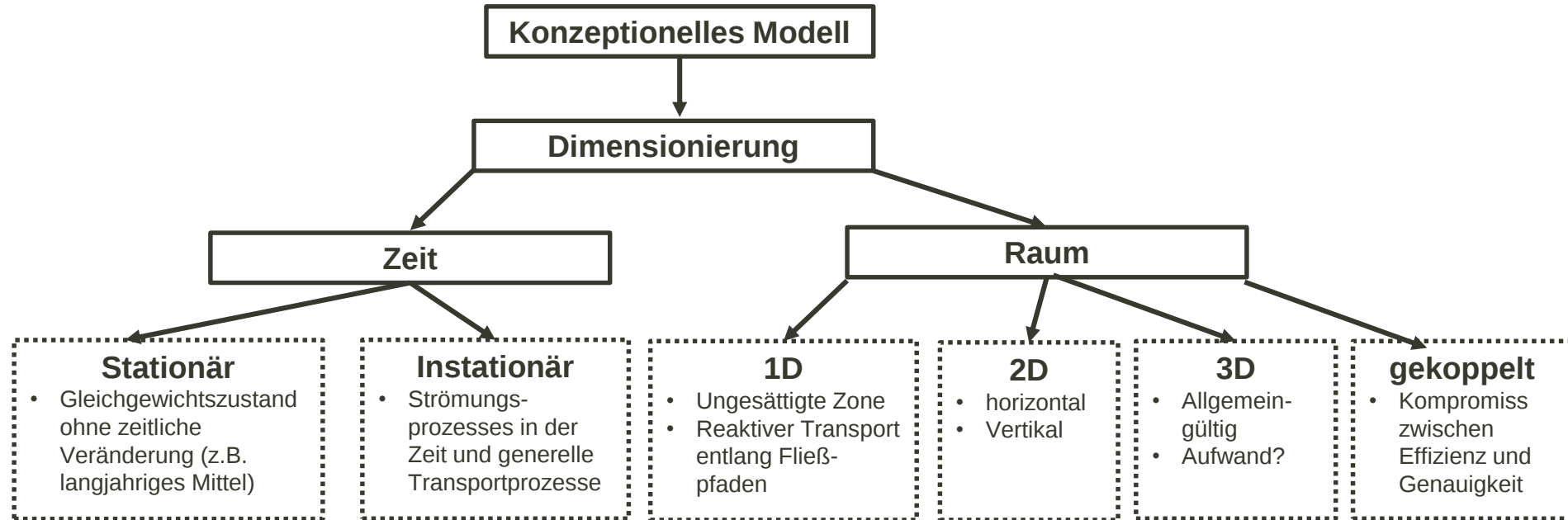
Approximierte (diskretisierte) Gleichungen resultieren in einer Matrixgleichung, die iterativ gelöst werden kann

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

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

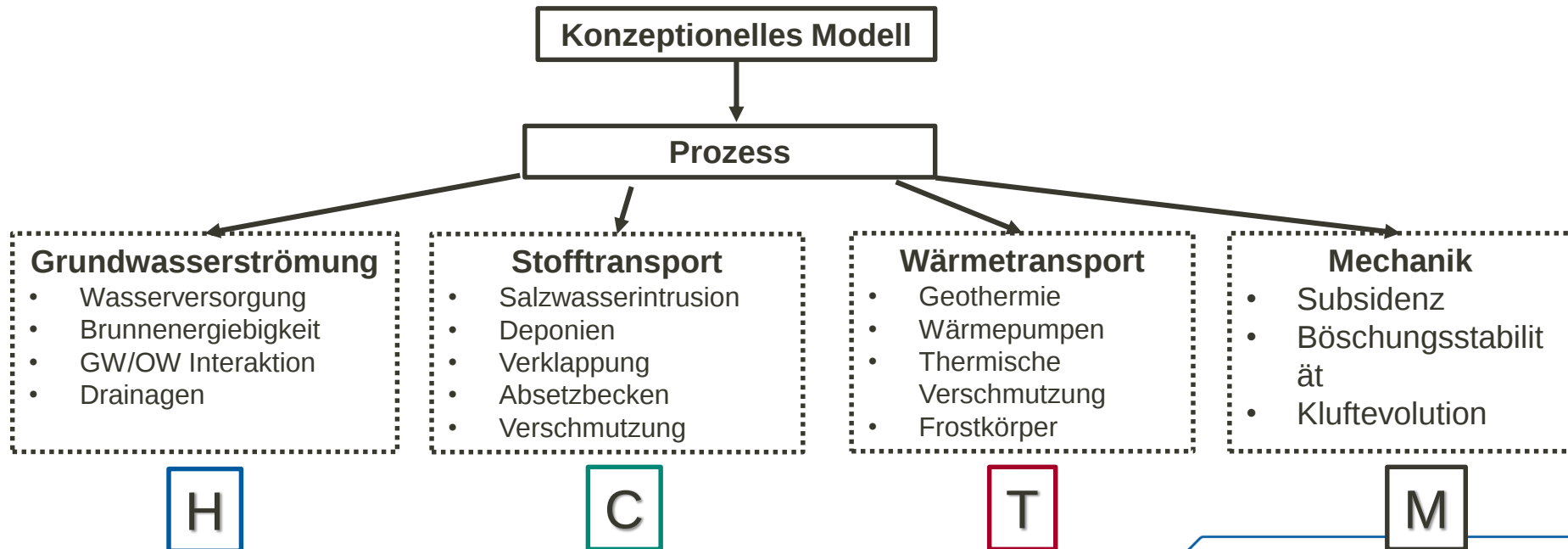


Modelauswahl: Dimensionen



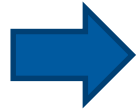
Modellauswahl: Prozesse I

- 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

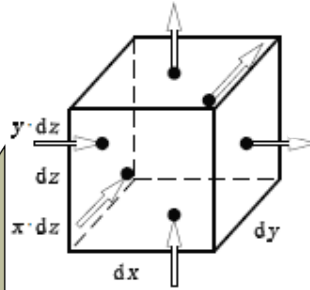
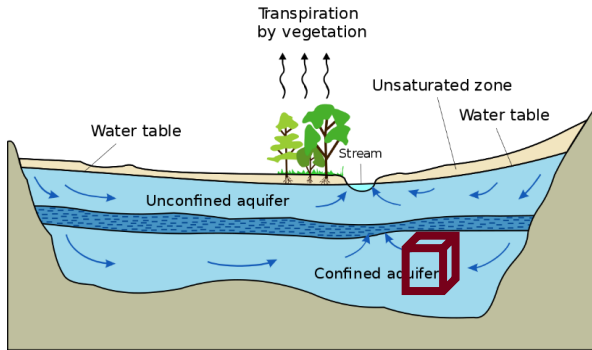
Modelauswahl: Prozesse III

- 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

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

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



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

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



Taylor Reihe

Massenbilanz in einem Kontrollvolumen

- mathematischen Ausdruck für die zeitliche Änderung der Masse im Volumenelement

$$\frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} dxdydz = \left(\phi\rho_f u - \left(\phi\rho_f u + \frac{\partial(\phi\rho_f u)}{\partial x} dx \right) \right) dydz + \\ \left(\phi\rho_f v - \left(\phi\rho_f v + \frac{\partial(\phi\rho_f v)}{\partial y} dy \right) \right) dxdz + \\ \left(\phi\rho_f w - \left(\phi\rho_f w + \frac{\partial(\phi\rho_f w)}{\partial z} dz \right) \right) dxdy$$

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

Potentialbasierte Grundwasserströmungsgleichung

Pascalsches Gesetz

$$H = \frac{p}{\rho_f g} + z$$

Definition hydraulische Leitfähigkeit

$$K = \frac{\kappa g \rho_f}{\mu}$$

Druckabhängigkeit von Dichte und Porosität

$$\frac{\partial(\phi \rho_f)}{\partial t} = (\rho_f((1 - \phi)\beta_m + \phi\beta_f)) \frac{\partial p}{\partial t}$$

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

Darcy Gesetz

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

Definition Spezifischer Speicherkoeffizient

$$S_S = ((1 - \phi)\beta_m + \phi\beta_f) g \rho_f$$

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

Potentialbasierte Gleichung für Fluidströmung durch ein anisotropes gesättigtes poröses Medium

Speicherkoeffizient

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

- 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 $\rightarrow S_{\text{ungespannt}} \gg S_{\text{gespannt}}$

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

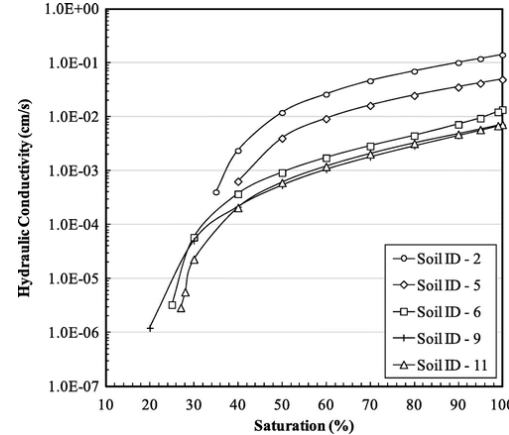
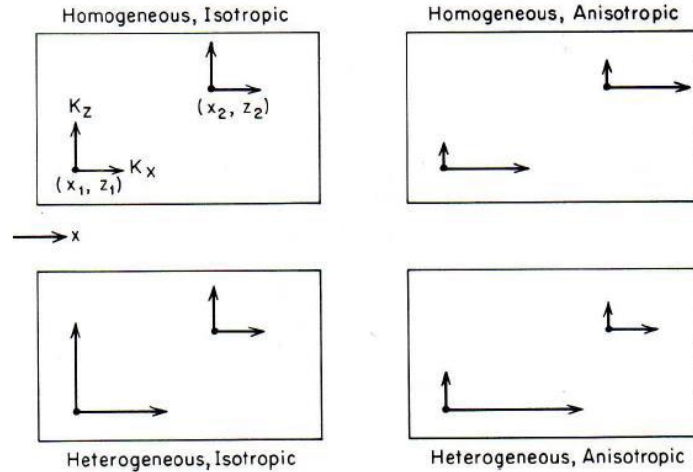
ungespannt

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 ⁻⁵
Coarse gravel, moderately fissured rock	10 ⁻¹⁰	1.63x10 ⁻⁶
Unfissured rock	10 ⁻¹¹	7.46x10 ⁻⁷

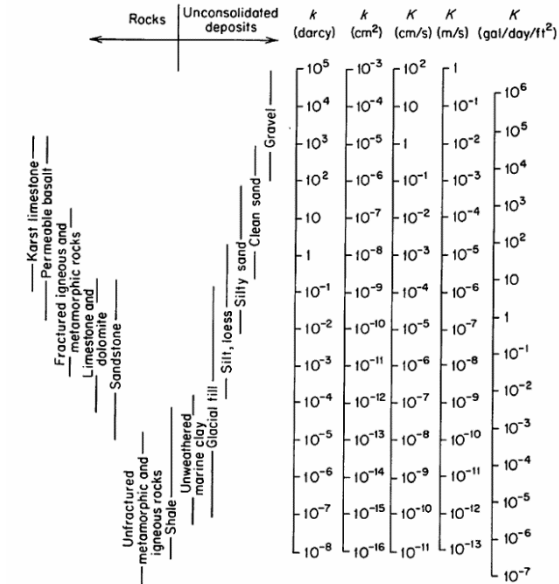
gespannt

Hydraulische Leitfähigkeit



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

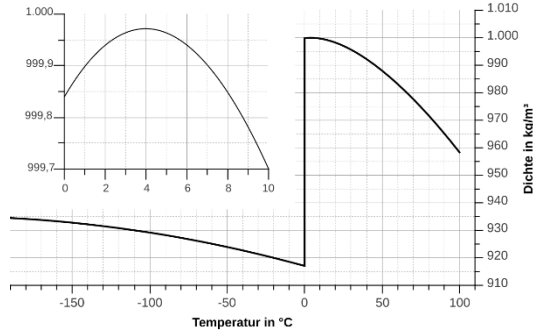
$$S_s \frac{\partial H}{\partial t} - K \Delta H - Q_v = 0$$



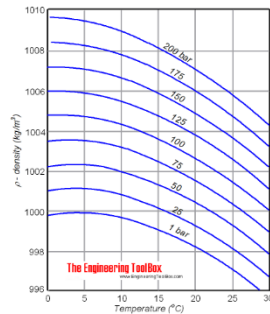
<https://tinyurl.com/k4pz8m86>

Diskussion der Koeffizienten

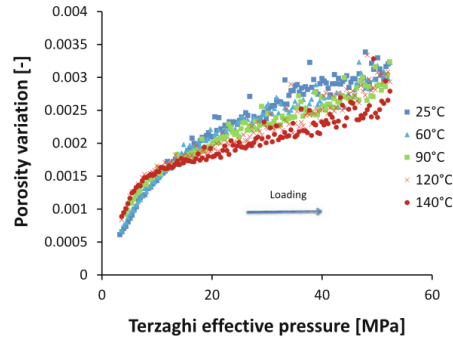
Dichte von Eis und Wasser



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 (Espevoid, 2015; Pettersen, 2006)	$\phi = \phi_0 e^{\beta_m (P - P_0)}$	$\beta'_m = \phi^{-1} (d\phi / dP)$
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}

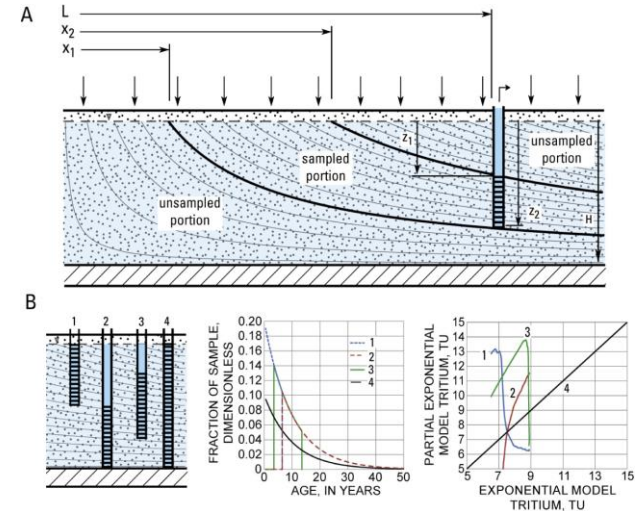
Analytische Lösungen

- 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

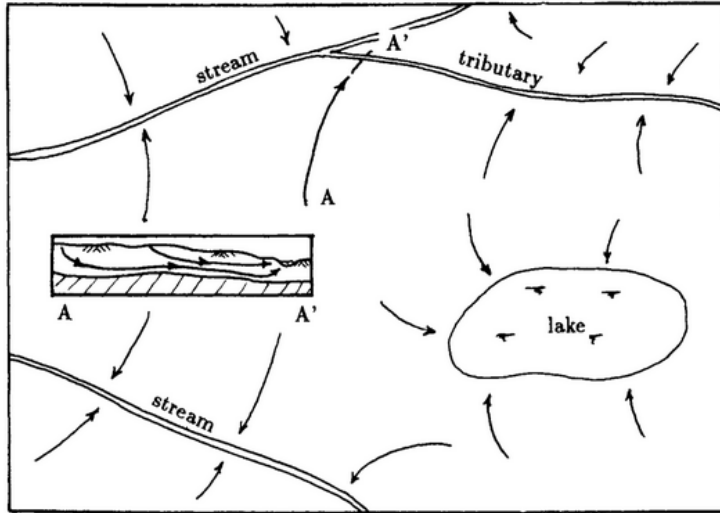
Analytische Modelle und Numerische Modelle

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

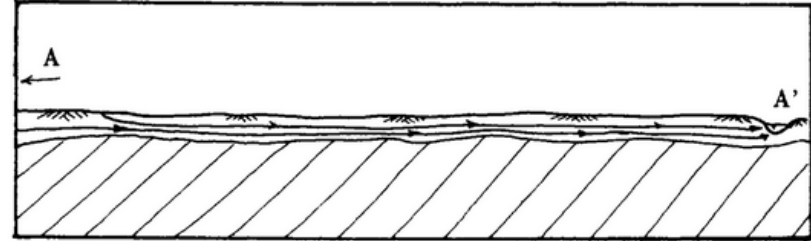


Analytische Lösungsverfahren mit komplexen Geometrien und Randbedingungen sind möglich für lineare Systeme → Analytic Element Method

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 ($\partial h / \partial z = 0$, $\partial K / \partial z = 0$)

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

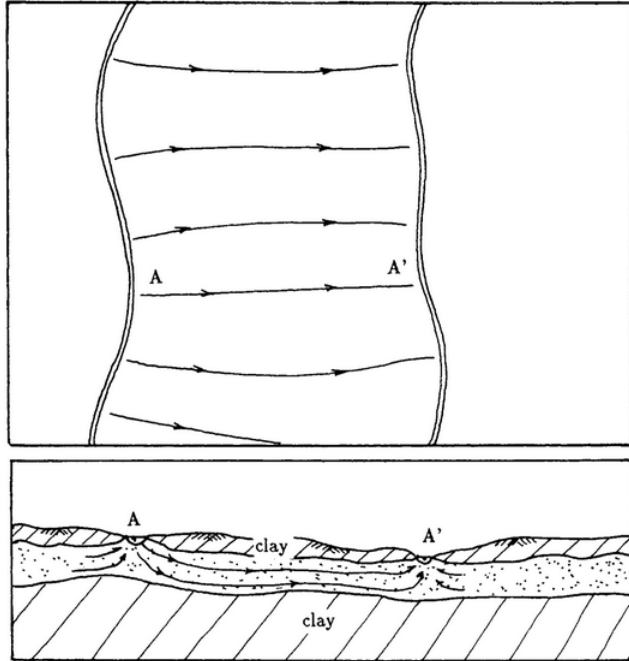
Gespannt, linear

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

Ungespannt, nichtlinear

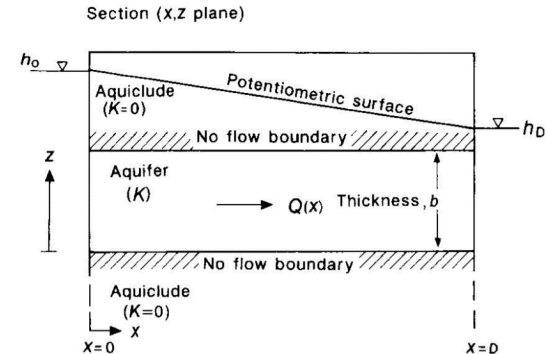
- Das Produkt aus Hydraulischer Leitfähigkeit (K) und Aquifermächtigkeit (M) wird auch als Transmissivität (T) bezeichnet
- Beachten Sie, S, ist der Speicherkoeffizient und S_y der „specific yield“, ~ effektive Porosität

Einfache Lösungen: 1D Problem

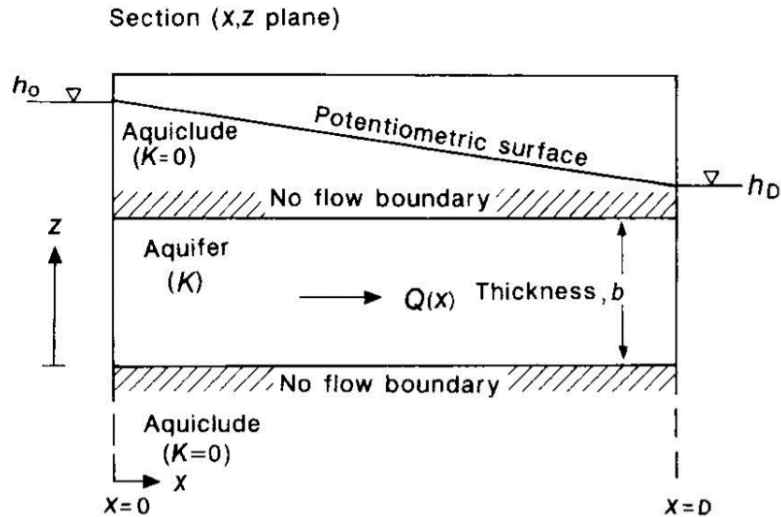


Hajtema et al, 2006

- 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



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

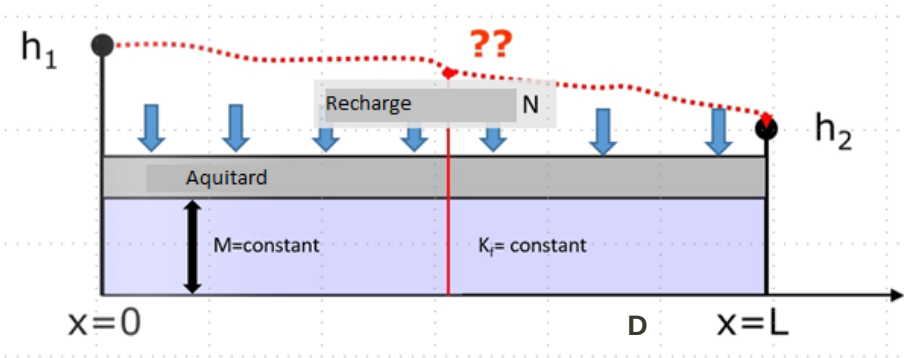


$$h(x) = \frac{h_D - h_0}{D} x + h_0$$

- 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



$$h(x=0) = h_1$$

$$h(x=L) = h_2$$

- Gespannter Aquifer mit Grundwasserneubildung
- Annahme: Die teilgesättigte Zone ist klein und hat eine geringe hydraulische Leitfähigkeit → vernachlässigbar.

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



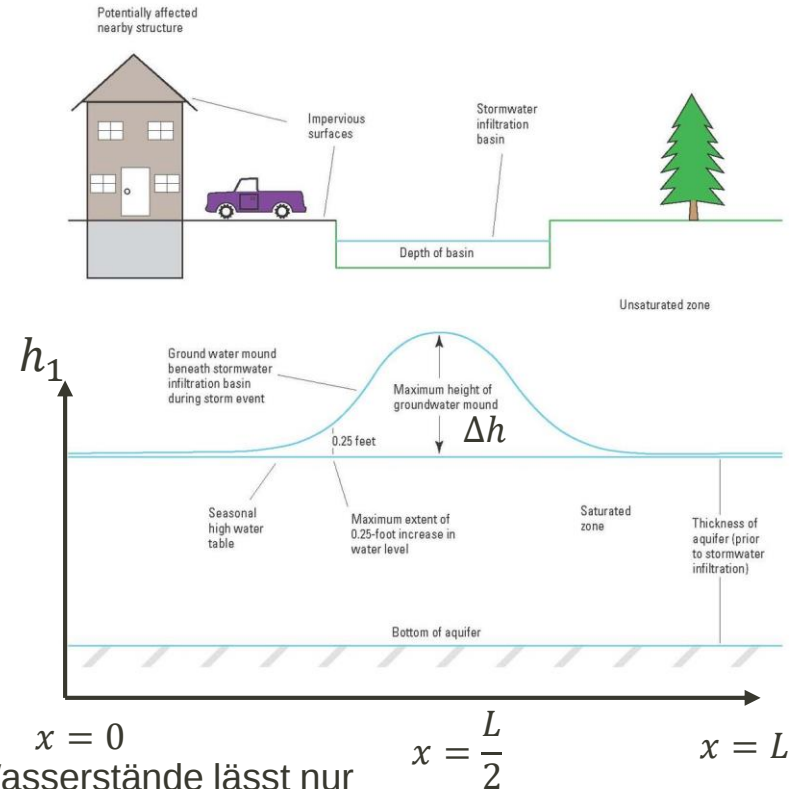
$$h(x) = \frac{N}{2KM} x(L-x) + \frac{h_2 - h_1}{L} x + h_1$$

Einfache Lösung: Grundwasseraufstauung

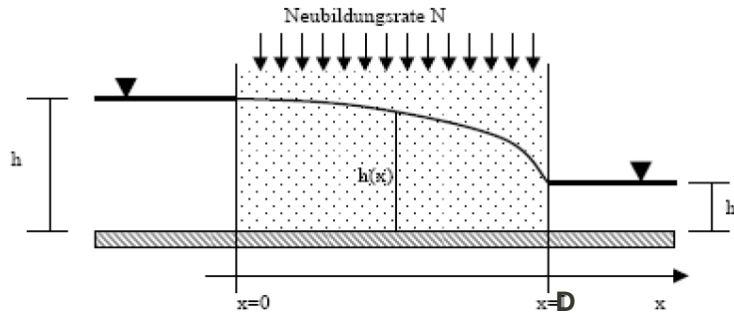
- Grundwasseraufstauungen treten unter Regenwasserbewirtschaftungsanlagen auf, die zur Versickerung von Regenwasserabflüssen dienen
- Regionale hydraulische Gradienten werden vernachlässigt $h_1 = h_2$
- Die Zunahme der Mächtigkeit des Grundwasserleiters durch die Aufstauung ist im Vergleich zur Gesamtmächtigkeit vernachlässigbar $\Delta h \ll M$
- Die Aufstauung ist in der Mitte des Gebiets am höchsten

$$\Delta h = h\left(x = \frac{L}{2}\right) - h_0 = \frac{1}{8} \frac{N}{KM} L^2$$

Erkenntnisse für die Modellierung: Die Kalibrierung auf Wasserstände lässt nur Rückschlüsse auf das Verhältnis von Neubildung und Durchlässigkeit zu.



Einfache Lösungen, Beispiel



$$\begin{aligned} h(x=0) &= h_0 \\ h(x=L) &= h_L \end{aligned}$$

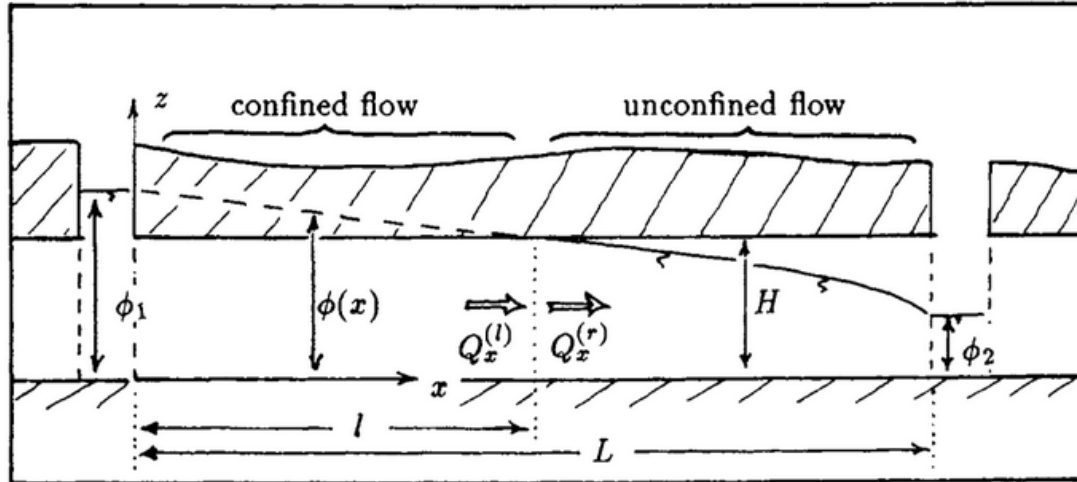
- Ungespannter Aquifer mit Grundwasserneubildung
- Annahmen: Die teilgesättigte Zone ist dünn und hat eine geringe Leitfähigkeit → Vernachlässigbar

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



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

Einfache Lösungen, Beispiele

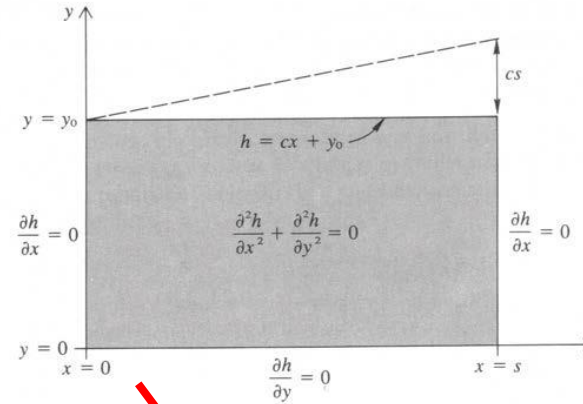
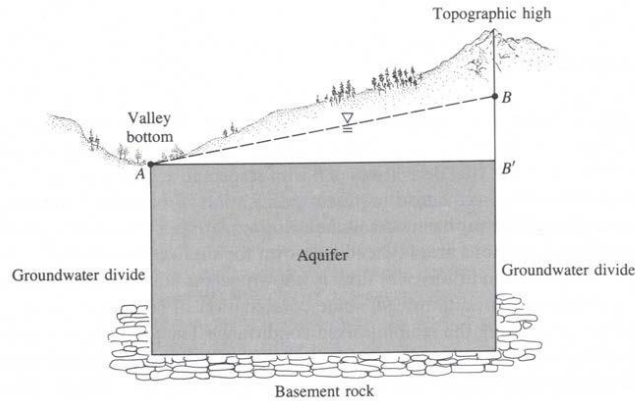


- Mischform:
- Lösung über Massenbilanz am Übergang gespannt/ungespannt

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

Einfache Lösungen, Beispiel

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

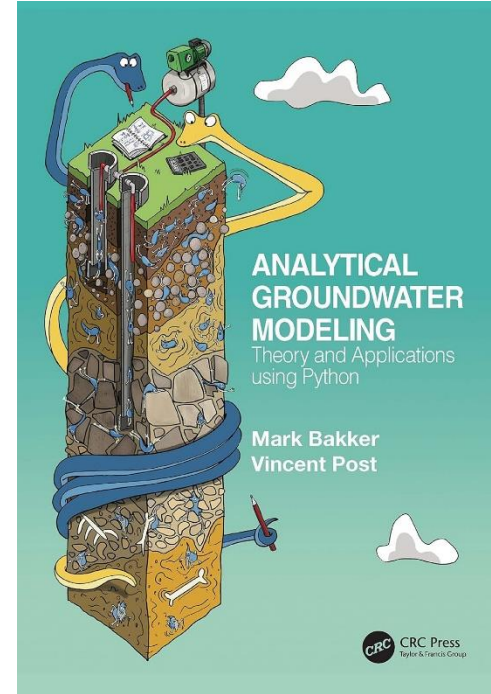


$$S_y \frac{\delta H}{\delta t} - \text{div}[KH \text{grad } H] - Q_V = 0$$

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

Analytische Lösungen mit Python

- Komplexe analytische Lösungen erfordern Computerprogramme.
- Die Umsetzung in Open-Source-Interpreter-Sprachen wie Python macht den Arbeitsablauf transparenter und anpassungsfähiger als die Bereitstellung einer kompilierten ausführbaren Datei.
- Eine gute Sammlung von analytischen 1D und 2D Lösungen für Strömung in porösen Medien ist publiziert von Bakker und Post (2022)



„ Regionale Grundwassersysteme“

Veranstaltung im Modul Modellierung von Hydrosystemen

- Teil 2: Parametrisierung und Randbedingungen

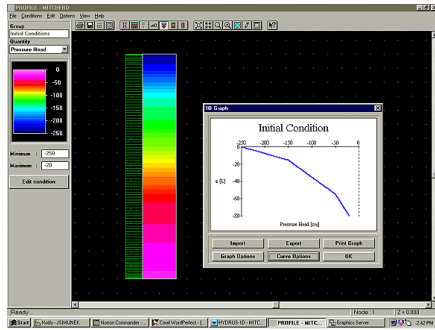
Prof. Dr. Olaf Kolditz
Dr. Erik Nixdorf

04.07.2025

Regionale Grundwassersysteme -Aufbau

- 3 Teile, 2mal Vorlesung und 1mal Übung, Ende gegen 18:10
 - a. V1: Grundwasserströmungsgleichung
 - I. Herleitung der Grundwassergleichung in der Potentialform
 - II. Diskussion der Parameter des Grundwasserleiters
 - III. Analytische Lösungen
 - b. V2: Parametrisierung und Randbedingungen
 - I. Räumlich-zeitliche Dimensionalität und Diskretisierung
 - II. Randbedingungen und Quellterme
 - c. Übung mit OpenGeoSys und ParaView
 - I. Analytische Lösungen vs. OpenGeoSys
-

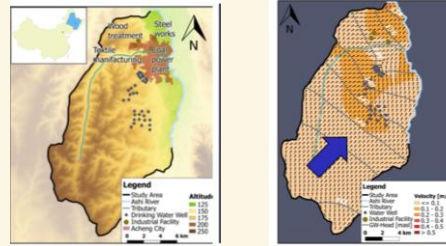
Ein-Dimensionale Modelle



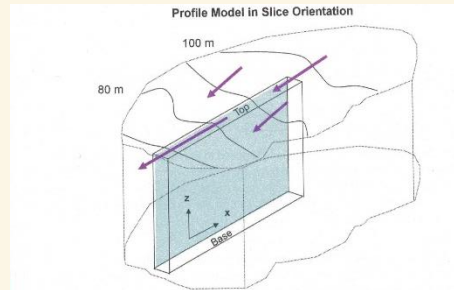
- Beispiel: Berechnung der transienten Perkolation in einem Bodenprofil

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right) - S$$

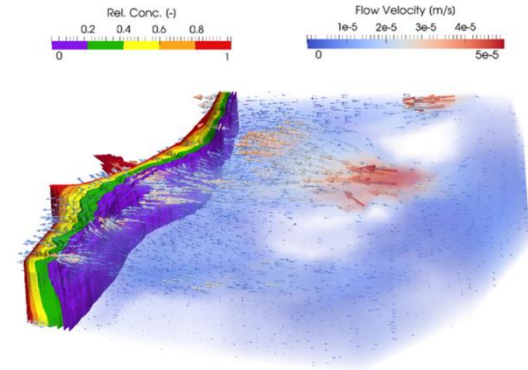
- Zwei-Dimensionale Modelle
- Planare Modelle (x-y-Modell)



- Profilmodelle (x-z-Modell)



- Drei-Dimensionale Modelle



2D-Planare Modelle – Vorteile und Grenzen

- Planare Modelle sind ausschließlich über Randbedingungen an den Seiten definiert
- Austausch mit anderen Aquiferen kann über Leakage-Terme berechnet werden
- $q_L = -K_z \frac{\hat{H} - H}{b}$
- 3D wirksame Hydraulische Elemente (an Modellrändern, homogener Aquifer) befinden sich im Mindestabstand d (Haitjema 2006, p.788):
 - $d > 5b \sqrt{\frac{K_h}{K_v}}$; b = Aquifermächtigkeit
- Abweichungen gegenüber 3D Modellen korrelieren mit der Stärke des Gradient der Grundwasserspiegellage

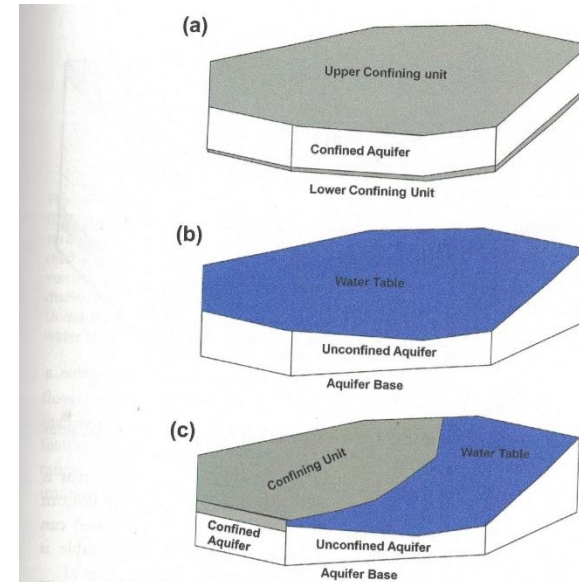
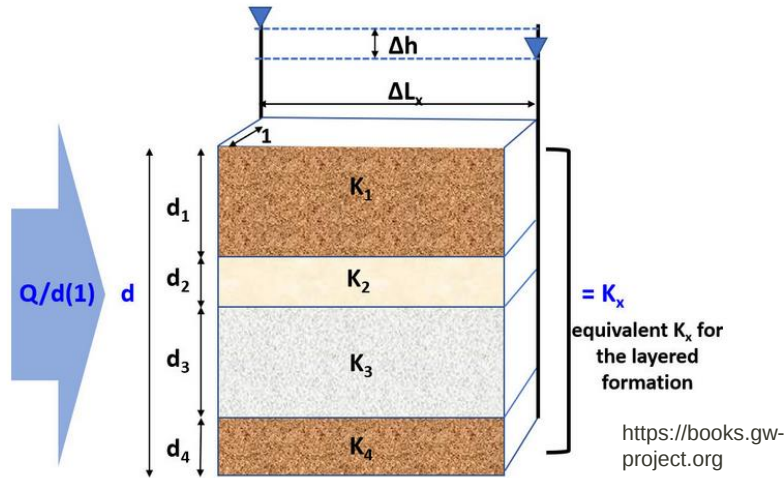


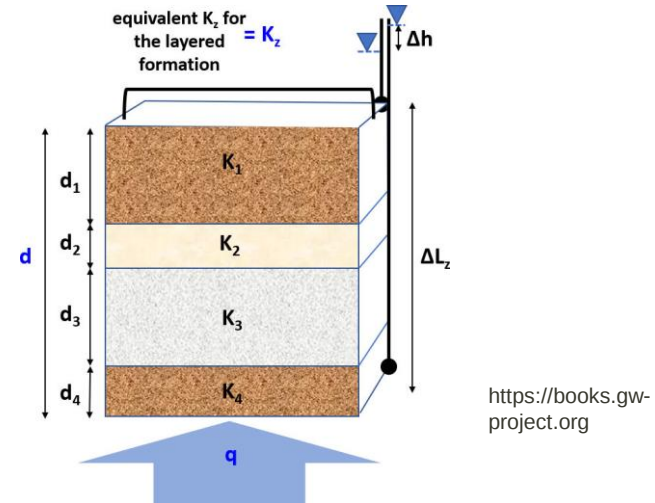
Figure 4.1 Schematic representation of two-dimensional (2D) areal models. (a) Confined aquifer bounded by an upper and lower confining bed. The upper confining bed may be overlain by an unconfined aquifer (see Fig. 4.2), which provides a source of water to the confined aquifer via leakage through the confining bed. Heads represent the potentiometric surface defined by the elevation of water levels in wells penetrating the confined aquifer (see Fig. 4.2). (b) Head in an unconfined aquifer is equal to the elevation of the water table, h , above the base of the aquifer (see Figs. 4.2 and 4.3). The thickness of the model layer is equal to h and varies spatially. (c) A 2D areal model may simulate both confined and unconfined conditions within the same model layer.

2D-Planare Modelle : Berechnung von äquivalenten hydraulischen Eigenschaften

- Das Zusammenfassen von hydrostratigraphischen Schichten für die Simulation eines 2D planaren Modells führt zu richtungsabhängigen hydraulischen Parametern zur äquivalenten Repräsentation des Strömungssystems



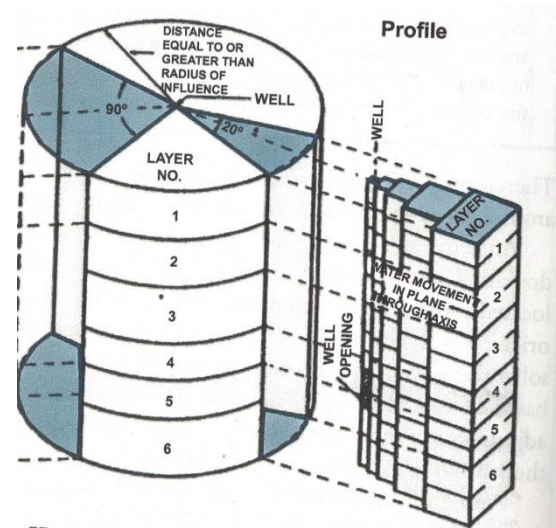
$$K_h = \frac{K_1 d_1 + K_2 d_2 + \dots + K_n d_n}{d_1 + d_2 + \dots + d_n}$$



$$K_v = \frac{d_1 + d_2 + \dots + d_n}{\frac{d_1}{K_1} + \frac{d_2}{K_2} + \dots + \frac{d_n}{K_n}}$$

2D Profilmodelle

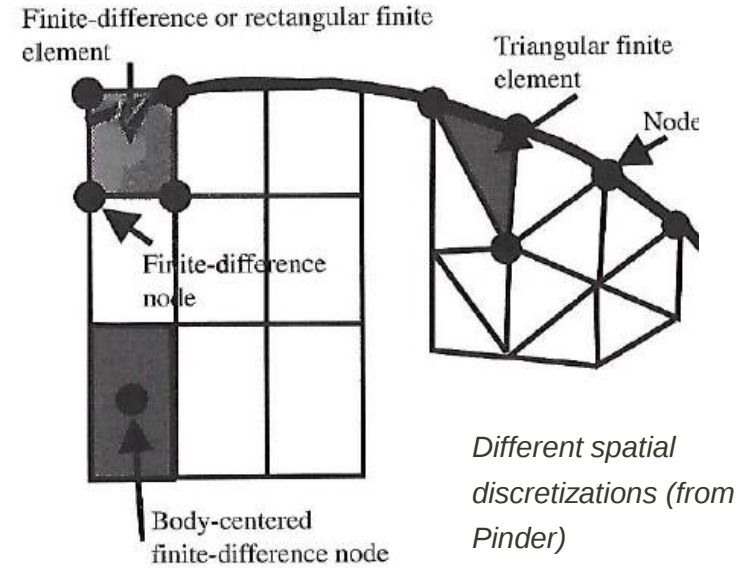
- Profilmodelle repräsentieren einen Schnitt durch das 3D Aquifersystem (x-z Modelle)
- Profilmodelle nehmen an, dass es keine Fließkomponenten senkrecht zum Profil gibt
- Profilmodelle können vertikale Gradienten und Fließpfade darstellen
- Achsensymmetrische Profilmodelle können für Radialströmung (z.B. Pumpversuch) genutzt werden
- Nutzung von Profilmodellen vor allem für lokale Strömungsprobleme und nicht für Regionalmodelle



Achsensymmetrisches Modell für Simulation eines Pumpversuchs

Netzgenerierung: Motivation

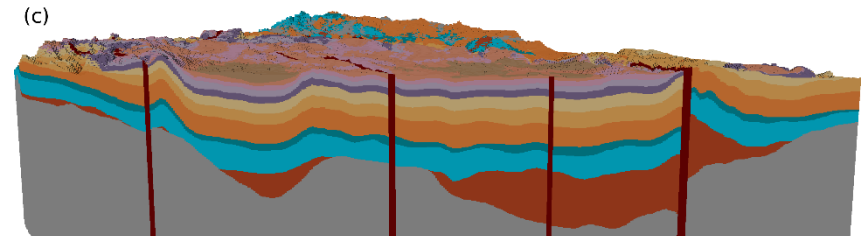
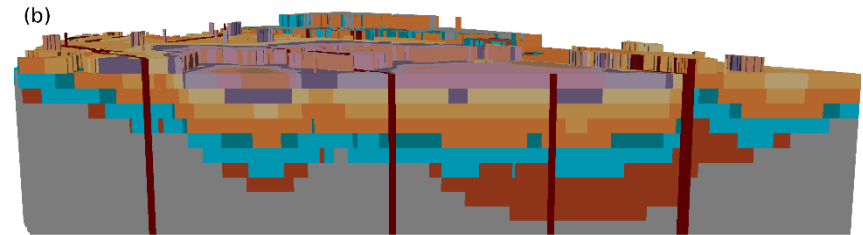
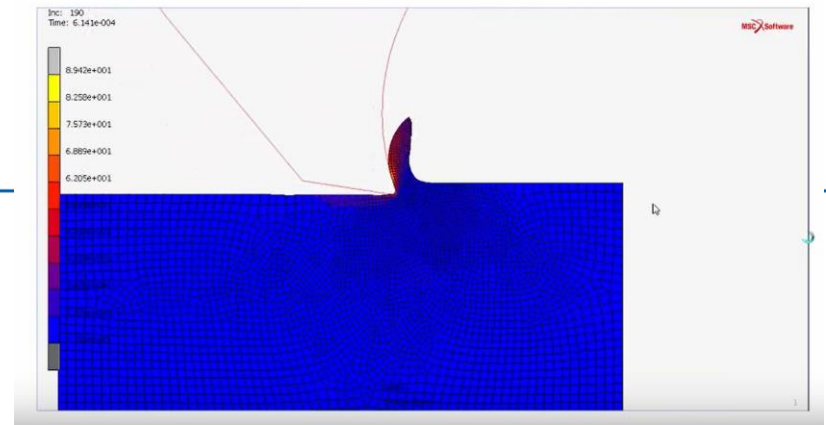
- Numerische Modelle sind nicht kontinuierlich in Raum und Zeit, sondern erfordern eine räumliche und zeitliche Diskretisierung -> Netzgenerierung
- Die zugrunde liegenden partiellen Differentialgleichungen müssen in diskrete Gleichungen überführt werden



$$\operatorname{div}[T \operatorname{grad} H] = S \frac{\partial H}{\partial t} \quad \xrightarrow{\text{Näherung}} \quad H_i^{n+1} = H_i^n + \frac{T \Delta t}{S \Delta x^2} (H_{i+1}^n - 2H_i^n + H_{i-1}^n)$$

Räumliche Diskretisierung: Vernetzung

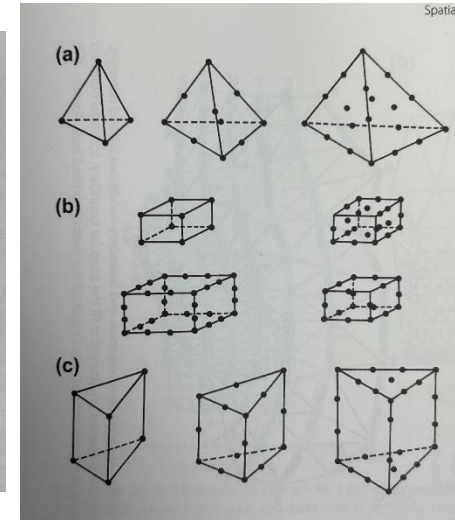
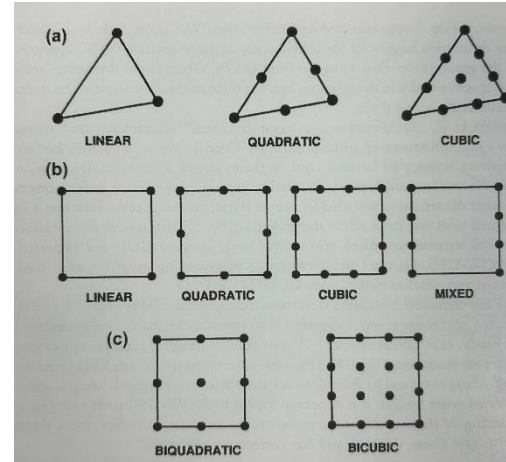
- Die Knoten und Elemente bilden das rechnerische Gerüst eines numerischen Modells:
 - Beeinflussen die Genauigkeit der Lösung
 - Beeinflussen die Rechenzeit
 - Beeinflussen die Menge der erzeugten Ausgabedaten
- Obwohl es Methoden für statisches und dynamisches Neuvernetzung gibt (z. B. das Konzept (in z-Richtung) beweglicher Knoten in FEFLOW), wird meist dasselbe Netz für alle Projektphasen verwendet.
- Die Gestaltung eines Netzes, dass den Simulationsanforderungen entspricht, ist entscheidend – und die Netzgenerierung erfordert Zeit!



Fischer, T., Naumov, D., Sattler, S., Kolditz, O., Walther, M., 2015.

Vernetzung: Design-regeln

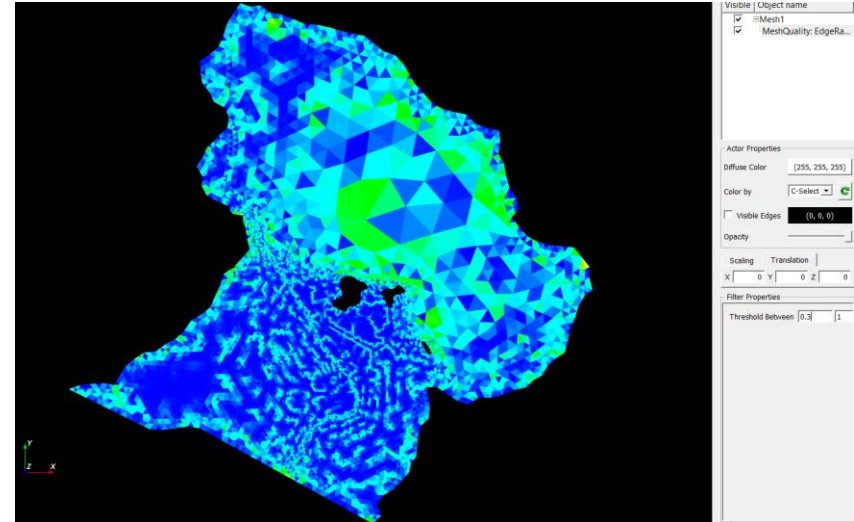
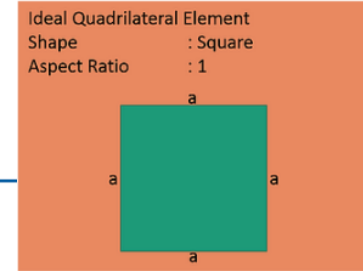
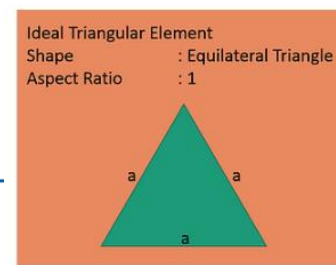
1. Das Gitter sollte den Modellbereich möglichst genau abbilden, ohne grundlegende Abweichungen von der Realität zu verursachen.
2. Wenn sich hydraulische Eigenschaften oder abhängige Variablen über kurze Distanzen stark verändern, müssen die Elemente des Modells klein genug sein, um diese Gradienten angemessen darzustellen.
3. Eine Erhöhung der Elementanzahl führt in der Regel zu einem nicht-linearen Anstieg der Rechenzeit in mehreren Teilen des Simulationsprozesses.
4. Ein Kompromiss zwischen (2) und (3) ist erforderlich → ggf. iterativer Prozess



2D and 3D Finite Elements (Anderson et al, 2015)

Vernetzung: Netzqualität

- FEM-Elemente werden verzerrt, wenn komplexe geometrische Formen abgebildet werden sollen.
- Jedes Element ist so konzipiert, dass es nur innerhalb eines bestimmten Bereichs von Formverzerrungen zuverlässig funktioniert.
- Die ideale Form eines 2D-Dreieckselements ist ein gleichseitiges Dreieck oder ein Quadrat.
- Die Qualität eines Gitters kann anhand verschiedener Parameter bewertet werden, z. B. *Aspektverhältnis*, *Schiefheit*, *Warping* etc.
- Aspektverhältnisse von $\ll 1$ oder $\gg 5$ wirken sich negativ auf die Konvergenz der Finite-Elemente-Lösungen aus.



Seitenverhältnis der Dreieckselemente

Vernetzung 3D Netze

Verbesserte Darstellung der Hydrostratigrafie

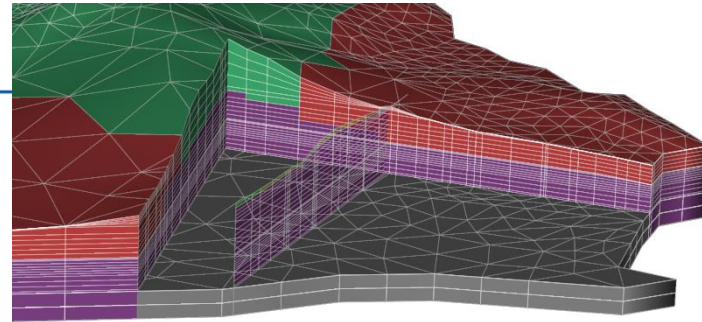
- In 3D-Simulationen entspricht jede Schicht einer stratigrafischen Einheit.
- Die Verwendung mehrerer Schichten pro stratigrafischer Einheit erhöht die numerische Stabilität – v.a. bei geringer Leitfähigkeit.

Anpassung an vertikale Gradienten

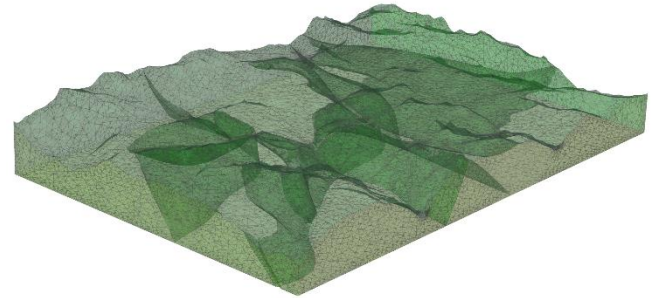
- Die Berücksichtigung von Anisotropie in der hydraulischen Leitfähigkeit erlaubt größere vertikale Abstände, da die stärksten Gradienten meist horizontal verlaufen.
- Die vertikale Auflösung kann entsprechend ohne numerische Verluste von der horizontalen Auflösung abweichen

Unstrukturiertes Gitter für höhere Präzision

- Ein vollständig unstrukturiertes Gitter besteht aus Tetraedern und bietet hohe Flexibilität und Genauigkeit bei der Modellierung komplexer geologischer Strukturen.



Quelle: FEFLOW



$$\Delta z_{adjusted} = \Delta z \sqrt{\frac{K_h}{K_v}}$$

Vernetzung: Netzgeneratoren

This is a list of [public domain](#) and [commercial](#) mesh generators (click here for [other sources of interest](#)). I have listened only programs for which online information exists. There is also a [section](#) on papers that review mesh generators.

If you are interested in special programs, the following links might guide you directly to interesting places:

- Triangular: [Tri>](#)
- Quadrilateral: [Qua>](#)
- Tetrahedral: [Tet>](#)
- Unstructured hexahedral: [Hex>](#)
- 2D structured: [2str>](#)
- 3D structured: [3str>](#)
- Surface meshes: [Sur>](#)
- A list of **public domain, downloadable and university codes**:
 - [ADMESH \(Anthony D. Martin\)](#): A program for processing triangulated solid meshes in STL format. [Tri>](#) [Sur>](#)
 - [ANGENER \(Vit Dolejsi\)](#): 2D triangulation using anisotropic mesh adaptation. [Tri>](#)
 - [AUTOMESH2D \(Shandong University\)](#): a fully automatic adaptive quad mesh generator, especially suited for metal forming simulation. [Qua>](#)
 - [CAMINO \(Tao Chen\)](#): 3D/2D meshing program using a generalized octree/quadtree approach. [Tri>](#) [Tet>](#)
 - [Cart3D \(Michael J. Aftosmis\)](#): Pre-processing tools and mesh generator "cubes" for cartesian mesh generation. [Sur>](#) [Hex>](#)
 - [CGAL mesh generation \(CGAL\)](#): Various packages for triangle and tetrahedral mesh generation. Distributed under a dual license. [Tri>](#) [Sur>](#) [Tet>](#)
 - [CGM \(Tim Tautges\)](#): a code library which provides geometry functionality used for mesh generation and other applications.
 - [Chimera Grid Tools \(William M. Chan\)](#): A software package containing a variety of tools for the Chimera overset grid approach for solving complex configuration problems. [3str>](#)
 - [COG 2.0 \(Ilja Schmelzer\)](#): A grid generation package for 2D and 3D grid generation. An essential part is public domain. It's aim is to create Delaunay grids with few nodes for complex geometries. [Tri>](#) [Tet>](#)
 - [COMesh \(Marcelo Simoes\)](#): A C++ program for generating convex quadrilateral meshes of arbitrary

- 93 Open-Source-Programme und 60 kommerzielle Meshing-Softwares sind in einer Liste aufgeführt (<http://www.robertschneiders.de/meshgeneration/software.html>)
- Übersichtsarbeit mit über 70 Einträgen: [<http://ima.udg.edu/~sellares/ComGeo/OwenSurv.pdf>]
- Wähle entsprechend deiner Anforderungen!

Randbedingungen

- Die Numerische Lösung partieller Differentialgleichung über einen Raum Ω benötigt Informationen über die Statusvariablen (abhängigen Variablen) für bestimmte Teilgebiete: **Rand und Initialbedingungen**
- Randbedingung: Geometrie der Randbedingung + Art der Randbedingung + Werte der abhängigen Variable oder ihrer Ableitungen**

Name	Mathematischer Name	Mathematischer Ausdruck
Constant Head	Dirichlet	$h(x) = f(x), x \in \partial\Omega_D$
Specific Flux	Neumann	$\frac{\partial h(x)}{\partial n} = \frac{\partial h(x)}{\partial n} \Big _0 = g(x), x \in \partial\Omega_N$
Head-dependent Flux	Robin/Cauchy	$\alpha h(x) + \beta \frac{\partial h(x)}{\partial n} = C(x), x \in \partial\Omega_R$

Randbedingungen: Geometry

- Für jedes Teilsegment des Randes **muss** eine Randbedingung definiert sein

$$\partial\Omega = \partial\Omega_D + \partial\Omega_N + \partial\Omega_R$$

- Ränder für die keine Teilrandbedingung explizit definiert wurden ist eine „No-Flow“ Randbedingung

$$\frac{\partial h(x)}{\partial n} = 0$$

- Mehrere Randbedingungen auf einer Geometrie sind grundsätzlich möglich
- Randgeometrien $\partial\Omega_n$ sind eine Dimension niedriger als das Modellgebiet
- Dirichletrandbedingungen (u.U. auch Neumann/Robin) können zusätzlich auch für „innere Ränder“ definiert werden

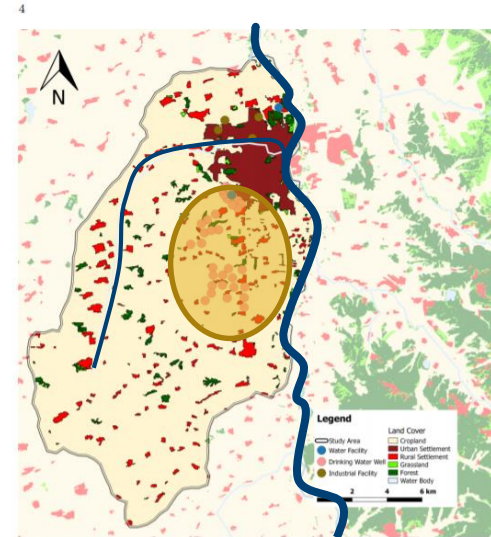


Fig. 1.2: Land use at the study site

Randbedingungen: Zuordnung zu Physischen Elementen

▪ Physische Randbedingung

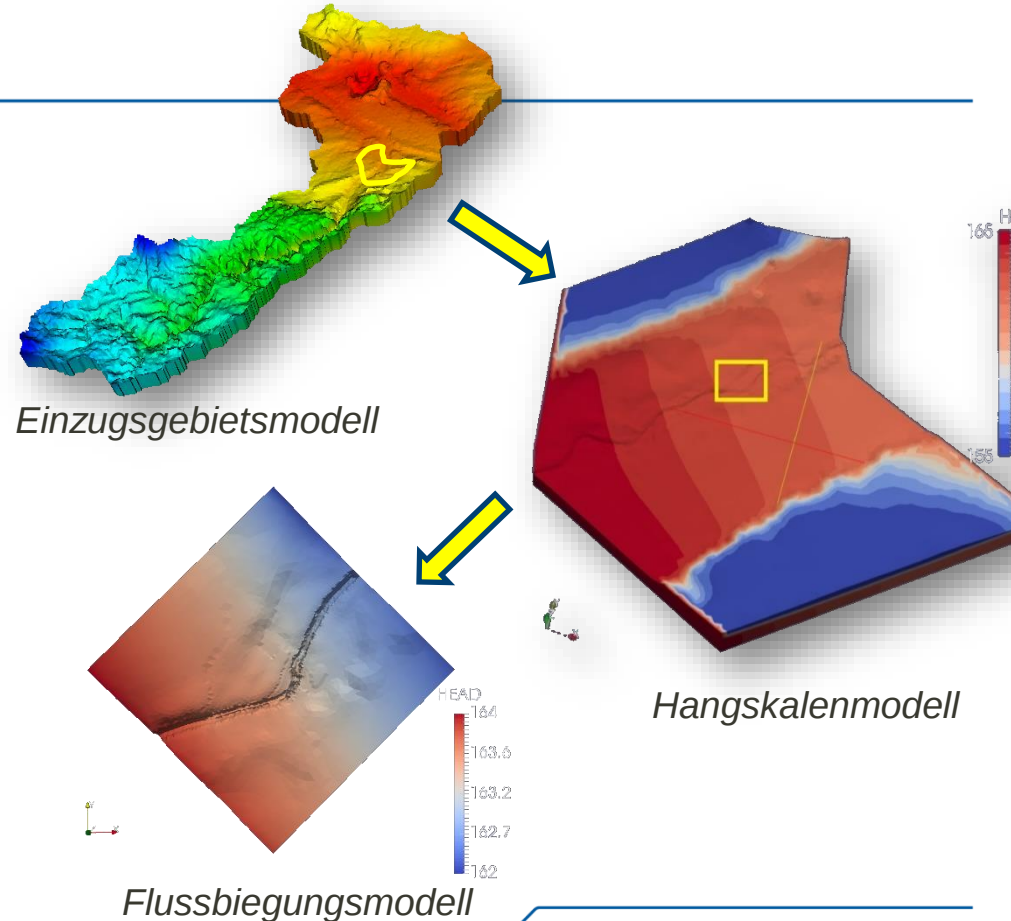
- Leicht identifizierbare physische Elemente im Grundwassersystem:
 - **Undurchlässiges Gestein:** Der Boden oder das Gestein an den Modellrändern als undurchlässig betrachtet wird
 - **Oberflächengewässer:** Wenn das Grundwassermodell mit dem Oberflächengewässer gekoppelt ist, können physische Randbedingungen den Ein- und Austritt von Oberflächenwasser in das Modellgebiet beschreiben
 - **Süßwasser-Salzwasser-Grenze:** Bei geringer Dispersion wirkt die Grenzschicht als hydraulische Barriere

▪ Hydraulische Randbedingung

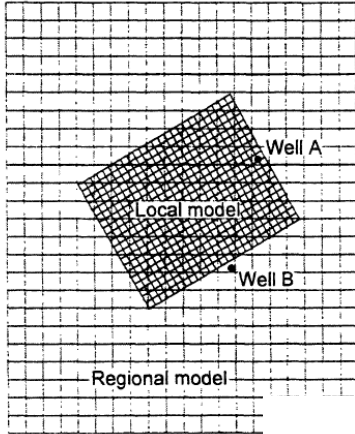
- Informationen aus Strömungsnetzen (Gleichenplänen) oder Messstellen:
 - **Grundwasserscheide:** Die Geometrie von Stromlinien kann als „Nullstrom“ Randbedingung genutzt werden
 - **Vorgegebenes hydraulisches Potential:** Ein bestimmter Wasserspiegel an den Modellrändern, zum Beispiel auf Basis des Gleichenplans
- Insbesondere die Geometrie hydraulischer Randbedingungen ist häufiger zeitveränderlich
- Alternative: **Lokale Randbedingungen aus Regionalmodellen**

Randbedingungen: Übernahme aus Regionalmodellen

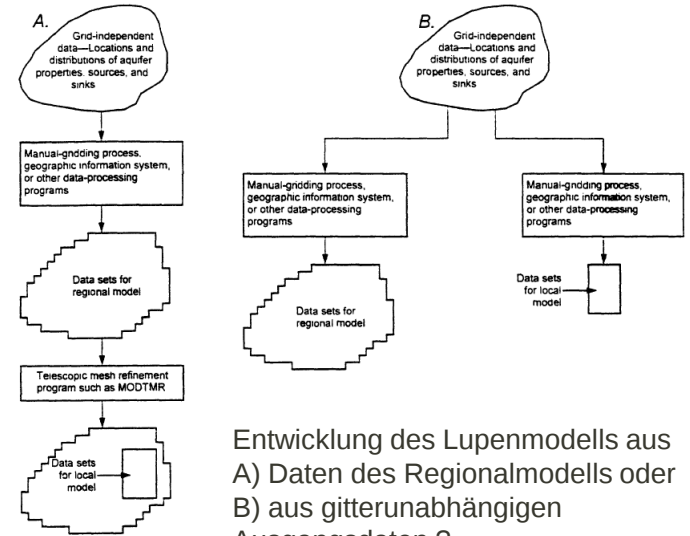
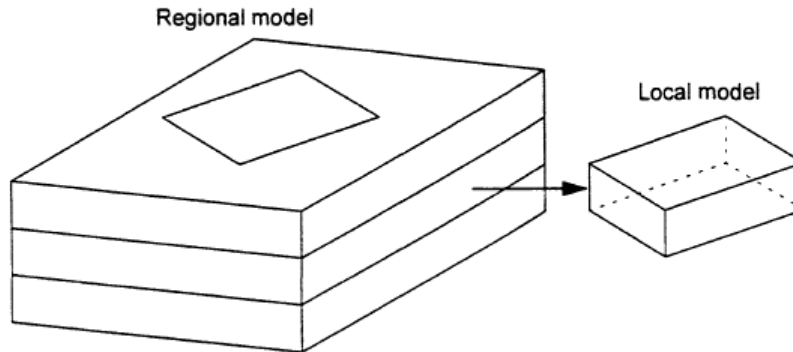
- Geeignete physische Elemente für Randbedingungen befinden sich nicht immer am Modellrand
- Vergrößern des Modellgebietes: Längere Rechenzeiten
- Alternative: Übernahme von Volumenströmen und Hydraulischem Potential aus Regionalmodellen mit oder ohne Rückkopplung
- Ansatz ermöglicht auch Nutzung verschiedener räumlich-zeitlicher Dimensionalität für die jeweiligen Modelle



Hinweise zur Konstruktion von Detailmodell



- Darf das Koordinatensystem der Lupenmodelle vom GWM abweichen?



Entwicklung des Lupenmodells aus
A) Daten des Regionalmodells oder
B) aus gitterunabhängigen
Ausgangsdaten ?

Die Bilanzterme (z.B. GWM) über
gleiche Flächen sollten für beide
Modelle konsistent sein

Darf das Detailmodell sich auf
bestimmte geologische Schichten
beschränken?

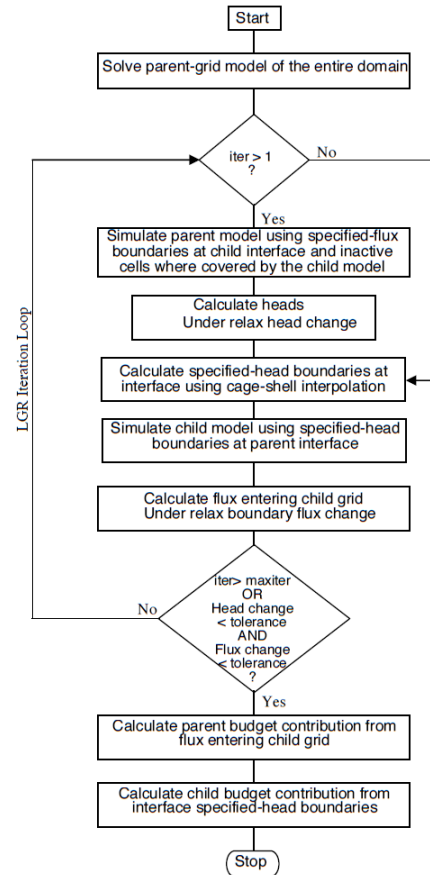
Iterative Modellkopplung : Beispiel MODFLOW

- Einseitige Kopplung (telescopic mesh refinement; TMR) kann Inkonsistenzen bei den Wasserständen und Austauschflüssen an den Schnittstellen zwischen zwei Modellgittern aufweisen.
- Die iterative Kopplung der Bilanzterme (shared node local grid refinement, LGR) bietet eine strengere Kopplung, bei der die Lösungsgenauigkeit durch vom Benutzer definierte Konvergenzkriterien gesteuert wird.
- Bei realistischen Problemen kann dies zu wesentlich genaueren Lösungen führen aber auch einen Anstieg der Rechenzeit bedeuten.
- Die rigorose Kopplung ermöglicht Sensitivitätsanalysen, Parameterschätzungen und Unsicherheitsanalysen, die die Bedingungen in beiden Modellgittern widerspiegeln.

$$\text{head}^{\text{updated}} = \omega \cdot \text{head}^{\text{new}} + (1-\omega) \cdot \text{head}^{\text{old}}$$

$$\text{flux}^{\text{updated}} = \omega \cdot \text{flux}^{\text{new}} + (1-\omega) \cdot \text{flux}^{\text{old}}$$

Relaxation der übergebenen Parameter



Beispiel : Vilhelmsen et al 2011

ground
water

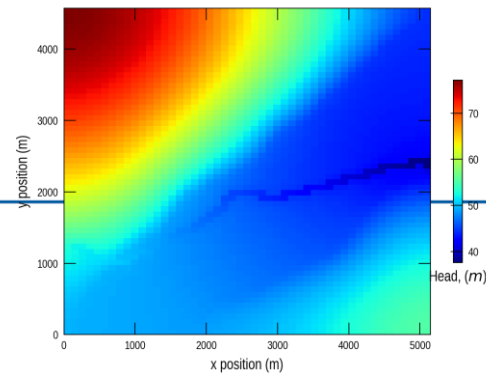
Evaluation of MODFLOW-LGR in Connection with a Synthetic Regional-Scale Model

by Troels N. Vilhelmsen¹, Steen Christensen², and Steffen W. Mehl^{3,4}

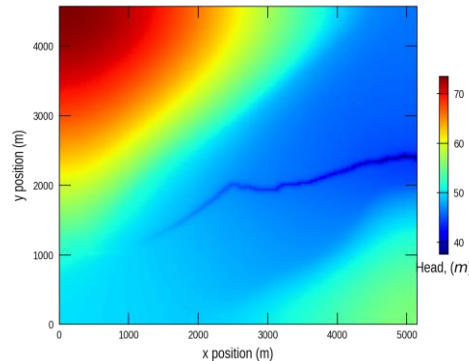
Abstract

This work studies costs and benefits of utilizing local-grid refinement (LGR) as implemented in MODFLOW-LGR to simulate groundwater flow in a buried tunnel valley interacting with a regional aquifer. Two alternative LGR methods were used: the shared-node (SN) method and the ghost-node (GN) method. To conserve flows the SN method requires correction of sources and sinks in cells at the refined/coarse-grid interface. We found that the optimal correction method is case dependent and difficult to identify in practice. However, the results showed little difference and suggest that identifying the optimal method was of minor importance in our case. The GN method does not require corrections at the models' interface, and it uses a simpler head interpolation scheme than the SN method. The simpler scheme is faster but less accurate so that more iterations may be necessary. However, the GN method solved our flow problem more efficiently than the SN method. The MODFLOW-LGR results were compared with the results obtained using a globally coarse (GC) grid. The LGR simulations required one to two orders of magnitude longer run times than the GC model. However, the improvements of the numerical resolution around the buried valley substantially increased the accuracy of simulated heads and flows compared with the GC simulation. Accuracy further increased locally around the valley flanks when improving the geological resolution using the refined grid. Finally, comparing MODFLOW-LGR simulation with a globally refined (GR) grid showed that the refinement proportion of the model should not exceed 10% to 15% in order to secure method efficiency.

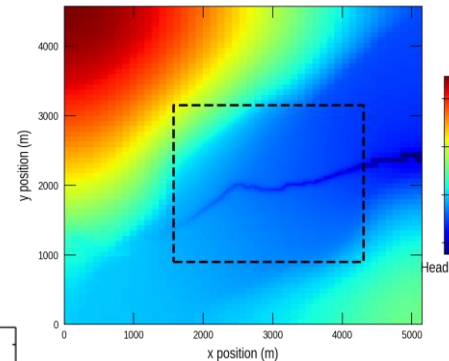
<https://ngwa.onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1111/j.1745-6584.2011.00826.x>



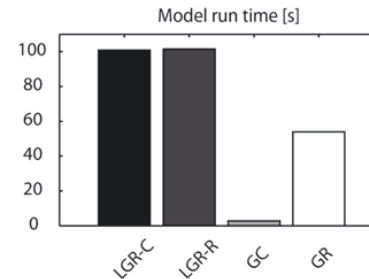
Ausgangsmodell



Global verfeinertes Model



Lokal verfeinertes Model



Wann global verfeinern und wann Lupen nutzen?

Zusammenfassung: Gekoppelte Detailmodelle in MODFLOW (Empfehlung von Vilhelmsen et al, 2011)

■ Gekoppelte Detailmodelle ist **sinnvoll** wenn:

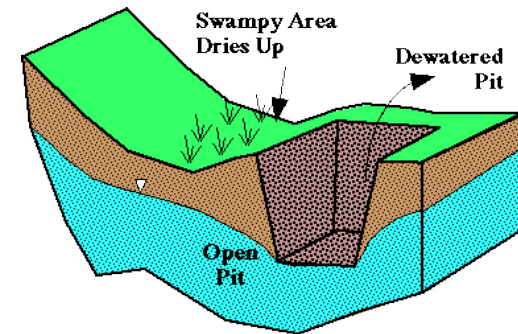
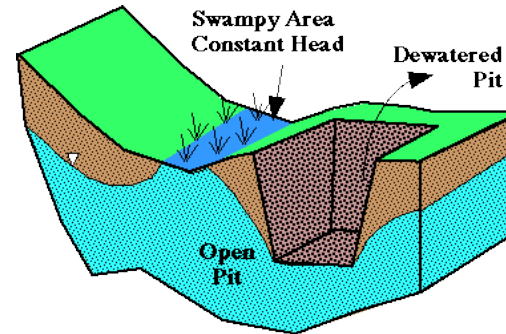
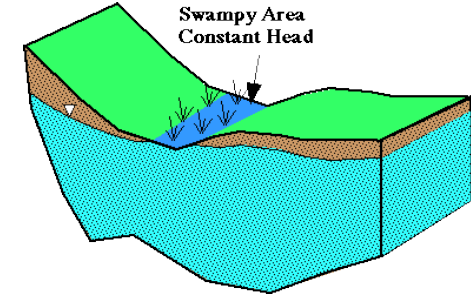
1. Nur ein Teilbereich, der weniger als 10% bis 15% des gesamten Modellbereichs ausmacht, ist von wesentlichem Interesse für die Verfeinerung.
2. Eine erhöhte vertikale und horizontale Auflösung ist in einem oder mehreren Unterbereichen erforderlich, um eine hochauflösende Darstellung lokaler geologischer Merkmale zu erreichen.
3. Mehrere Modelle im lokalen Maßstab werden benötigt, aber nicht unbedingt gleichzeitig ausgeführt. Jedes dieser Modelle sollte einzeln einen ziemlich kleinen Teil des gesamten Modellbereichs umfassen.
4. Lokale Modelle werden von verschiedenen Kooperationspartnern eingerichtet und verwendet, die einen gemeinsamen regionalen Modellbezug benötigen.

■ Globale Verfeinerung ist **sinnvoll**, wenn:

1. Das Gebiet von hauptsächlichem Interesse umfasst mehr als 10% bis 15% des gesamten Modellbereichs.
2. Es gibt erhebliche Unterschiede in der hydraulischen Leitfähigkeit hydrogeologischer Einheiten, die dazu führen können, dass iterative Kopplung divergiert oder zu langsam konvergiert.

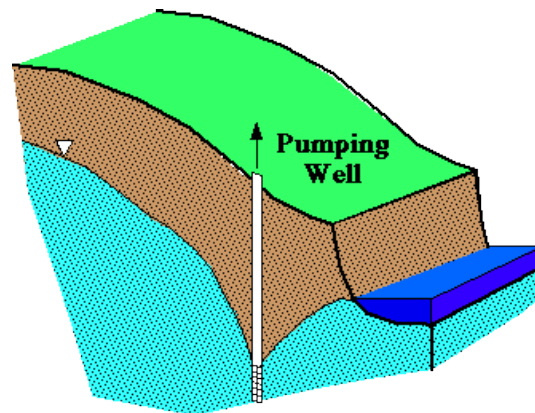
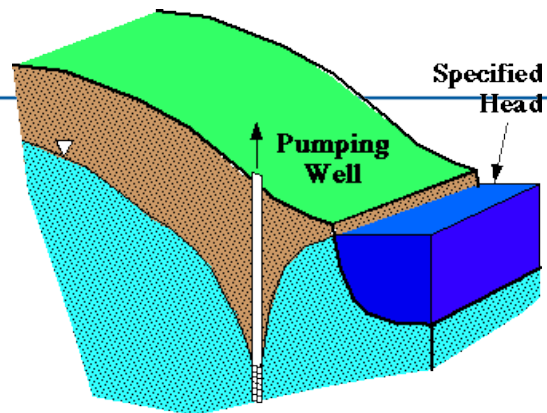
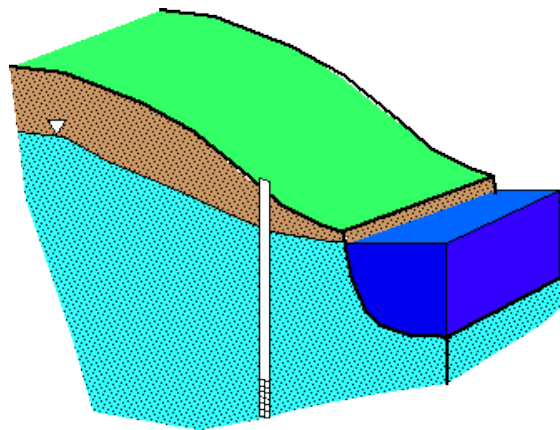
Randbedingungen: Dirichlet

- Dirichlet: $h(x) = f(x), x \in \partial\Omega_D$
- Die Randbedingung kann auch zeitlich dynamisch sein: $h(x, t) = f(x, t), x \in \partial\Omega_D$
- Physische Elemente die über Dirichlet Randbedingungen beschrieben werden könnten
 1. See (Wasserstandshaltung?)
 2. Meer (Gezeiten?)
 3. Wasserstandsgesteuerte Entnahmebrunnen
 4. Wasserreiche Flüsse
- Zeitliche Gültigkeit der Randbedingung?



<https://tinyurl.com/aca263dd>

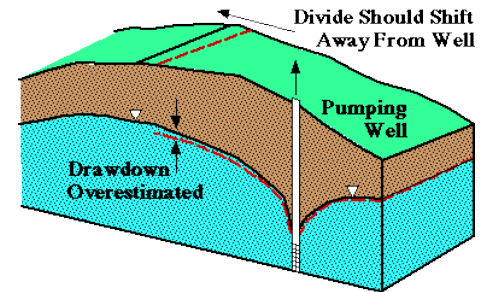
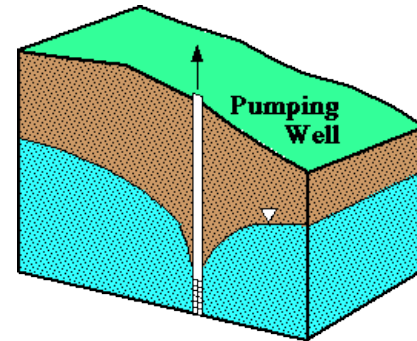
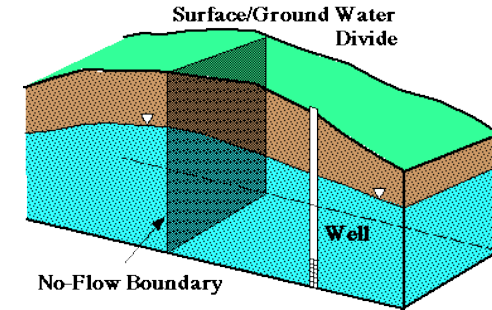
Randbedingungen Dirichlet



Randbedingung: Neumann

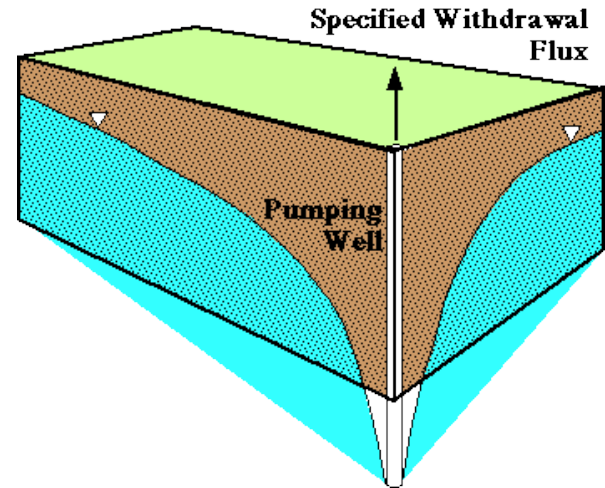
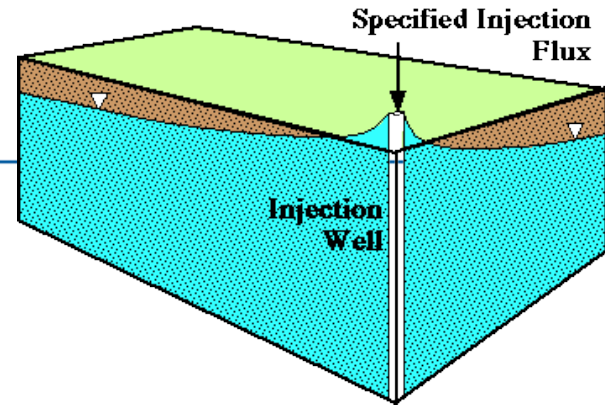
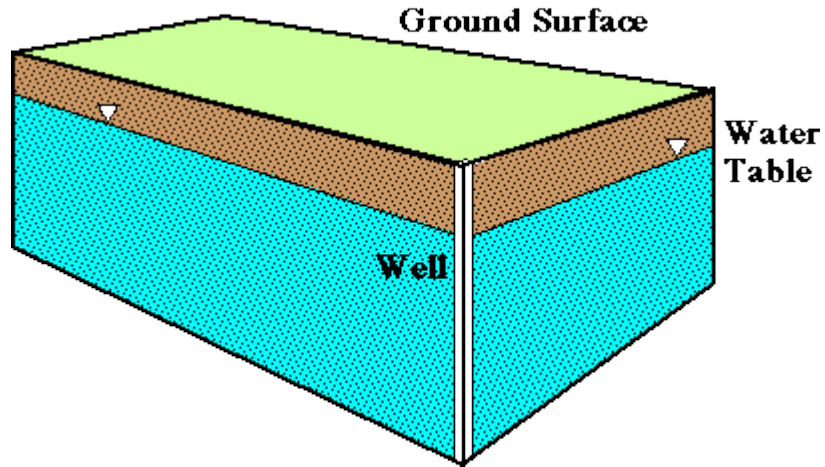
- Neumann: $\frac{\partial h(x)}{\partial n} = \frac{\partial h(x)}{\partial n} \Big|_0 = g(x), x \in \partial\Omega_N$
- Die Randbedingung kann zeitlich dynamisch sein:
 $\frac{\partial h(x,t)}{\partial n} = \frac{\partial h(x,t)}{\partial n} \Big|_0 = g(x,t), x \in \partial\Omega_n$
- Physische Elemente die über NEUMANN Randbedingungen beschrieben werden könnten:

1. Quellen?
 2. Grundwasserentnahmen
 3. Grundwasserscheiden
 4. Grundwasserneubildung
 5. Geringleiter (Leakage Faktor)
 6. Flüsse?
- Zeitliche Gültigkeit?



<https://tinyurl.com/68a5fer4>

Randbedingung Neumann



<https://tinyurl.com/u4mm2dxs>

Randbedingungen: Grund- Flusswasserinteraktion

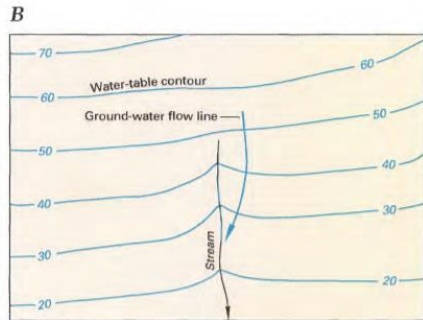
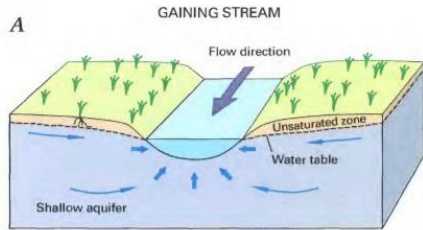


Figure 8. Gaining streams receive water from the ground-water system (A). This can be determined from water-table contour maps because the contour lines point in the upstream direction where they cross the stream (B).

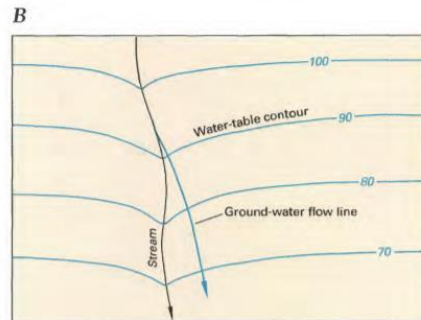
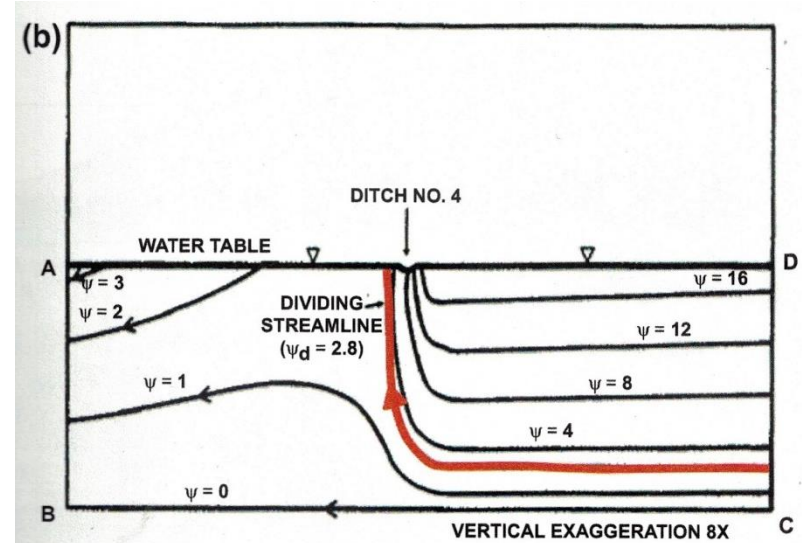
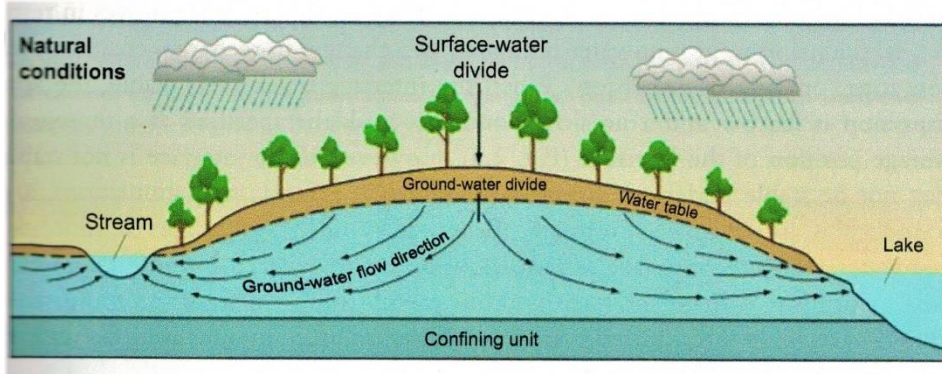


Figure 9. Losing streams lose water to the ground-water system (A). This can be determined from water-table contour maps because the contour lines point in the downstream direction where they cross the stream (B).

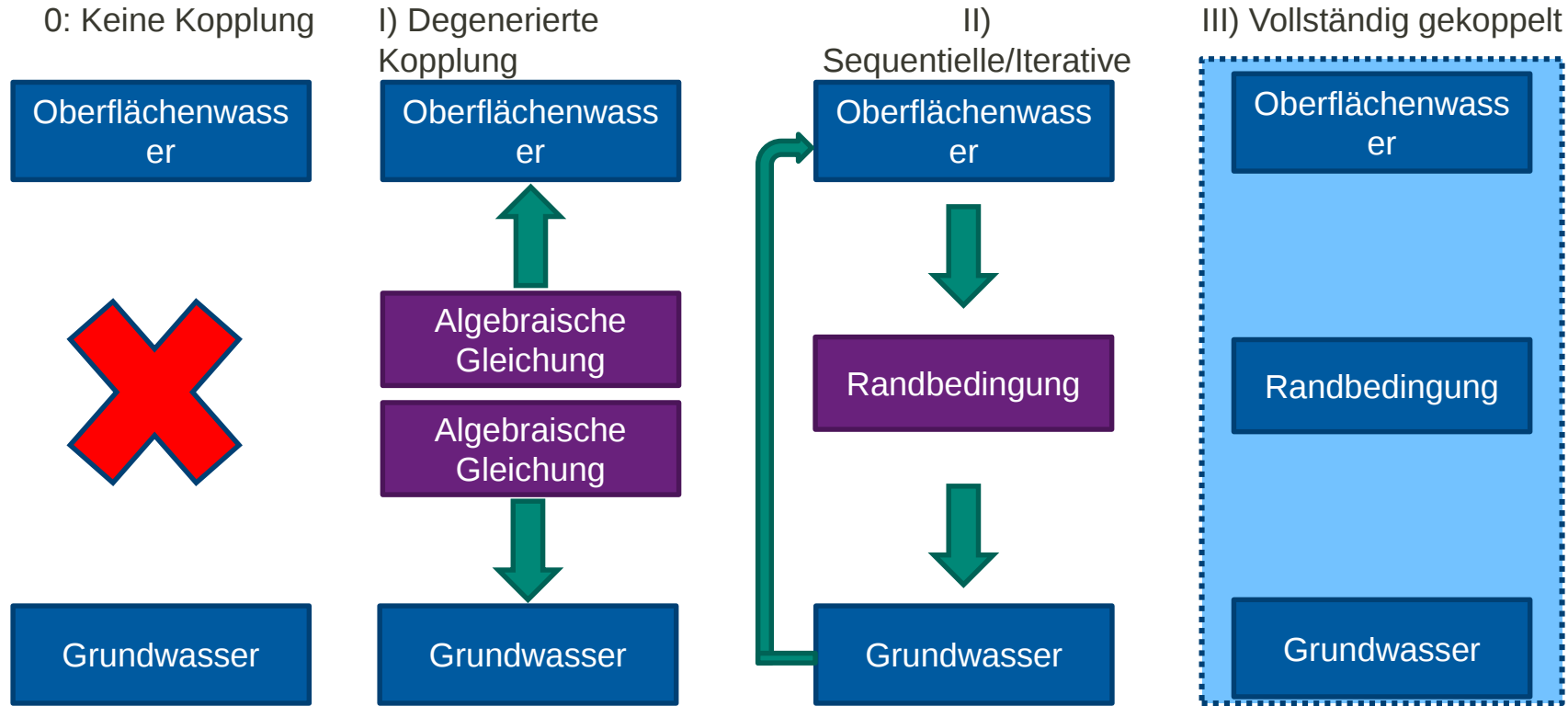
<i>Hydrogeomorphic Types</i>			
Geomorphologic typing	Type 1: upper catchment	Type 2: middle course	Type 3: lower catchment
Interaction scenarios	Interflow dominant in upper catchment	Intermittent in middle course	Groundwater discharge zone
Hydraulic connection			
Baseflow separation concept			

Abhängigkeit des Austauschs von der Hydrogeomorphologie [4]

Randbedingungen: Grund- Flusswasserinteraktion



GW-OW: Modellkopplungsmöglichkeiten (nach Furman 2008)



GW-OW Keine Kopplung

- Oberflächenwasser- und Grundwassermodell besitzen keine Möglichkeit Interaktionen mit dem jeweils andere Kompartiment abzubilden
- Beispiele aus der „Natur“ für diesen Ansatz:



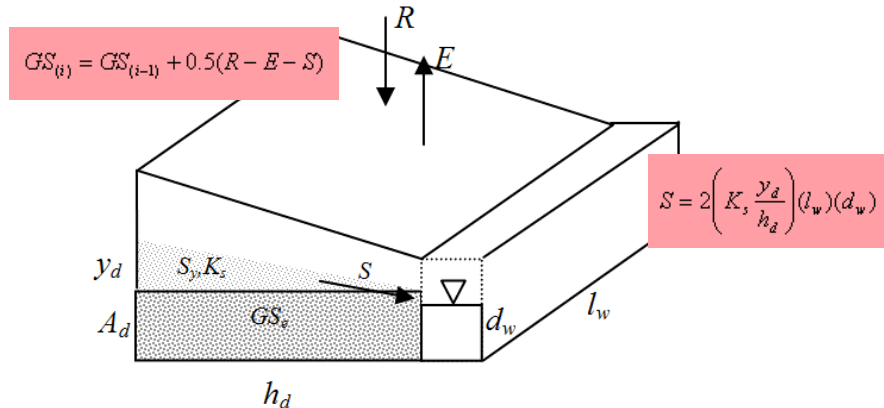
Mittellandkanaluntertunnelung Elbeu [1]



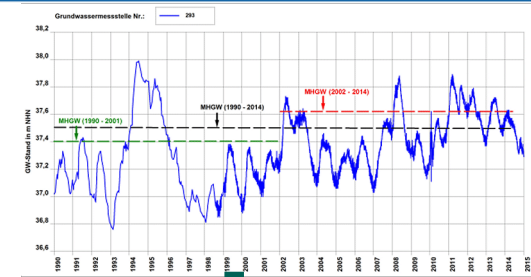
„Bachlauf“ in Los Angeles [2]

I) degenerierte Kopplung

- Simulation des jeweils anderen hydrologischen Kompartiments über vereinfachte analytische Gleichungen, Transferfunktionen etc.
- Keine Informationen über **Prozessvariablen des jeweiligen anderen Kompartimentenmodells** notwendig



Grundwasserkeil in WEAP[1]



Transferfunktion
 $q_{lat}=f(h(t))$

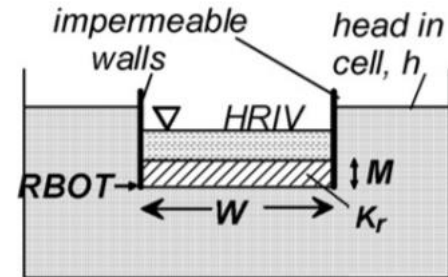
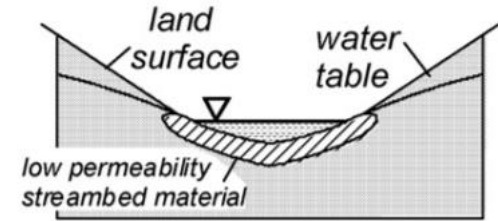
```
SOURCE {
  EXTERNAL_SOURCE {
    name      = Hauptgraben
    cross_section = CS267
    type      = qlateral
    side      = right
    file      = Hauptgraben.dat
  }
}
```

Lateraler Grundwasserstrom als Zeitreihe

Grund- Flusswasserinteraktion; Sequentielle/Iterative Kopplung

- „Leakage Condition“:
- $K \frac{\partial h(x,t)}{\partial n} = q_n(x) = c(h_0(x) - h(x))$
- h_0 könnte das Hydraulische Potential in einem Fluss oder einem See sein
- c ist ein Proportionalitätsfaktor („hydraulic conductance“), wovon hängt er ab?
- $C_{RIV} = cW = K_G LW / M$
 - K_G =hydraulische Leitfähigkeit der Kolmationsschicht zwischen Wasserkörper und Aquifer
 - L = Länge des Gewässerabschnitts
 - W = Breite des Flusses
 - M = Dicke der Kolmationsschicht

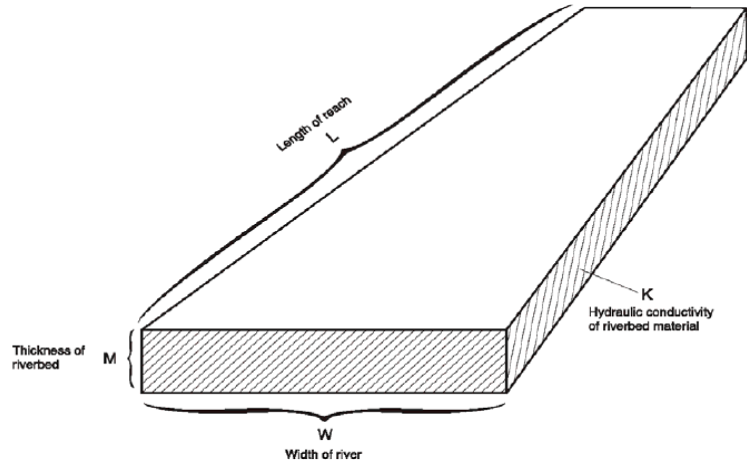
MODFLOW Implementation



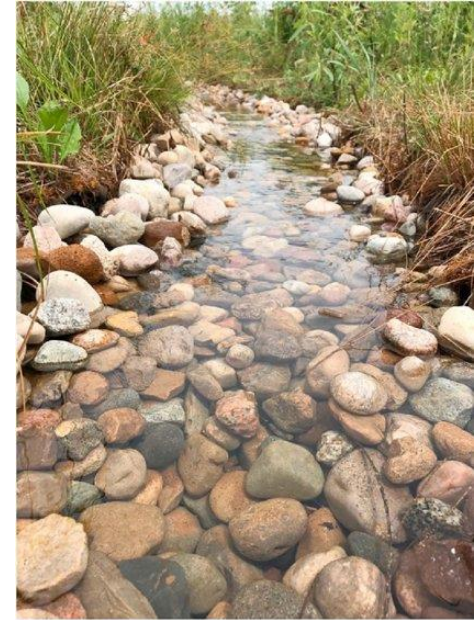
Rushton 2007

Randbedingungen: Grund- Flusswasserinteraktion

- Bitte beachten: $C = C(x, t)$



Harbaugh AW (2005) MODFLOW-2005, the U.S. Geological Survey modular ground-water model – the Ground-Water Flow Process. U.S. Geological Survey Techniques and Methods, 6-A16.



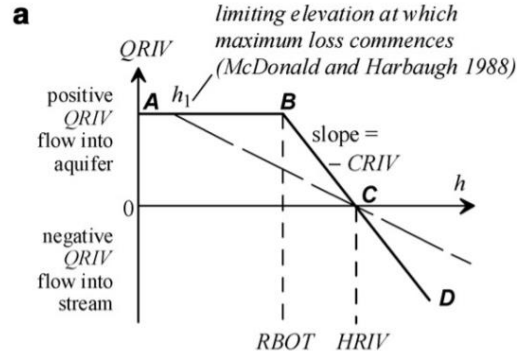
<https://tinyurl.com/4r5andta>

•DOI: [10.1029/2018JG00468](https://doi.org/10.1029/2018JG00468)

www.ufz.de

Grundwasser-Oberflächenwasser Interaktion

- $Q_{RIV}(x) = C_{RIV}(h_{RIV}(x) - h(x))$



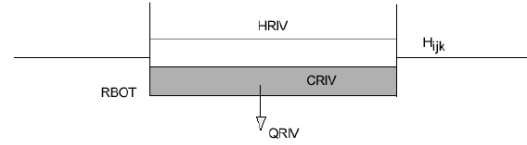
$$C_{RIV} = KrLW/M$$

$$Q_{RIV} = C_{RIV}(HRIV - RBOT), h \leq RBOT$$

$$Q_{RIV} = C_{RIV}(HRIV - h), h > RBOT$$

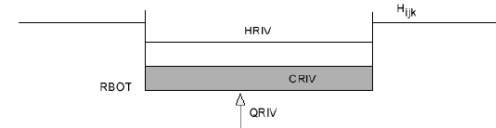
Rushton 2007

Hydraulisches Potential
unter Flusswasserstand



$$Q_{RIV} = C_{RIV} * (HRIV - H_{ijk})$$

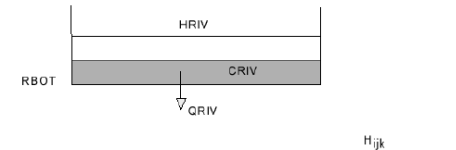
Hydraulisches Potential
über Flusswasserstand



$$Q_{RIV} = C_{RIV} * (HRIV - H_{ijk})$$

(-Q signifies flow out of cell)

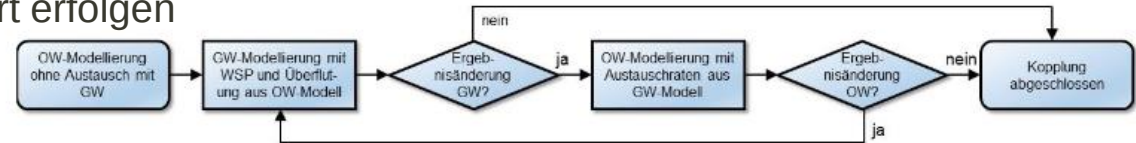
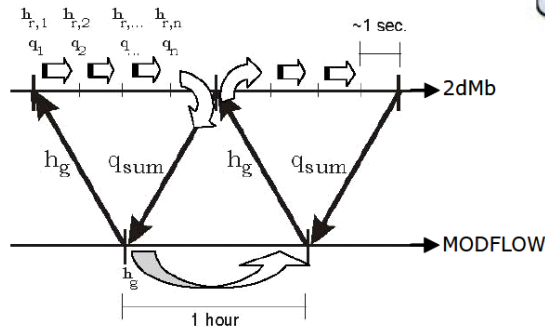
Hydraulisches Potential
unter Flussbett (entkoppelt)
→ konstanter
Grundwassermengenstrom
über den Rand



Beachte: q [m/s]; Q [m³/s]

II) Sequentielle/Iterative Kopplung

- Bei einer iterativen Kopplung werden je nach Zeitschritt/Iterationsschema die Prozessvariablen Neuberechnet
- Kopplungsstrategien sind der Situation anzupassen und können entweder speicher- (z.B. über OpenMI) oder dateibasiert erfolgen



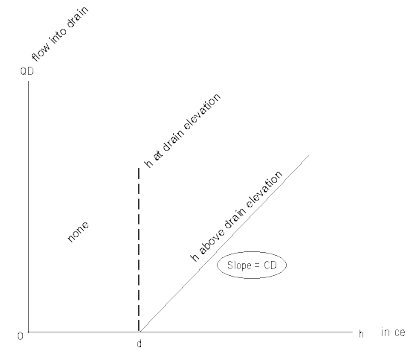
Iterative Stationäre Kopplung [2]

- Step 1 : (a) Set $k = 0$, and fix $H^{(k)}$ on Γ ,
 : (b) Solve for $\Phi^{(k+1)} = \Phi(X, H^{(k)})$ on Ω ,
 : (c) Compute $D^{(k+1)} = D(S; \Phi^{(k+1)}, H^{(k)})$ on Γ ,
- Step 2 : (a) Fix $D^{(k+1)} = D(S; \Phi^{(k+1)}, H^{(k)})$ on Γ ,
 : (b) Compute $H^{(k+1)} = H^{(k+1)}(S; D^{(k+1)})$ on Γ ,
- Step 3 : (a) If $\left(\|H^{(k+1)} - H^{(k)}\| / \|H^{(k+1)}\| \right) < tol \rightarrow \text{end}$,
 : (b) Otherwise set $k = k + 1$, and return to (1b)

Kopplung mit unterschiedlichen
Zeitschrittweiten [1]

Grundwasser-Oberflächenwasser Interaktion: Drainagen, Quellen

- Es kann sinnvoll sein, nur Strömung aus dem GW System heraus zu erlauben
- $q(x) = 0$ wenn $h(x) < d$ oder
- $q(x) = c(h(x) - d)$ wenn $h(x) > d$
- „d“ ist das hydraulische Potential (=Höhe über Datum) des Entwässerungsgrabens
- Auch geeignet für periodische Flüsse und Quellen (dann aber als $Q(x)$ und als Quellterm) sowie Sickerflächen



<https://tinyurl.com/2v8ej377>



<https://tinyurl.com/m494jees>



<https://tinyurl.com/7y4u74jr>

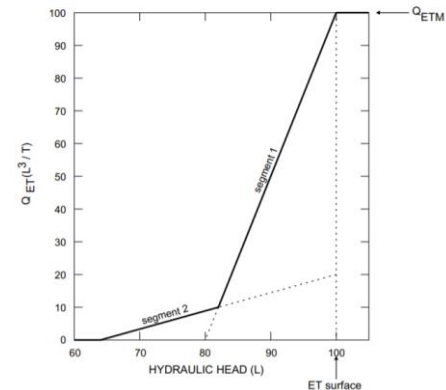
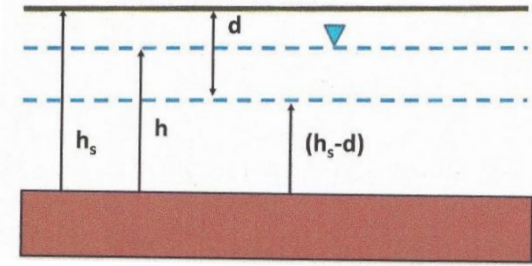


<https://tinyurl.com/dcwjwsdb>

Randbedingung: Evapotranspiration aus dem Grundwasser

- Max. Bodenverdunstungstiefe bewuchsfrei (d) ~ 50cm (Maddrell, S., Neal, I., 2012)
- Anders bei Bepflanzung, max Tiefe~Wurzeltiefe +x cm
- $Q_{ET} = 0$ für $h(x,t) < h_s - d_{EVT}$
→ Verdunstung im teilgesättigten Bereich und wird von Neubildungsrate abgezogen
- $Q_{ET} = \frac{R_{ETM}}{d} (h(x,t) - (h_s - d))$ ← linearer Ansatz
- R_{ETM} ist die Verdunstung an der Oberfläche
- Q_{ET} wird auf die Knoten/Elemente der Grundwasserspiegellage gesetzt

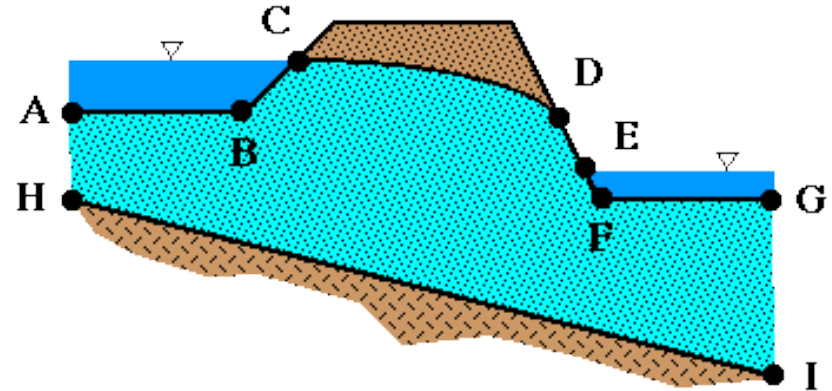
$$Q_{ET} = Q_{ET}(x, t)$$



<https://tinyurl.com/mt4ck585>

Randbedingungen

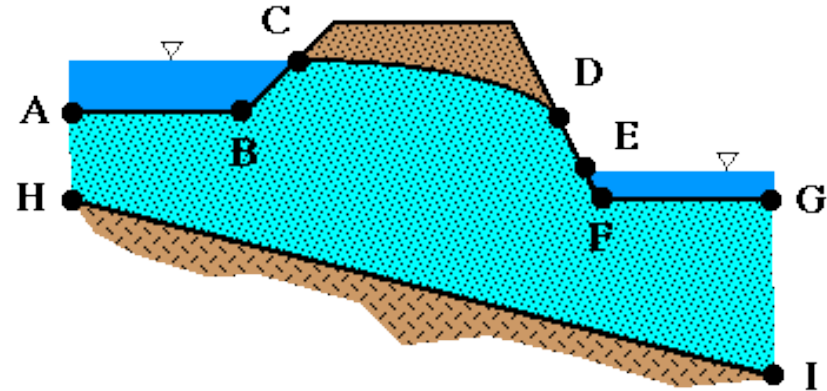
- Welche Randbedingungen für welche Randsegmente?
- AH
- ABC:
- CD:
- DE:
- EFG:
- GI:
- IH:



<https://tinyurl.com/u4mm2dxs>

Randbedingungen

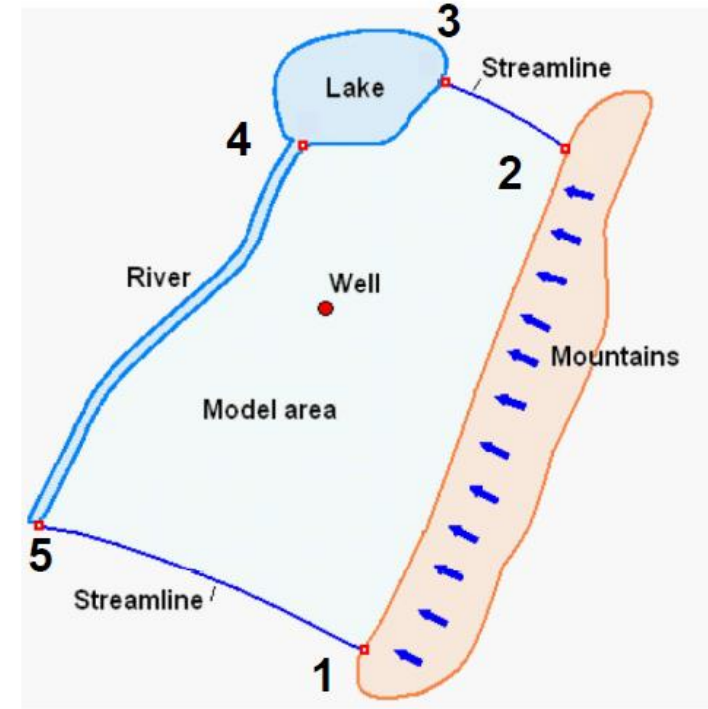
- Welche Randbedingungen für welche Randsegmente?
- AH Dirichlet
- ABC: Dirichlet/Robin
- CD: Neumann (GW Neubildung?)
- DE: Dirichlet (Wasserdruck=Luftdruck)
- EFG: Dirichlet/Robin
- GI: Dirichlet
- IH: Neumann (No-Flow)



<https://tinyurl.com/u4mm2dxs>

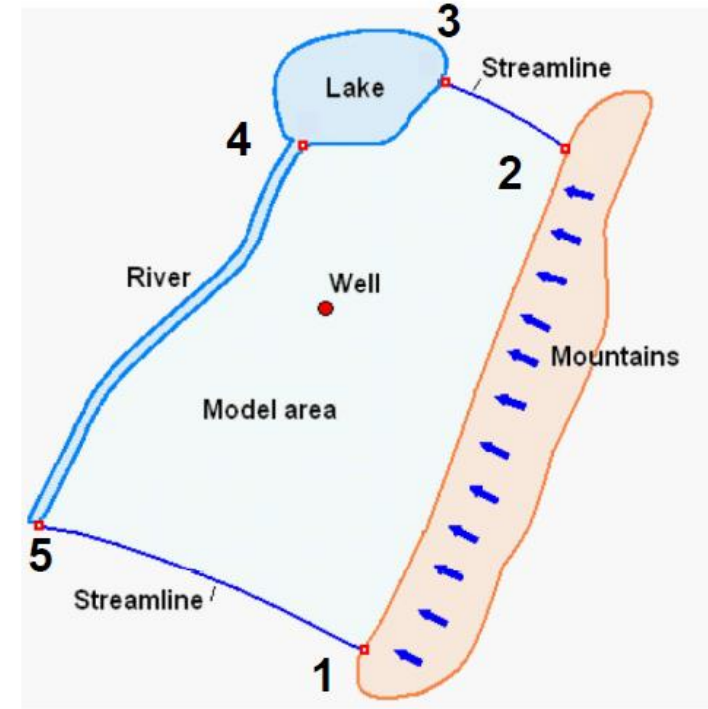
Randbedingungen

- 1-2:
- 2-3:
- 5:1:
- 3:4:
- 4:5:



Randbedingungen

- 1-2: Neumann
- 2-3: Neumann (Zero-Flux)
- 5-1: Neumann (Zero-Flux)
- 3-4 Dirichlet
- 4-5 Robin



Modellsenken und Modellquellen

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

- Q_V =Senken/Quellenterm
- Im Gegensatz zu Randbedingungen befinden sich Quell und Senkterme innerhalb des Modellgebiets
- Physische Elemente für Senken/Quellen sind vor allem:
 - Klimatische Grundwasserneubildung
 - Extraktions/Infiltrationsbrunnen
 - Versickerungsanlagen (Teiche etc)

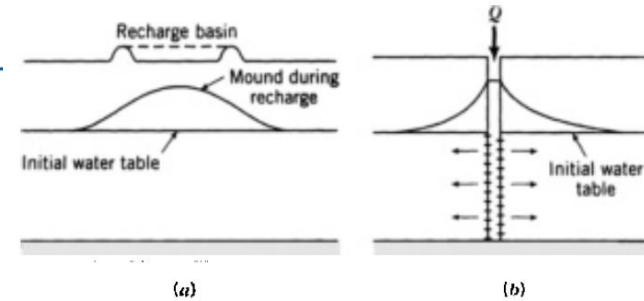


Figure 7.3 Schematic illustration of recharge through ba-

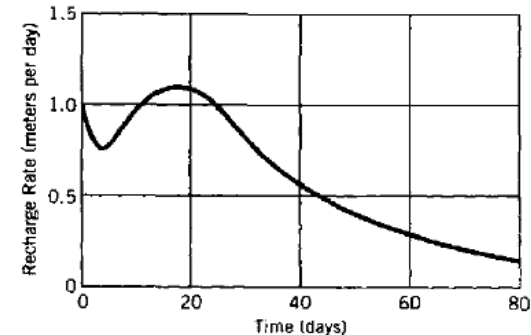
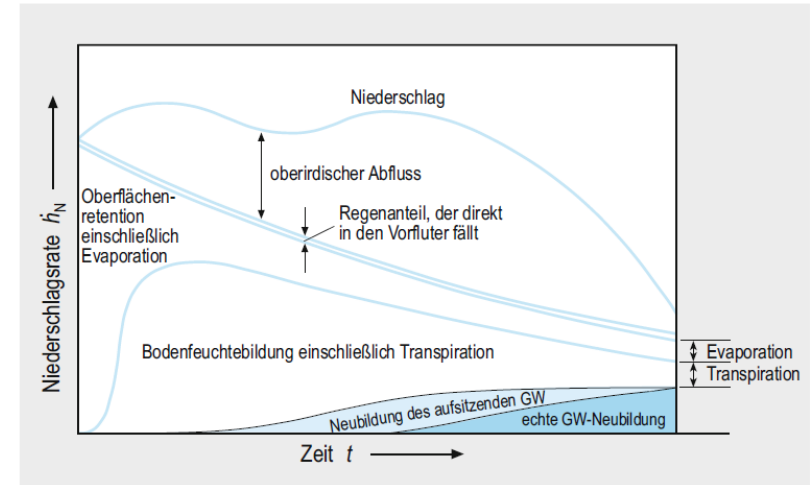
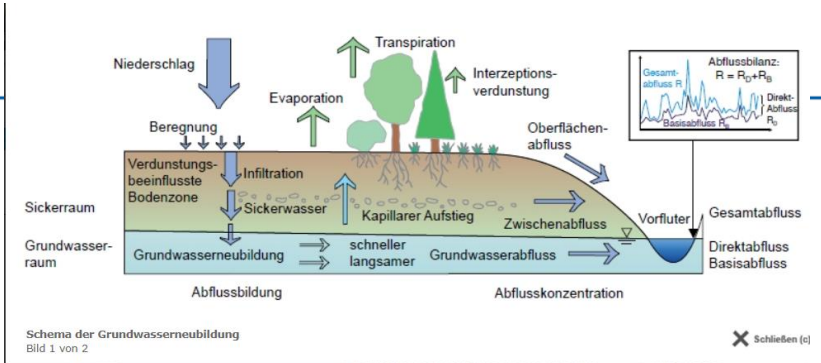


Figure 7.5 Time variation of recharge rate for water spreading on undisturbed soil (from Muckel, 1959).

Quellterm Grundwasserneubildung

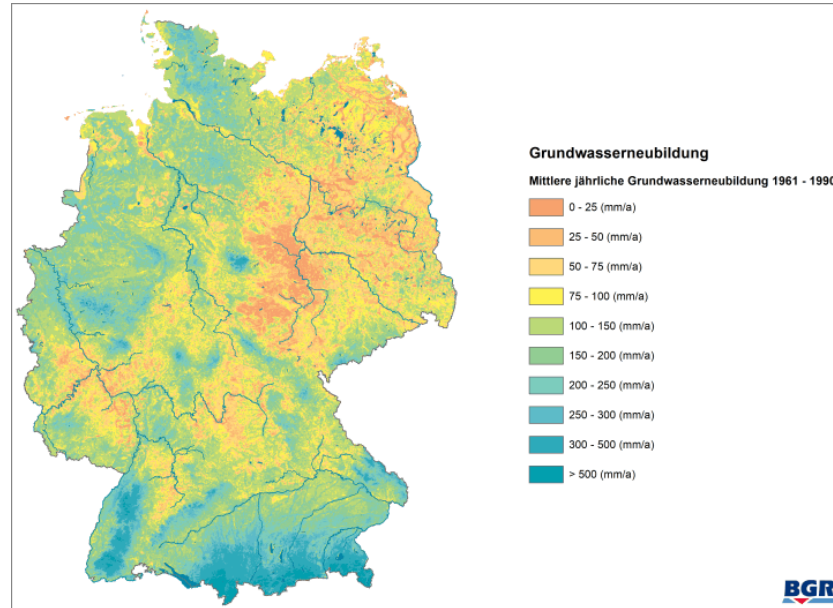
- **Infiltration** :Zugang von Wasser durch enge Hohlräume im Erdboden.
- **Perkolation**: Durchgang des Wassers durch den grundwasserfreien Sickerraum in den Grundwasserleiter
- **Grundwasserneubildung**: Gemäß DIN 4049-3 (1994) als "Zugang von infiltriertem Wasser zum Grundwasser" definiert und ist ein wichtiges Maß für die natürliche Regenerationsfähigkeit der Grundwasserressourcen
- **Grundwasserneubildung** ist eine dynamische heterogene Größe, die komplexe bodenhydraulische Prozesse widerspiegelt

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right]$$

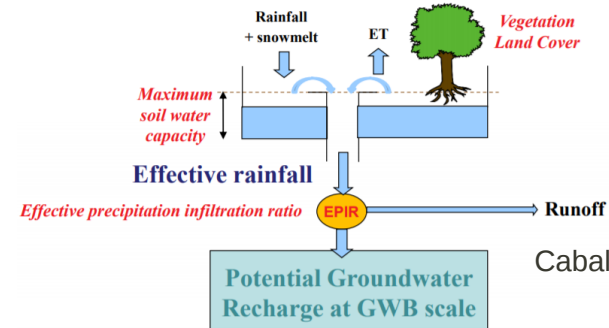


Quellterm Grundwasserneubildung : Bestimmung (Beispiele)

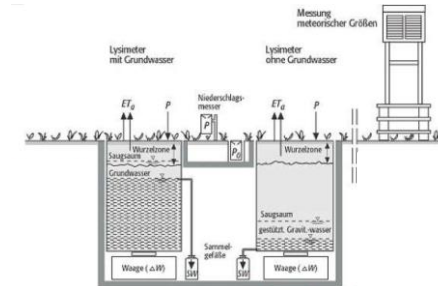
- Statische Karten nutzen



- Hydrologische Modellierung



- Messung über Lysimeter

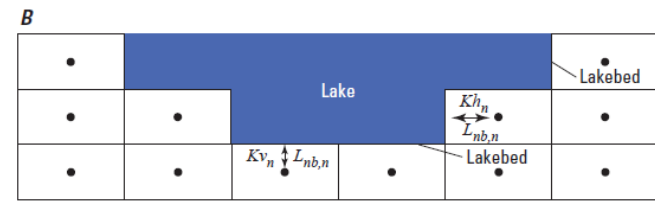


Räumliche Diskretisierung und Randbedingungen: Typische Modellierungsfehler

1. Das Modellgitter ist an geografische Gegebenheiten oder politische Grenzen angepasst, anstatt an das GW-Einzugsgebiet (Beispiel in China: Provinzgrenzen von Jiangxi vs. das Einzugsgebiet des Poyang-Sees).
2. Anwendung eines strukturiertes Netz mit deformierten Schichten um einfallende Schichten abzubilden, obwohl ein unstrukturiertes Gitter vorteilhafter wäre.
3. Der simulierte Grundwasserspiegel liegt über der Geländeoberfläche in einem Gebiet, das für Trockenheit bekannt ist.
4. Ein spezifischer Speicherkoeffizient wird eingegeben, obwohl die Modellsoftware den spezifischen Speicherkoeffizient erwartet – oder umgekehrt.
5. Punktuelle Messwerte von Parametern werden ohne räumliche Skalierung direkt auf das Modellgitter übertragen.

Problemfall Peitzer Teiche

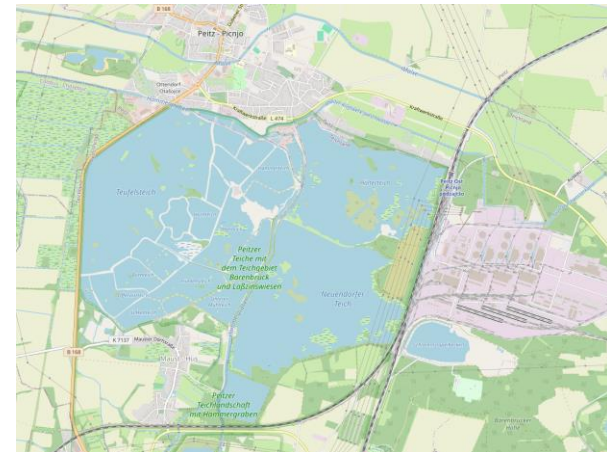
- Für ein großskaliges Grundwassermodell ($\sim 5000\text{km}^2$) in der Lausitz wird über die Einbindung der Standgewässer nachgedacht
- Für große Tagebaurestseen soll eine Einbindung im Stil des Lake Package von MODFLOW erfolgen
- Für die kleineren Teichlandschaften (z.B. Peitzer Teiche) wird die Art der Einbindung diskutiert:
 - a) Lake Package wie MODFLOW
 - b) Ignorieren des Seekörpers und Einbindung über Anpassung der GW-Neubildung
- **Schätzen sie bitte den Sachverhalt ein (Datenbedarf, Rechenzeit, Einfluss auf die Wasserbilanz)**



EXPLANATION

n	GWF cell node	$L_{nb,n}$	Distance between lakebed and GWF cell node
nb	Lake connection	Kh_n	Aquifer horizontal hydraulic conductivity
$BLAK_{nb}$	Lakebed thickness	Kv_n	Aquifer vertical hydraulic conductivity
$KLAK_{nb}$	Hydraulic conductivity of lakebed material	$CLAK_{nb}$	Lakebed conductance
A_{nb}	Area perpendicular to flow direction	CAQ_{nb}	Aquifer conductance

MODFLOW Lake Package



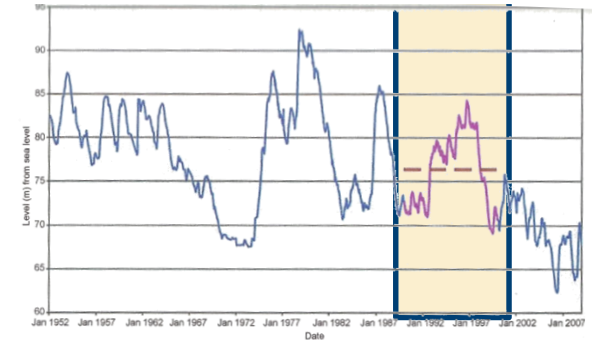
Peitzer Teichlandschaft

Zeitdimensionalität: Stationäre Modelle

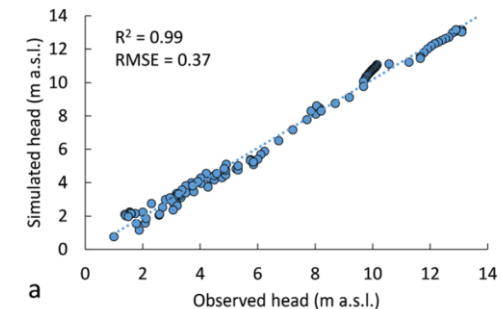
- Stationär : $\frac{\partial H}{\partial t}=0$
- Ein stationäres Modell hat keinen Speicherterm S bzw. S_y
- Alle Randbedingungen und Quellterme sind über das gesamte Modellgebiet wirksam

$$h = \lim_{t \rightarrow \infty} h(t)$$

- Stationäre Modelle müssen mit stationären Felddaten kalibriert werden
 - Zeitliche Mittelwerte
 - Messperioden mit geringen Speicheränderungen



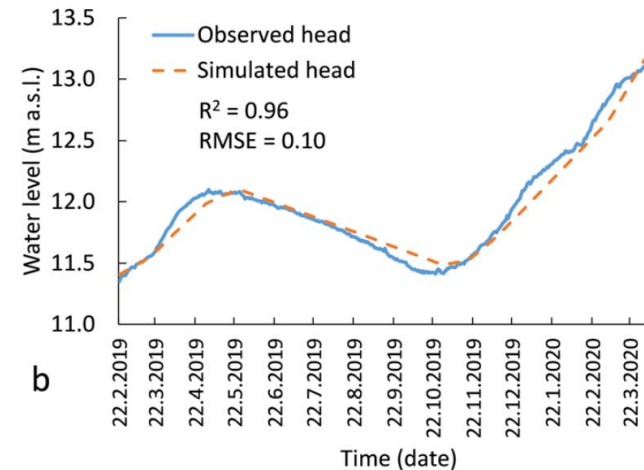
Auswahl Messperiode für Mittelwertbildung



Vergleich Messwerte Simulation

Zeitdimensionalität: Transiente Modelle

- Transient : $\frac{\partial H}{\partial t} \neq 0$
- Initialbedingungen müssen repräsentativ sein
- Der Speicherterm muss für jede Zelle parametrisiert werden
- Transiente Änderungen des Strömungsfeldes können die Randbedingungen beeinflussen
- Transiente Modelle benötigen längere Laufzeiten und haben eine größere Dateiausgabe
- Die Simulationszeit muss angemessen diskretisiert werden



Vergleich Messwerte Simulation

Transiente Modelle: Zeitdiskretisierung

- Simulationszeit wird in Zeitschritte eingeteilt
- Die Zeitschrittweite Δt beeinflusst den Wasserbilanzfehler
- Trade-off zwischen kleiner Zeitschrittweite für numerische Stabilität und der Rechenzeit
→ Adaptive Zeitschrittsteuerung
- Der initiale Zeitschritt für jede hydraulische Stressperiode kann z.B. für 2D homogene isotrope Modelle, abgeschätzt (Masily, 1986, p. 399) werden :

$$\Delta t_i = \frac{S \Delta x^2}{4KM}$$

- Darauf folgende Zeitschritte können mit Faktor 1.1-1.5 kumulativ vergrößert werden

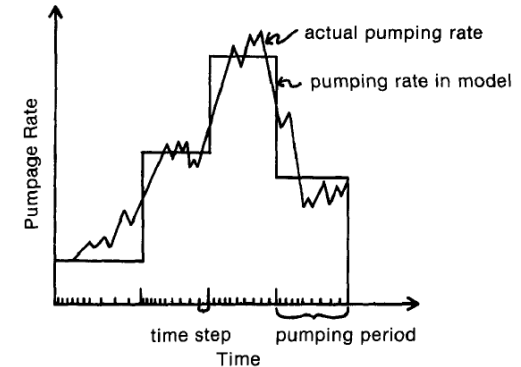
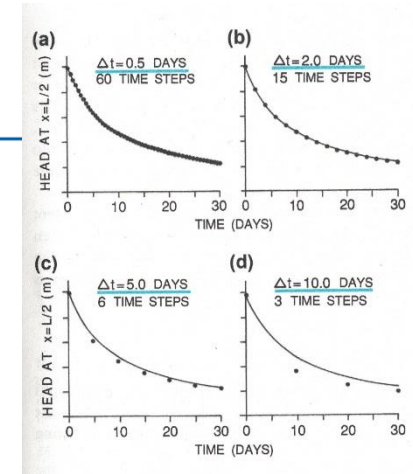


Fig. 9. Example of idealization of variable pumping rates, showing how time step is allowed to increase over each pumping period (after Prickett and Lonquist, 1971).

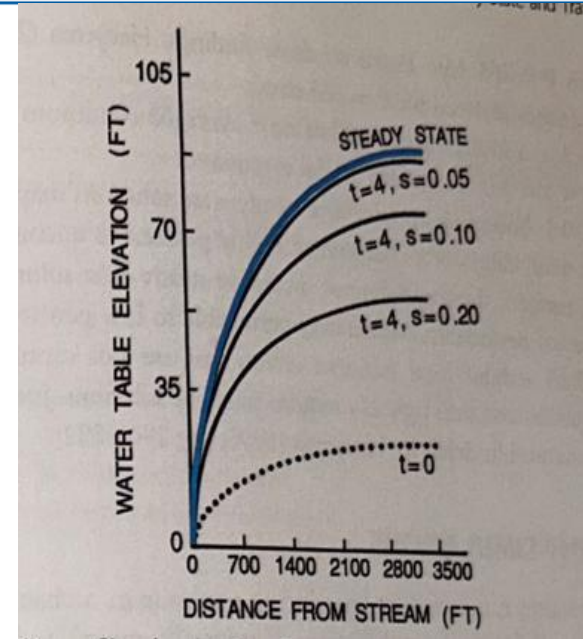
Zeitdimensionalität: Anwendung

- Anwendungsbeispiele für Transiente oder Stationäre Modelle

Stationäre Modelle	Transiente Modelle
Analyse von mittleren Fließverhalten und Fließraten	Simulation von technischen Pumpversuchen
Berechnung der langjährigen mittleren Wasserabgabe eines Flusses an den Aquifer	Evaluierung der Ausbreitung eines Schadstoffes im Umfeld eines Wasserwerks
Simulation der Fließrichtungsänderung durch langfristiges Abpumpen von Grundwasser	Berechnung der Wasserspeicherung im Uferaquifer während eines Hochwassers
Prognose des Einflusses von langanhaltenden Dürren auf die Grundwasservorkommen	Quantifizierung der saisonalen Grundwasserentnahme durch Bewuchs

Zeitdimensionalität: Anwendung

- Transiente Modelle sind komplexer als Stationäre Modelle
- Die Grundwassersystemzeitkonstante („groundwater system time constant“) schätzt die Notwendigkeit eines transientes Modell ab:
- $T^* = \frac{L^2}{D} = \frac{SL^2}{KM}$ mit $D = \frac{KM}{S}$
- D ist die Aquiferdiffusivität, je größer D desto schneller reagiert der Aquifer auf Änderungen in den Randbedingungen/Quelltermen
- L ist die charakteristische Systemlänge, z.B der Abstand zwischen zwei großen Oberflächengewässern im Modell
- Transiente Effekte initiiert an $t=0$ sind nur relevant für $t < T^*$
- Bei $t_{\text{end}} > T^*$ kann ein stationäres Modell angewendet werden um den Einfluss der sich verändernden Bedingungen auf das Grundwasserfließverhalten zu untersuchen



Einfluss des Speicherkoeffizienten auf das Erreichen eines stationären Zustands

Initialbedingungen

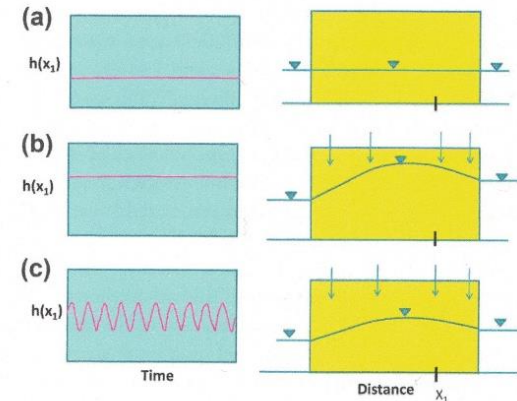
- Erinnern wir uns an **die Vorlesung von Professor Kolditz**
- Es ist notwendig dem Modell Informationen über den Initialzustand zu übergeben : $h(x, t = t_0) = h_0(x)$
- Für **Stationäre** Probleme konvergiert die Lösung normalerweise nach einer Einschwingzeit unabhängig der gewählten Initialbedingungen.
- Für **Transiente** Probleme kann u.U. die stationäre Lösung als Initialbedingung genutzt werden
- Initialbedingungen können genutzt werden um ein Problem in zeitlich verschobene Teilprobleme zu zerlegen (z.B. Tracer Injektions und Verteilungsphase, Pumpregimeänderungen)

FDM - explizites Schema

$$S_{i,j} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} - K_{i,j}^x \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} - K_{i,j}^y \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} = Q_{i,j} \quad (8)$$

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \frac{K_{i,j}^x \Delta t}{S_{i,j} \Delta x^2} u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n + \frac{K_{i,j}^y \Delta t}{S_{i,j} \Delta y^2} u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n + \frac{Q_{i,j} \Delta t}{S_{i,j}} \quad (9)$$

V09: Finite-Differenzen-Methode // 19.06.2020



Statische und dynamische Initialbedingungen

Zeitdiskretisierung: Typische Fehler

- Ein aufwändiges instationäres Modell wird erstellt, obwohl weniger komplexe, stationäre Lösungen das Modellziel zufriedenstellend erfüllen würden.
- Die Einschwingphase einer instationären Simulation ist nicht lang genug, um fehlerhafte Anfangsbedingungen auszugleichen.
- Simulationsergebnisse des ersten Zeitschritts nach Änderung einer Belastungsperiode (stress period) werden zur Entscheidungsfindung herangezogen, obwohl das Ziel die Berücksichtigung des durchschnittlichen Effekts oder der Bedingungen am Ende der Belastungsperiode erfordert.
- Instationäre Effekte breiten sich bis zu einer Modellgrenze aus, die durch eine hydraulische Randbedingung dargestellt wird, ohne dass eine Aktualisierung durch den Modellierer erfolgt.
- Weniger als sechs Zeitschritte sind für die Simulation einer transienten Änderung in den Randbedingungen/Quelltermen festgelegt.

“Regionale Grundwassersysteme“

Veranstaltung im Modul Hydrosystemanalyse

- Übung: 2D Grundwassermodelle

Prof. Dr. Olaf Kolditz

Dr. Erik Nixdorf

04.07.2025

Regionale Grundwassersysteme -Aufbau

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

I. V1: Grundwasserströmungsgleichung

- I. Herleitung der Grundwassergleichung in der Potentialform
- II. Diskussion der Parameter des Grundwasserleiters
- III. Analytische Lösungen

V2: Grundwassermodellierung auf der Einzugsgebietsskala

- I. Räumlich-zeitliche Dimensionalität und Diskretisierung
- II. Randbedingungen und Quellterme
- III. Auswahl des Computercodes --> OpenGeoSys

IV. Übung mit OpenGeoSys und ParaView

- I. Analytische Lösungen vs. OpenGeoSys

V. Klausurfragen...

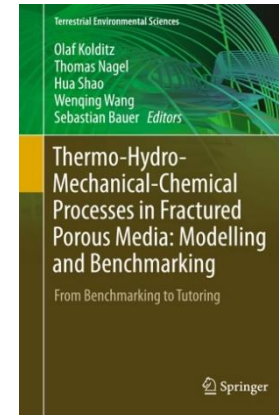
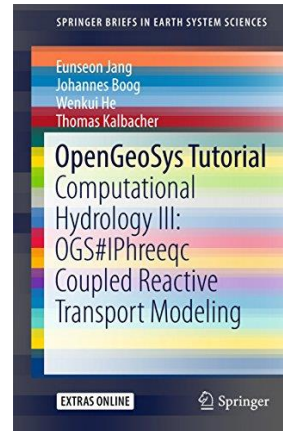
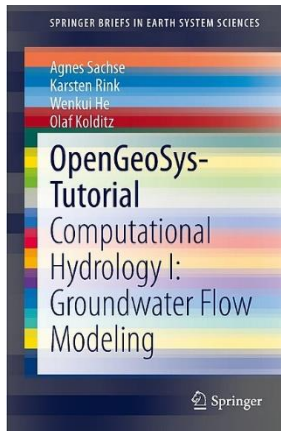
Einleitung

- Die Übung soll Ihnen einen Eindruck vermitteln, wie Simulationen mit OpenGeoSys mit analytischen Ergebnissen überprüft werden können und wie ein zunehmender Grad an Komplexität die Simulationsergebnisse eines regionalen Grundwasserströmungsmodells beeinflusst
- 2 Übungsteile: 1) 2D Flächenmodell: Vergleich analytische/numerische Lösung: Grundwasserströmung mit Grundwasserneubildung
2) 2D Profilmodell: Fließpfadanalyse
- Die Daten liegen auf dem USB Stick (Order „U“) und auf der Cloud
- Diese Übung setzt voraus, dass sie Grundlagen über den Aufbau der **OpenGeoSys6** Eingangsdatei (*.prj Datei) sowie der Nutzung von **ParaView** besitzen

- Simulationssoftware für thermisch-hydraulisch-mechanisch-chemische (THMC) Prozesse in porösen und geklüfteten Medien
- Ursprünglich als Fortran-Code *Rockflow* in den 1980er Jahren entwickelt, später in C implementiert und heute in verschiedenen Varianten der Programmiersprache C++ verfügbar
- +10 Jahre Entwicklung von *OpenGeoSys* 6 mit dem Ziel, eine numerische Lösung für vollständig gekoppelte THMC-Prozesse zu bieten
- Objektorientiertes Design, das modularen und gut gekapselten Quellcode ermöglicht Code-Review und kontinuierliche Integration (CI)
- OGS wurde erfolgreich in den Bereichen der regionalen, kontaminationsbezogenen und küstennahen Hydrologie, in der Grundlagen- und Geothermie, im geotechnischen Ingenieurwesen, in Energiespeichersystemen, zur CO₂-Speicherung und -Sequestrierung sowie in der Endlagerung und Entsorgung radioaktiver Abfälle eingesetzt.

OpenGeoSys: Dokumentation

- Software, Tutorials, Dokumentation @ <https://www.opengeosys.org/>
- Source Code, Benchmarks @ <https://gitlab.opengeosys.org/ogs/ogs>
- Nutzer forum @ <https://discourse.opengeosys.org/>



OpenGeoSys Kontrollstruktur

- Zentraler Teil vom (kompilierten OGS) ist das Kommandozeilentool (ogs.exe)
- Gegenwärtig ist es in der Version **6.5.2** verfügbar (wir nutzen jedoch Version 6.4.4, bitte von der Cloud /USB Stick oder <https://www.opengeosys.org/releases/6.4.4/> runterladen)
- OGS muss grundsätzlich 3 Dinge wissen um eine Simulation zu starten:
 1. Eine Beschreibung des Problems
 2. Ein FEM Netz auf dem das Problem gelöst wird
 3. Eine geometrische und mathematische Beschreibung der Randbedingungen

OpenGeoSys 6.4.4

Released on Friday, Mar 10, 2023, 4 [GitHub release](#)

Downloads

PLATFORM	NAME	ADDITIONAL FUNCTIONS	
All	OpenGeoSys + Utilities (release on PyPi) Note: Downloaded as a zip file for users on all platforms.	Python bindings	PyPi release page
Linux	Datapipe + Utilities	Python bindings	Download
Linux	OpenGeoSys + Utilities	Python bindings	Download
Linux	Datapipe + Utilities	Python bindings	Download
Linux	OpenGeoSys + Utilities	Python bindings	Download
Linux	ogs-6.4.4 (release of preliminary version)	Python bindings	Download
Linux	ogs-6.4.4 (release of 4.0.5 of (pre)alpha version)	Python bindings	Download
All	Benchmark input files Note: Large download. You can also browse and download individual subdirectories for 3.6.4.		Download

```
E:\PhD_Model\RTM_Development\OGS\IPHQC\RTM Tutorial\wetland\ogs.exe
OpenGeoSys-Project
Heinoltz Center for Environmental Research
UFZ Leipzig - Environmental Informatics
TU Dresden
University of Kiel
University of Edinburgh
University of Tuebingen <ZAG>
Federal Institute for Geosciences
and Natural Resources (BGR)
Version 5.5<VU/MU/MU> Date 08.12.2014
File name (without extension): wetland
```

Kommandozeilen-Tool

OGS Kontrollstruktur



```
<?xml version="1.0" encoding="ISO-8859-1"?>
<OpenGeoSysProject>
  <meshes>
  <processes>
  <media>
  <time loop>
  <parameters>
  <process variables>
  <nonlinear solvers>
  <linear solvers>
</OpenGeoSysProject>
```

Projektdatei zur
Problembeschreibung

 ParaView

```
<?xml version="1.0"?>
<VTKFile type="UnstructuredGrid" ... "0.1" ...>
  <UnstructuredGrid>
    <Piece NumberOfPoints="977" ...>
      <PointData>
      </PointData>
      <CellData>
        <DataArray type="..." Name="CellEntity...">
        </CellData>
      <Points>
      </Points>
    </Piece>
  </UnstructuredGrid>
</VTKFile>
```

VTU Datei die das FEM Netz
und die Geometrie beschreibt

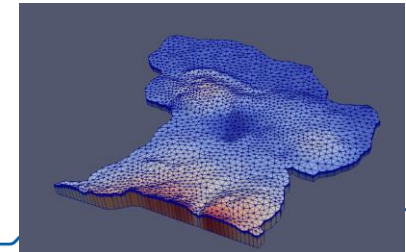
```
<?xml version="1...859-1"?>
<!DOCTYPE OGS-G...
<OpenGeoSysG...
  <name>Sell...
  <points>
  <poly...
  <surf...
</OpenGeoSysG...>
```

GML Datei zur
Geometriebeschreibung
(outdated)

```
OpenGeoSys-Project
Heinrich Center for Environmental Research
UFZ Leipzig - Environmental Informatics
TU Braunschweig
University of Kiel
University of Edinburgh
University of Tübingen (ZAG)
Federal Institute for Geosciences
and Natural Resources (BGR)
Version 5.5.0/04/PM/AM Date 08.12.2014
File name (without extension): setland
```

Kommandozeilentool

 ParaView



Unstrukturierte Gitter als VTU Dateien die
Simulationsergebnisse als Data-Array enthalten

OGS: Conceptual Structure

- Seit OGS version 6 wird das gesamte Modell Set-up mit einer einzigen Projektdatei (*.prj) koordiniert (früher: zahlreiche einzelne Dateien).
- Dies ist eine XML-Datei (Extensible Markup Language), die die jeweiligen Prozesse, Netze und Parameter hierarchisch mittels sogenannter "Tags" strukturiert.
 - Ein Start-Tag für den Beginn eines Prozesses usw.: <property>.
 - Ein End-Tag für das Ende eines Prozesses usw.: </property>, d.h. mit "/".
 - Diese können ähnlich wie HTML verschachtelt werden. Baumstruktur.
 - Teile der XML-Datei können über Verlinkungen eingebunden werden.
- Neben der *.prj-Datei können externe Dateien verlinkt werden, um Systemzustände zu beschreiben (einschließlich Anfangsbedingungen usw.).
- Zusätzlich können externe Python-Skripte eingebunden werden, z.B. um eigene "dynamische" Randbedingungen zu erstellen.
- Alle verfügbaren Tags sind in der Quellcode documentation beschrieben
https://doxygen.opengeosys.org/d3/d36/ogs_file_param_prj.html

OGS: Conceptual Structure

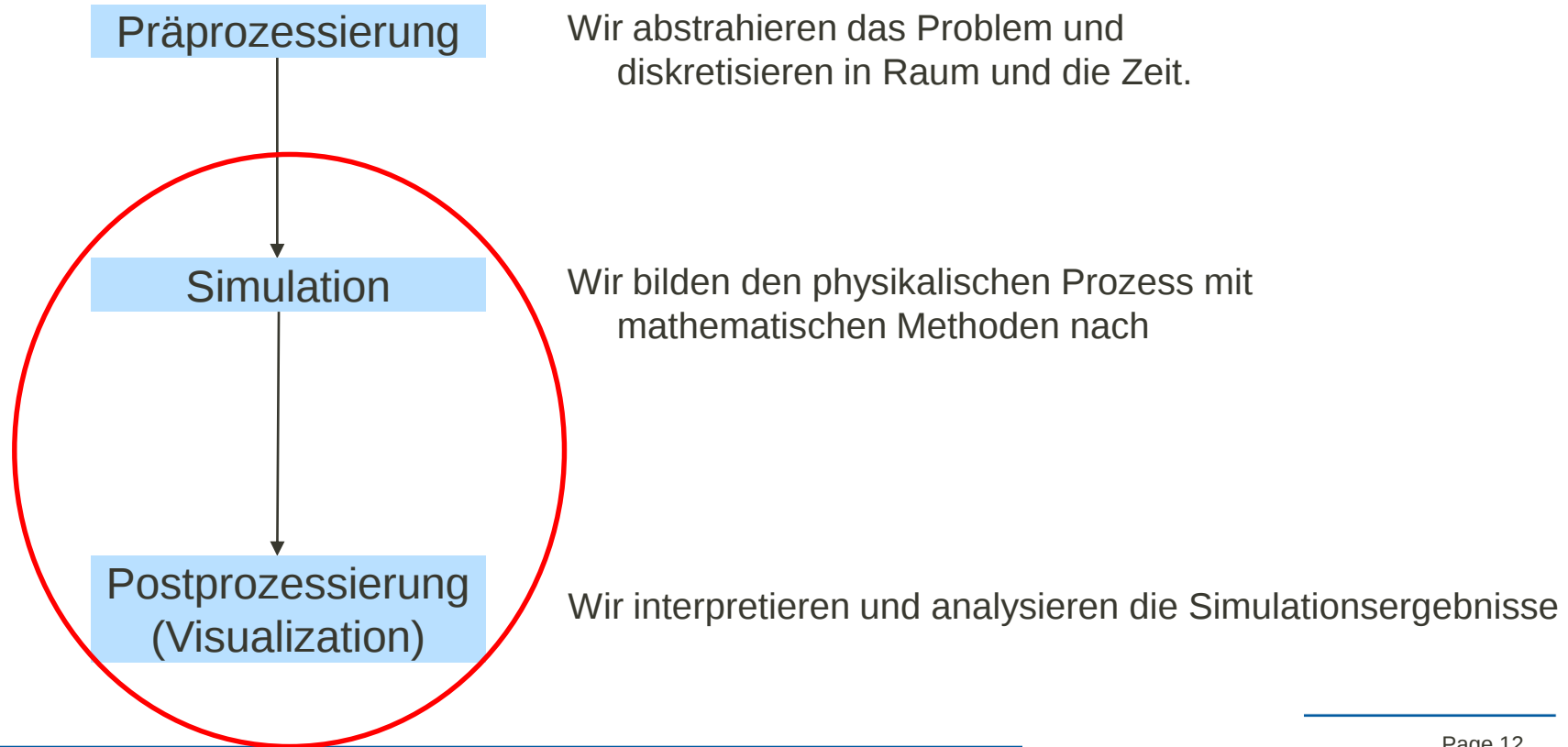
```
144
145
146 <!-- (B4) Je nach Prozess-Klasse gibt es z.T. verschiedene Methoden, um diese an andere Prozesse zu koppeln (z.B. Feedback
147 zwischen Wasserströmung und Stofftransport). Viele Prozessklassen benötigen diesen Tag nicht explizit, da jeweils
148 nur ein Modus verfügbar ist. ansonsten sind möglich: 'use_monolithic_scheme' (monolithisches Verfahren = alles in
149 einem) oder 'staggered' (Operator-Splitting-Verfahren). Was jeweils einzustellen ist, hängt man wieder von
150 der Situation ab (vergleiche Benchmarks) -->
151
152 <coupling_scheme>staggered</coupling_scheme> <!-- das ist ein Beispiel -->
153
154
155
156
157 <!-- (B5) Im Tag 'process_variables' werden die zu berechnenden primären Variablen deklariert. Diese sogenannten primären
158 Variablen werden im Rahmen der numerischen Berechnung durch OGS selbst benötigt. Es ist wichtig, hier alle
159 notwendigen Variablen zu nennen, welche in der Simulation aktiv benötigt werden, aber auch nicht mehr. Fehlen
160 Variablen, so schlägt die Simulation im besten Fall fehl.
161
162 Die Variablen hängen vom Prozessstyp ab. Für einige Prozessvariablen gibt es dabei vordefinierte Tags wie z.B.
163 'concentration' oder 'pressure'. Manchmal wird aber auch der generalisierte Tag 'process_variable' verwendet
164 (Achtung, ohne "s", also Einzahl).
165
166 - LIQUID_FLOW -> Tag 'process_variable'
167 - RichardsFlow -> Tag 'process_variable'
168 - ComponentTransport -> Tags 'concentration' und 'pressure'
169 - HT -> Tags 'temperature' und 'pressure'
170 - THERMO_HYDRO_MECHANICS -> Tags 'displacement', 'temperature' und 'pressure'
171 usw.
172
173 Die jeweiligen Variablen-Tag-Namen findet man unter https://doxygen.opengeneosys.org/ nach Auswahl der entsprechenden Prozess-
174
175 Besonders bei dem Tag 'process_variable' muss man vorher wissen, was dahintersteckt. In den meisten Fällen bei den
176 Prozess-Klassen in der Hydro(geo)logie handelt es sich um eine Variable des Pressure-Typs, aber nicht immer. Also aufpassen!
177
178 Die zwischen den Tags gesetzten Variablennamen sind frei wählbar, müssen aber zu den am Ende der Datei definierten Parametern
179 ebenso zu den ggfs. in den Meshs definierten Namen.
180
181 Eine Ausnahme stellen Konzentrationen von chemischen Elementen bei Verwendung von PhreeqC. Dann müssen die Benennungen den V
182 von PhreeqC folgen. Eine weitere Besonderheit von PhreeqC ist hier, dass nicht alle Elemente in OGS definiert werden müssen,
183 nur solche, welche abseits der Reaktion aktiv transportiert werden sollen. -->
184
185 <process_variables>
186 <concentration>Cs</concentration> <!-- das ist ein Beispiel -->
187 <pressure>pressure</pressure> <!-- das ist ein Beispiel -->
188 <!--... oder Letztere Pressure-Variable alternativ in generalisierter Form.
```

- Die Projektdateien folgen normalerweise der folgenden Grundstruktur (mit bestimmten Modifikationen je nach der simulierten Prozessklasse), die Reihenfolge ist dabei unwichtig, nur die Baumstruktur muss eingehalten werden:
 - a) Verweis auf externe Dateien (Netz, Geometrien, Python-Skripte).
 - b) Beschreibung der zu simulierenden Prozesse
 - c) Beschreibung des Systems, in dem die Prozesse stattfinden (Feststoffeigenschaften, Fluideigenschaften usw.).
 - d) Zeitdiskretisierung (einschließlich Definition des Ausgabeformats).
 - e) Definition von Systemparametern (z.B. hydraulische Leitfähigkeit, Porosität, ...).
 - f) Definition von Beziehungen zur Vorbereitung von z.B. zeitvariablen Randbedingungswerten.
 - g) Definition von Prozessvariablen (Variablenwerte während der Simulation) und gleichzeitig Definition von Randbedingungswerten und -typen usw.
 - h) Einstellungen für den Gleichungslöser.

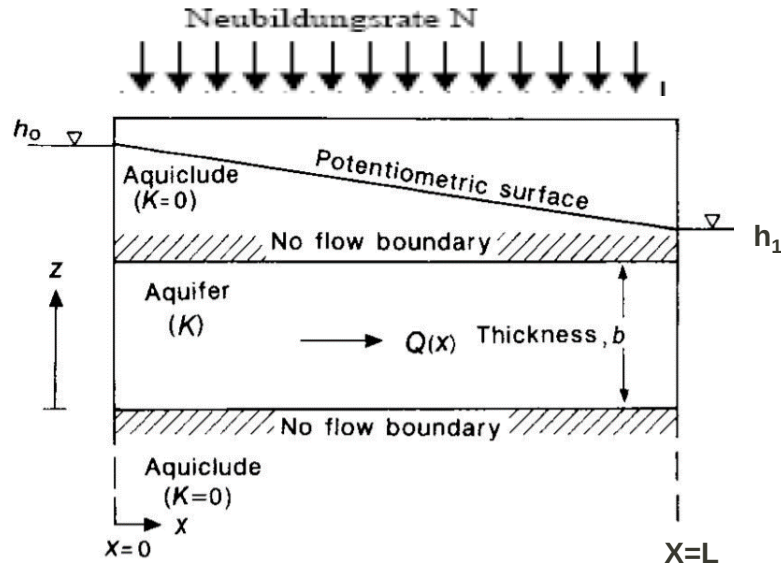
Verständnisfragen

- Schauen sie sich die Projektdatei (*neubildung_planar.prj*) im Ordner planar_model/Projektdatei an
- Einige Verständnisfragen hierzu:
 - Wie viele Mesh-Dateien werden geladen?
 - Welche Prozess-Klasse wird betrachtet?
 - Welche Randbedingungen werden angesetzt?
 - An welcher Stelle wird die Grundwasserneubildung realisiert?
 - Wie lange wird simuliert? Wie viele Zeitschritte werden ausgegeben?
 - Wieviel Dimensionen hat das Modell (1D, 2D, 3D)?

Modellnutzung: Kurz



Teil I: Analytische vs Numerische Lösung



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

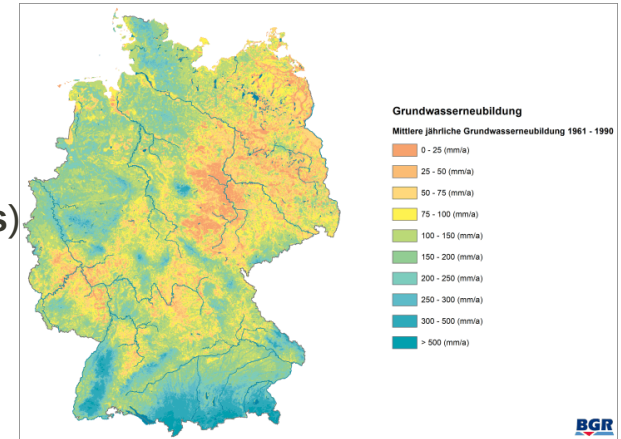
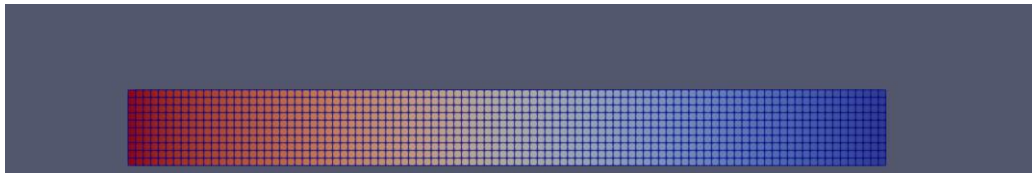
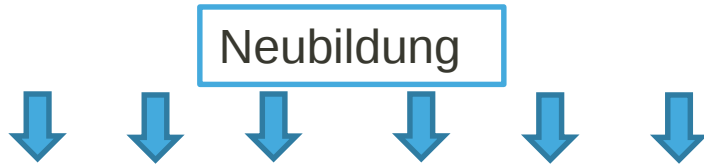
- Grundwasserströmungsgleichung gespannter Aquifer:
- Lösung 1D mit Neubildung:

$$H = h_0 + \frac{h_1 - h_0}{L} x + \frac{N}{2KM} x(L - x) \quad (1)$$

- Gespannter Aquifer mit Neubildung

Übung OGS: Grundwasserneubildung

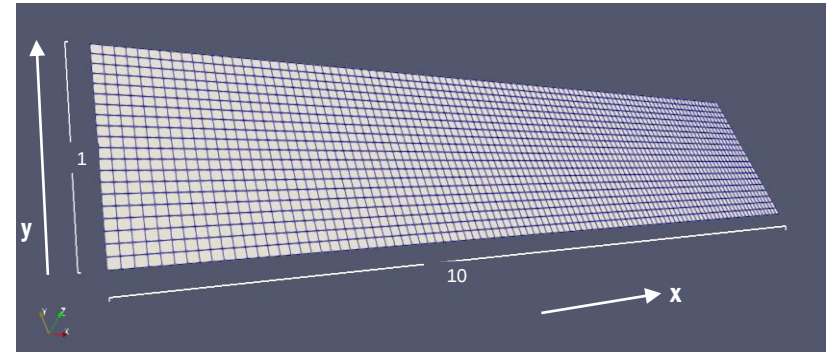
- Aufsetzen Grundwasserneubildung auf das Modell (**10x1x1m**)
 - Neubildung N: 100mm/a $\sim 3.18 \cdot 10^{-9} \text{ m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$
 - Homogener Untergrund: $K = 9.81 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}}{\text{s}}$
 - Setzen als Neumannrandbedingung auf die Modelloberkante
 - Links/Rechts Dirichlet Randbedingungen (**1.1m links, 1m rechts**)



Numerische Berechnung der GW-Oberfläche

▪ Grundlegende Modellgeometrie und Mesh

- Wir diskretisieren unser Problem in 2D mit einer Länge in x von 10m und y=1m.
- Zellen: 0.1 m x 0.1 m, also 100 Zellen in x-Richtung und 10 Zellen in y-Richtung
- Für die Erzeugung einfacher(strukturierter) 2D FEM Netze gibt es ein kleines Kommandozeilentool
@<https://www.opengeosys.org/docs/tools/meshing/structured-mesh-generation/>



Befehl zum Erzeugen dieses Meshes über die OGS-Tools wäre:

```
generateStructuredMesh -o domain.vtu -e quad --lx 10 --ly 1 --nx 100 --ny 10
```

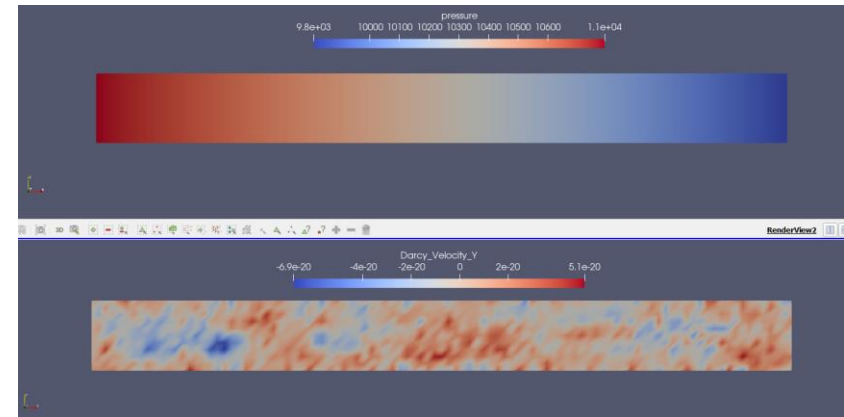
Übung OGS: Grundwasserneubildung

- Wir simulieren ein OGS 2D Modell, welches die Draufsicht auf den Aquifer darstellt (Order: *planar_model*) →quasi 1D Strömungsproblem
- Füllen sie die Lücken „<!-- --> “ in der **Projektdatei** *neubildung_planar.prj*
- Da die Prozess Variable des **LIQUID_FLOW** der Druck ist, wird das Pascal'sches Gesetz angewandt

```
<media>
  <medium id="0">
    <phases>
      <phase>
        <type>AqueousLiquid</type>
        <properties>
          <property>
            <name>viscosity</name>
            <type>Constant</type>
            <value> 1.e-3 </value>
          </property>
          <property>
            <name>density</name>
            <type>Constant</type>
            <value><!-- --></value>
          </property>
        </properties>
      </phase>
    </phases>
  </medium>
</media>
```

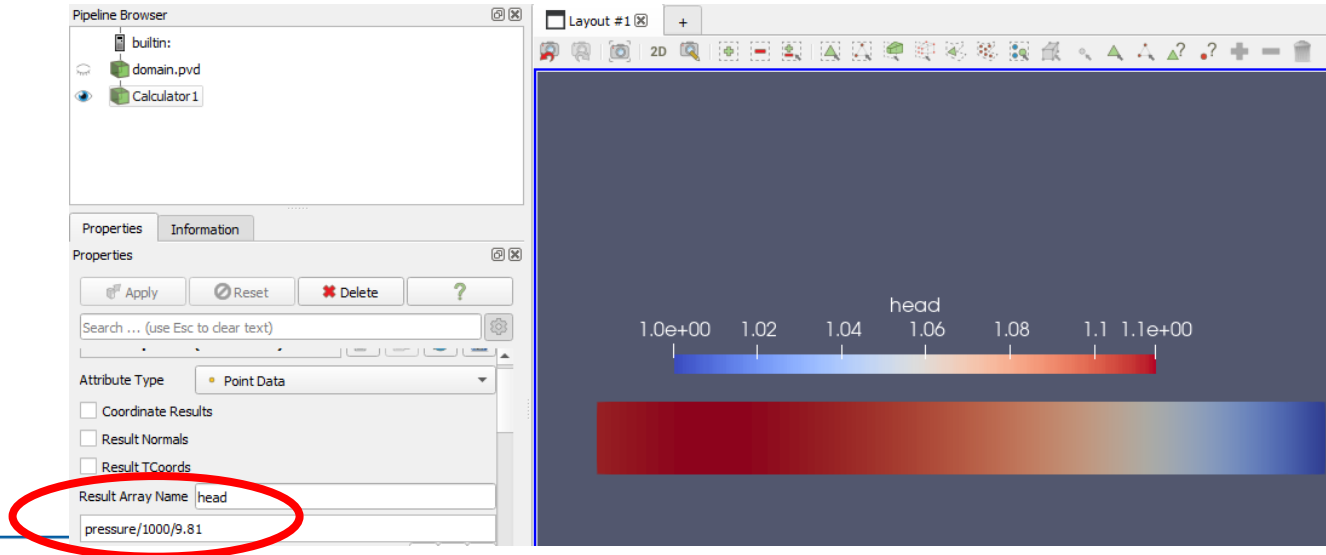
Planares Modell

- Erstellen Sie ein Verzeichnis namens **run_planar_model**
- Kopieren Sie **ogs.exe** und die ausgefüllte Projektdatei in dieses Verzeichnis
- Kopieren Sie die Netze **domain.vtu**, **pl_left.vtu** und **pl_right.vtu** in das Verzeichnis
- Öffnen Sie ein Terminal (**cmd.exe**), ggf. im Administrator Modus
- Gehen Sie mit dem Befehl **cd** in das Verzeichnis
- Geben Sie ein: **ogs.exe neubildung_planar.prj -l debug**



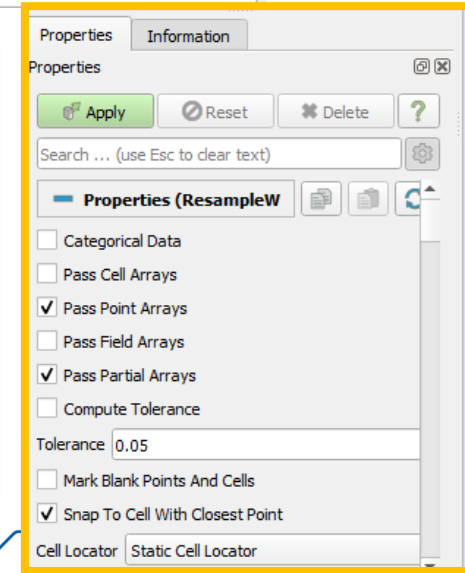
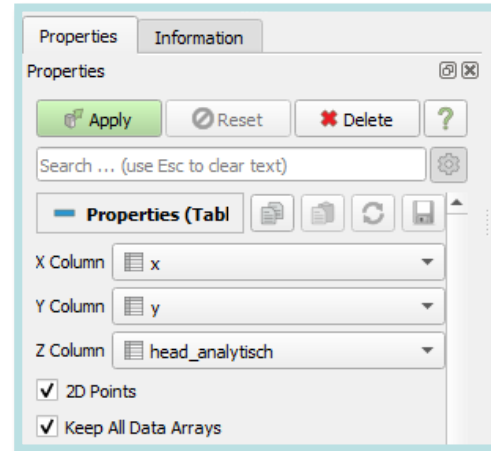
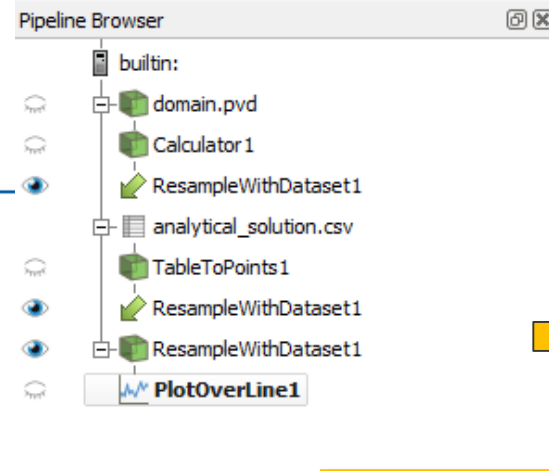
Postprozessierung: Anzeige des Hydraulischen Potentials

- Laden sie die Datei *domain.pvd* in **ParaView**
- Unter Nutzung des **Time Slider** can das Ergebnis für jeden Simulationszeitschritt visualisiert werden → Stationär im Beispiel = 1 Zeitschritt
- Der Druck wird in das hydraulische Potential („head“) über einen Filter (**Calculator**) umgerechnet ($h=p/(\rho \cdot g)$)



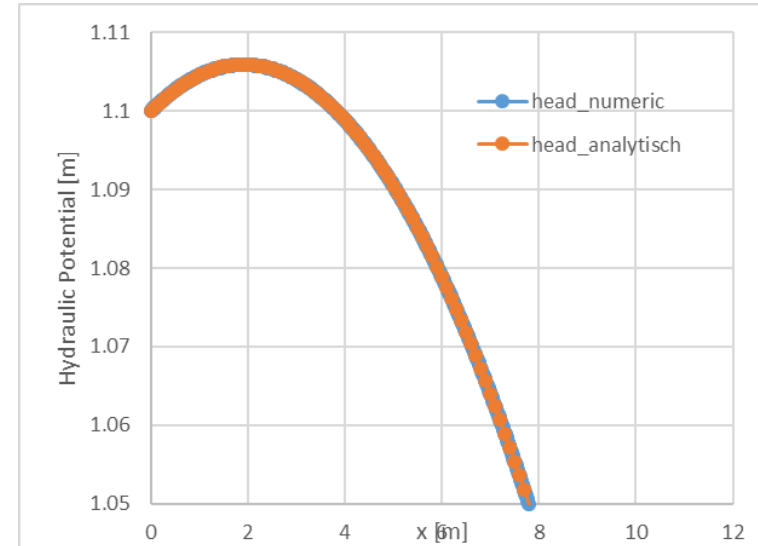
Vergleich mit der analytischen Lösung

- Lade *analytical_solution.csv* in **ParaView**
- Anwendung **TableToPoints** zur Visualisierung der analytischen Ergebnisse im **Render View**
- Die analytischen und numerischen Ergebnisse werden mit dem **ResampleWithDataset** Filter zu einem Datensatz zusammengefasst
- Wähle das *TableToPoints* Objekt als **SourceDataArray** und *Calculator1* Objekt als **DestinationMesh**
- Beachte, dass die Toleranz auf **0.05** gesetzt und **Snap to Cell with Closest Point** ausgewählt ist
- Anwendung von **PlotOverLine** um einen vergleichenden Graphen im Wertebereich $0 < x < 10$ und $0.5 < y < 0.5$ zu erstellen



Übung OGS: Grundwasserneubildung

- Vergleichen sie das Ergebnisse mit der analytischen Lösung
- Grundwasserscheide im Modellgebiet ist ein Extremwert $\rightarrow \frac{dH}{dx} = 0$
- $x_0 = \frac{L}{2} + \left(\left(\frac{h_1 - h_0}{L} \right) KM \right) \frac{1}{N}$
- Einsetzen der Parameter ergibt für die innere Grundwasserscheide die Position $x_0 = 1.92m$



Übung OGS: Profilmodell

- Wir überführen das planare Modell in ein Profilmodell (*Ordner profil_model*) und setzen die Neubildung auf das obere Linienelement
- Im Profilmodell gibt es auch **eine** Geschwindigkeitskomponente in Y-Richtung → 2D Strömungsproblem
- Ersetze die Lücken („<!-- -->“) in *neubildung_profil.prj*
- Externe Software (z.B. www.xmlvalidation.com) kann genutzt werden um formelle Fehler in der prj Datei zu finden
- Kopiere alle vtu Netzdateien und die prj-Datei in den zu erstellenden Ordner *run_profil_model*
- **ogs.exe** in den Ordner kopieren und im Terminal **ogs.exe** *neubildung_profil.prj* ausführen

```
C:\Users\Erik\Desktop\Lehre\Zheda\exercise_material\E2_2\datasets\confined_recharge_profil_model> results_to_compare>ogs.exe confined_recharge_profile.prj -l debug  
Info: This is OpenGeoSys-6 version 6.4.1.
```



```
Eingabeaufforderung  
Info: == Time stepping at step #100 and time 8.64e+10 with step size 8.64e+08  
debug: Assemble LiquidFlowProcess.  
Info: [time] Assembly took 0.0043012 s.  
Info: [time] Applying Dirichlet BCs took 0.000187 s.  
Info: -----  
Info: *** Eigen solver computation  
Info: -> solve with BiCGSTAB (precon ILUT)  
Info: iteration: 1/1000000  
Info: residual: 2.182990e-19  
Info: -----  
Info: [time] Linear solver took 0.0057913 s.  
Info: [time] Iteration #1 took 0.0136927 s.  
Info: [time] Solving process #0 took 0.0141696 s in time step #100  
debug: Compute the velocity for LiquidFlowProcess.  
Info: [time] Time step #100 took 0.016718 s.  
debug: Process output data.  
debug: process variable pressure  
debug: secondary variable v  
debug: output to domain_cs_recharge_p_ts_100.vtu  
debug: Writing output to 'domain_cs_recharge_p_ts_100.vtu'.  
warning: Ascii data cannot be compressed, ignoring compression flag.  
Info: [time] Output of timestep 100 took 0.0230728 s.  
Info: The whole computation of the time stepping took 100 steps, in which  
the accepted steps are 100, and the rejected steps are 0.  
Info: [time] Execution took 1.89362 s.  
Info: OGS terminated on 2023-12-23 04:35:57+0100.
```

Übung: Berechnung der GW-Geschwindigkeit

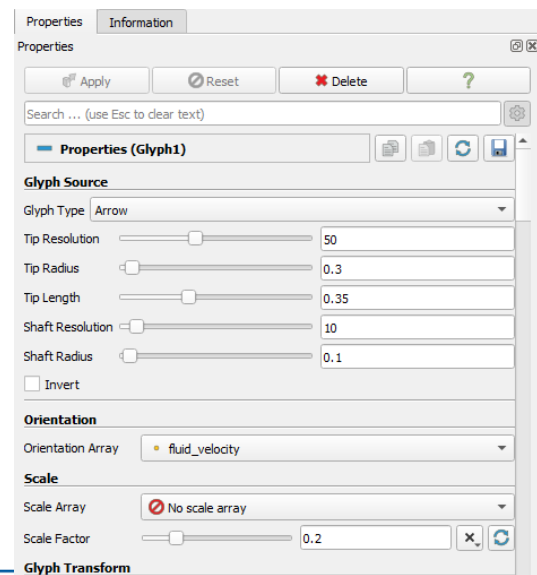
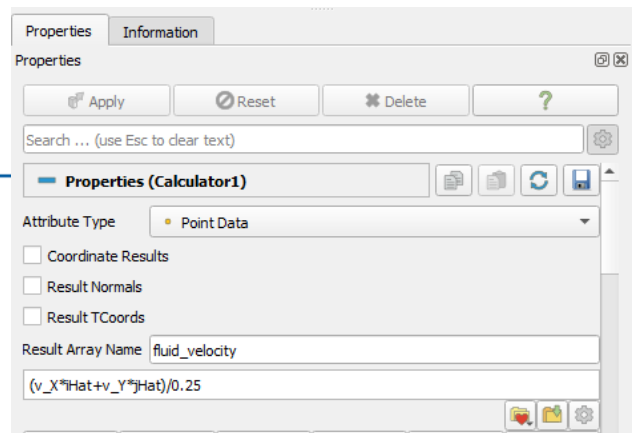
- Lade *domain.pvd* in **ParaView**
- Erstelle einen Parameter velocity vector mit einem **Calculator**
- **Wichtig!:** Die Sekundärvariable **velocity** im **LIQUID_FLOW** Prozess beschreibt nicht die Fließgeschwindigkeit des Fluids im Porösen Medium
- Stattdessen repräsentiert der Wert das Produkt aus hydraulischen Gradienten und Leitfähigkeit

$$q = -Ki = -\kappa \frac{\rho_F}{\mu_F} g \nabla H = -\frac{\kappa}{\mu_F} \nabla p$$

- Daraus kann die GW-Geschwindigkeit über die Porosität ϕ berechnet werden:

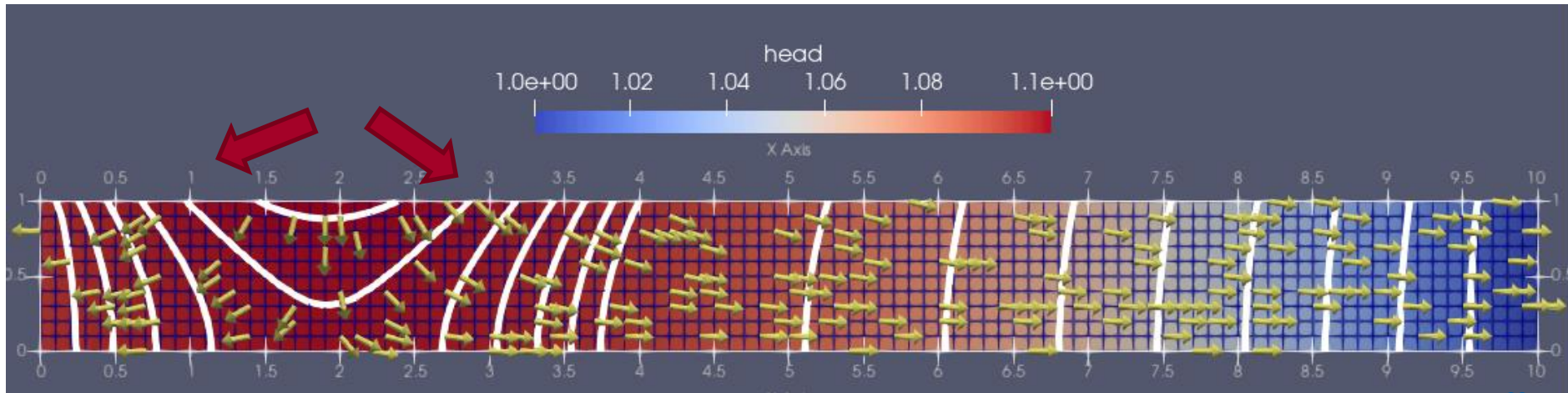
$$v_f = \frac{q}{\phi}$$

- Nutze den **Glyph** and **Countour** filter zur Visualisierung der Geschwindigkeitsvektoren



Second Task: Profile model

- Das Profilmodell ermöglicht die Untersuchung des Fließweges entlang der Wasserscheide sowie den Einfluss der undurchlässigen unteren Randbedingung auf das Strömungsfeld.
- Letzterer Einfluss führt dazu, dass der Fluss in der Querschnittsansicht zu einem echten 2D-Strömungsfeld wird, das von der präsentierten analytischen Lösung nicht abgedeckt wird!



Second Task: Profile model

- Beim Betrachten des Strömungsfeldes des Profilsmodells ist offensichtlich eine Strömung in x- und z-Richtung vorhanden.
- Obwohl $\partial h / \partial z = 0$ gilt, können wir die Strömung in z-Richtung aus der lokalen Massenbilanz eines kleinen Volumens ableiten, das nicht zur oberen Grenze gehört:

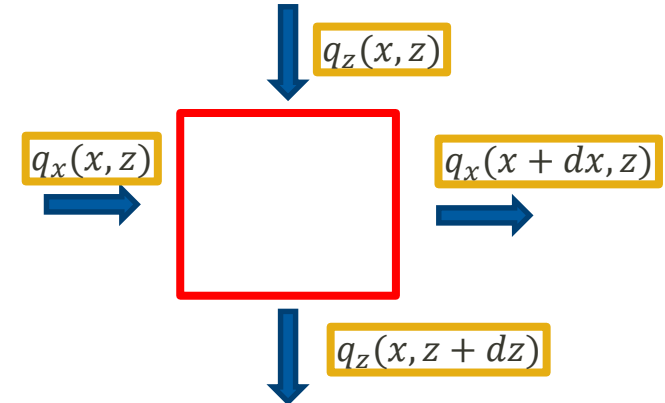
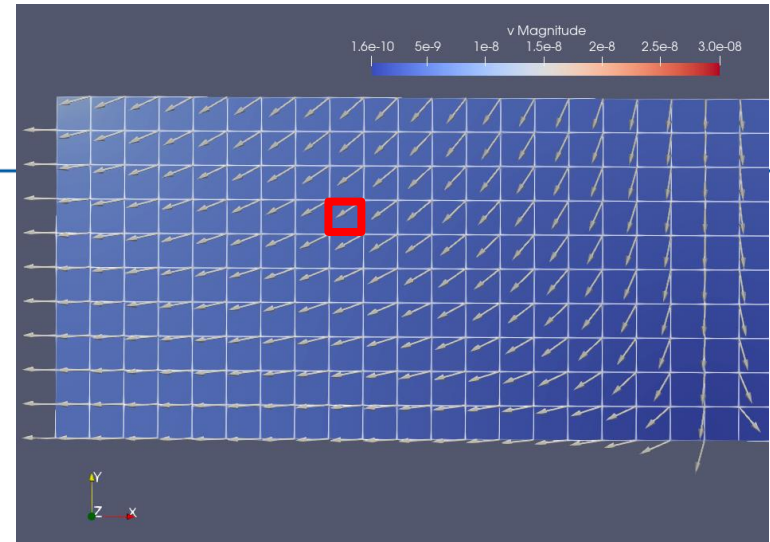
$$\frac{\partial q_z}{\partial z} + \frac{\partial q_x}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$q_x = \frac{Q_x}{H} = -\frac{T}{H} \frac{\partial h}{\partial x} = -\frac{T}{H} \frac{h_1 - h_0}{L} + \frac{N}{H} \left(x - \frac{L}{2} \right) \quad (2)$$

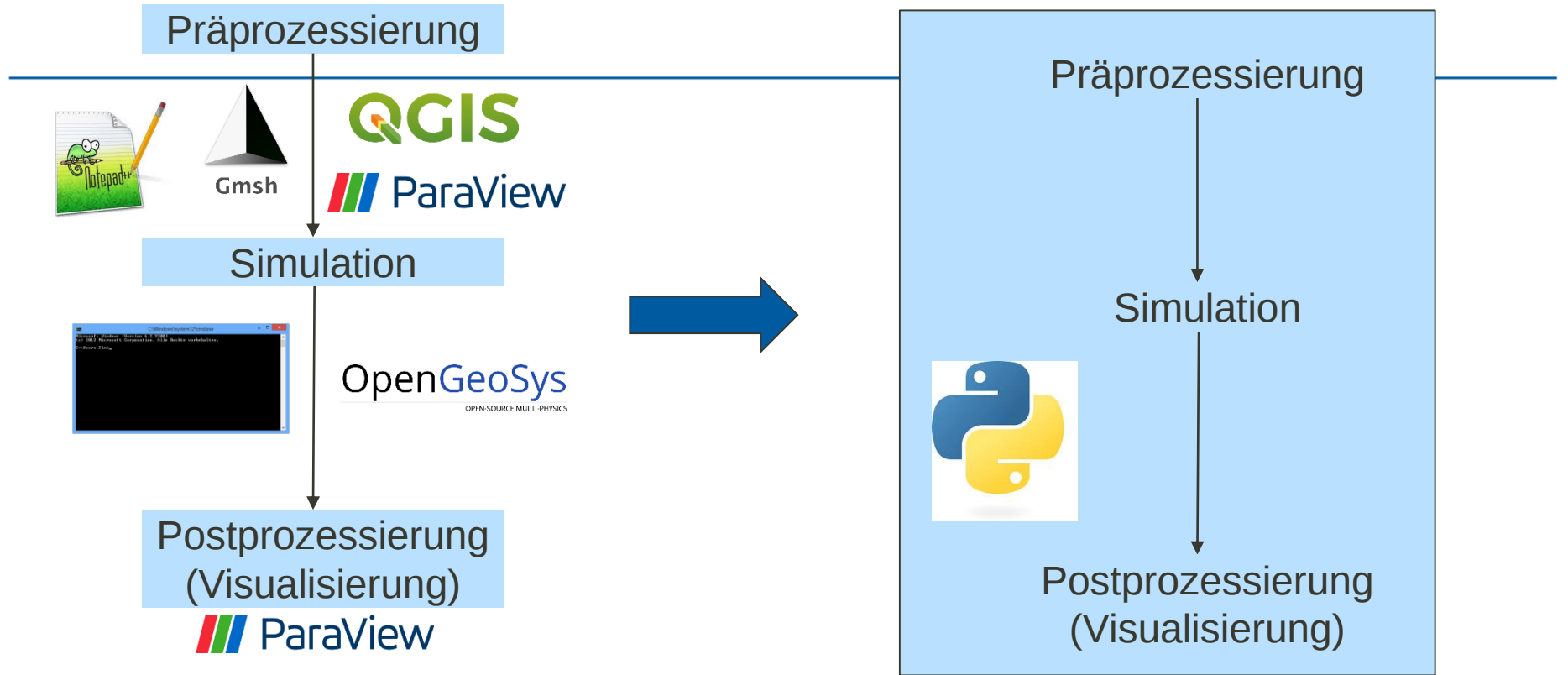
- Zusammenführen von (2) in (1):

$$\frac{\partial q_z}{\partial z} = -\frac{N}{H}$$

- Angenommen das $q_z(z=z_b)=0$ erhält man: $q_z = -\frac{N}{H} (z - z_b)$



Ausblick: Automatisierung von Workflows mit OGS 6



Manuelles GW-Modellierungsschema

Skriptbasiertes GW-Modellierungsschema

Manuelle vs skriptbasiertes GW-Modellierungsschema

Im Allgemeinen macht das Integrieren der Modellentwicklung in eine Programmiersprache mittels Skripten die Modellierung leistungsfähiger, bringt jedoch auch Herausforderungen mit sich.

Vorteile

- Reproduzierbarkeit
- Geschwindigkeitssteigerung
- Bessere Kontrolle & Flexibilität
- Bessere Dokumentation & Nachverfolgbarkeit
- Fehlervermeidung & Debugging
- Erweiterbarkeit & Integration

Nachteile

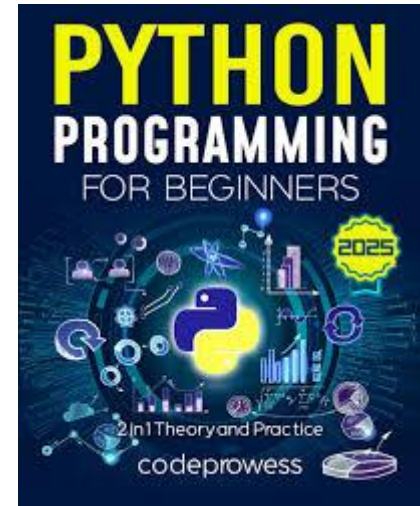
- Steilere Lernkurve
- Mehr anfänglicher Aufwand zum Modellaufbau
- Weniger visuell und interaktiv
- Kompatibilitäts- und Wartungsprobleme

Umbau des Modellierungs-Workflow: Kernpunkte

- Kernpunkte zum Umbau des GW-Modellierungsschemas sind:
 1. Analysieren Sie Ihren aktuellen Workflow und bestimmen Sie, welche Eingaben, Parameter und Ausgaben programmgesteuert verarbeitet werden müssen..
 2. Wählen Sie eine Programmiersprache, die Ihre Modellierungsanforderungen unterstützt (z. B. Python, MATLAB, R oder eine andere relevante Sprache).
 3. Implementieren Sie automatisierte Datenverarbeitung (Daten-Ein-/Ausgabe und Transformationsfunktionen, eventuell auch FEM Netzerstellung).
 4. Konvertieren Sie die Modellkonfiguration in Code (z. B. Konfigurationsdateien).
 5. Ersetzen Sie die manuelle Ausführung durch Skriptbefehle oder Batch-Verarbeitung.
 6. Automatisieren Sie die Ergebnisverarbeitung und -visualisierung.
 7. Qualitätssicherung (Testkonzept), Debugging, Versionskontrolle.

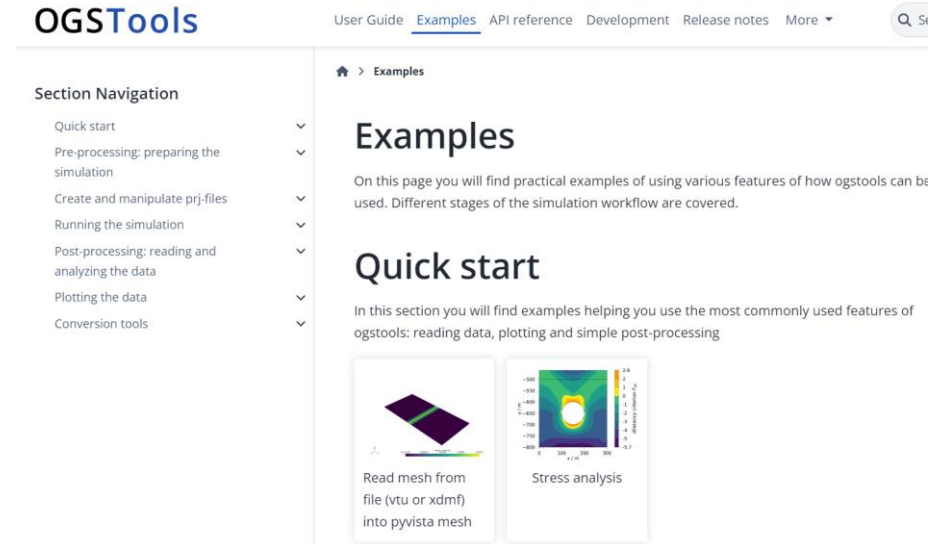
Umbau des Modellierungs-Workflow : Python

- OpenGeoSys kann innerhalb einer Python-Umgebung laufen → Wir brauchen **Python**
- Python ist eine hochentwickelte, interpretierte Programmiersprache, die für ihre Lesbarkeit und Vielseitigkeit bekannt ist. Sie wird in vielen Bereichen eingesetzt, darunter Webentwicklung, Datenanalyse, Künstliche Intelligenz, wissenschaftliches Rechnen und vieles mehr..
- Es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten Python zu installieren:
 - Offizieller Python-Installer
 - Windows Store (für schnelle Installation unter Windows 10/11)
 - Anaconda-Distribution
 - And many more (probably you have a couple of Python Versions already installed on your computer (e.g. QGIS comes with Python))



Umbau des Modellierungs-Workflow : OGS Python Packages

- Die einfachste Installation des OGS-Python-Pakets erfolgt über das bevorzugte Installationsprogramm **pip** (*pip.exe install ogs*)
- Download **ogstools**, ein top-level Paket bereitgestellt von den OGS Entwicklern zur Automatisierung des Prä- und Postprozessings mit Python
- **ogs-tools** vereinfacht die Datenverarbeitung im OpenGeoSys-Workflow, befindet sich jedoch noch in der Entwicklung..
- Während der Installation werden zusätzliche Abhängigkeiten automatisch mitinstalliert
- Für detaillierte Anleitungen siehe bitte die **Beispiele** und die **API-Dokumentation**. (<https://ogstools.opengeosys.org/stable/>)



The screenshot displays the OGSTools website interface. At the top, the 'OGSTools' logo is visible on the left, and navigation links for 'User Guide', 'Examples', 'API reference', 'Development', 'Release notes', and 'More' are on the right. A search bar is also present. The main content area is titled 'Examples' and includes a sub-header 'Quick start'. Below this, there are two example cards: 'Read mesh from file (vtu or xdmf) into pyvista mesh' and 'Stress analysis'. The left sidebar contains a 'Section Navigation' menu with links to 'Quick start', 'Pre-processing: preparing the simulation', 'Create and manipulate prj-files', 'Running the simulation', 'Post-processing: reading and analyzing the data', 'Plotting the data', and 'Conversion tools'.

Skriptbasierter Workflow: IDE

- Es wird empfohlen, Python-Code in einer **integrierten Entwicklungsumgebung (IDE)** zu schreiben.
- Eine **IDE (Integrated Development Environment)** ist eine Software, die häufig genutzte Entwicklerwerkzeuge in einer kompakten grafischen Benutzeroberfläche (GUI) vereint
- Sie kombiniert Tools wie einen **Code-Editor**, **Compiler** (für kompilierte Sprachen), **Debugger** sowie ein integriertes Terminal und verbessert dadurch die Codequalität.
- Eine beliebte IDE ist **Spyder**, die über pip installiert werden kann *pip install spyder*

