

Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH

Ekkehard Holzbecher

Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie

Grundwasser und ungesättigte Zone

Eine Einführung

Mit 88 Abbildungen und 21 Tabellen



Springer

Dr.-Ing./Dipl. Math. Ekkehard Holzbecher
Forsterstraße 56
10999 Berlin

E-mail: gw_model@iwawi.bv.tu-berlin.de

ISBN 978-3-642-64681-2 ISBN 978-3-642-61073-8 (eBook)

DOI 10.1007/978-3-642-61073-8

Additional material to this book can be downloaded from <http://extras.springer.com>.

Die Deutsche Bibliothek – CIP-Einheitsaufnahme

Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie: Grundwasser und ungesättigte Zone; eine Einführung; mit 21 Tabellen/Ekkehard Holzbecher.

– Berlin; Heidelberg; New York; Barcelona; Budapest; Hongkong; London; Mailand; Paris; Santa Clara; Singapur; Tokio: Springer.

ISBN 978-3-642-64681-2

NE: Holzbecher, Ekkehard

Buch. – 1996

CD-ROM. – 1996

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland vom 9. September 1965 in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1996

Softcover reprint of the hardcover 1st edition 1996

Die Widergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürfen.

SPIN 10500989

30/3136 – 5 4 3 2 1 0 – Gedruckt auf säurefreiem Papier

Danksagung

Bedanken möchte ich mich bei allen, die zum Zustandekommen dieses Buchs beigetragen haben. Namentlich erwähnen kann ich nur einige wenige. Ich danke Emmy Schmidt für die Literaturbeschaffung, Manfred Heinel für die Beschäftigung mit den Komplikationen der Rechner- und Netzinstallation, Guido Ernst und Claudia Kücklich für die Erstellung und Überlassung von Zeichnungen, meiner Frau Susanne Janowitz für das erste, Michael Thiele für das zweite Korrekturlesen. Meinem Bruder Harald Holzbecher gebührt besonderer Dank für die Erstellung der Eingabe-Shells und deren Weiterentwicklung, die sich über einige Jahre und Computergenerationen hinweg erstreckte. Ganz besonders danke ich meiner Familie für ihre Rücksichtnahme auf meinen erhöhten Arbeitsaufwand in den Zeiten, in denen es 'eng' wurde.

Schließlich möchte ich diejenigen Studenten erwähnen, die innerhalb mehrerer Jahre die Veranstaltung Modellierung von Strömung und Ausbreitung am Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der Technischen Universität Berlin besucht haben. Durch ihre kritischen Fragen haben sie zum guten Teil dazu beigetragen, daß Skript und Software, aus denen heraus dieser Band entstanden ist, von Semester zu Semester erweitert und verbessert wurden. Wenn trotzdem an der einen oder anderen Stelle Darstellungen nicht deutlich sein sollten, so ist das allein die Verantwortung des Autors.

Vorwort

Grundwasser ist eine lebenswichtige Ressource, die durch anthropogene Eingriffe zunehmend gefährdet ist. Diese Aussage gilt, betrachtet man lokale Gegebenheiten, in größerem oder geringerem Maße. Sie gilt aber insbesondere für die weltweite Perspektive. Bei wachsender Weltbevölkerung und wachsendem Pro-Kopf Wasserverbrauch in sich entwickelnden Ländern werden stets neue Wasserreserven benötigt. Nach einer Schätzung der FAO wird der Verbrauch auf dem Globus im Jahre 2000 um den Faktor 2.75 über dem des Jahres 1967¹ liegen, nämlich bei 5500 km³. Die für die Jahrtausendwende prognostizierte Wasserentnahme geht mit 18700 km³ weit darüber hinaus².

Das in der Erdkruste gebundene Wasser übertrifft die Wassermassen der Ozeane um ein Vielfaches. Der größte Teil dieses Wassers ist chemisch im Gestein selbst gebunden oder befindet sich in großer Tiefe. Nach L'vovich (1979) können lediglich 6,7% des Wassers, das in einer Tiefe bis zu 800m unter der Erdoberfläche zu finden ist, zur Hydrosphäre gerechnet werden. Mit 4 Mio. km³ stellt dieses Grundwasser 14% der weltweit verfügbaren Süßwasserreserven dar. Dies erscheint gering verglichen mit dem Großteil des Süßwasservorrats (85%), der als Eis in Gletschern und den Polkappen der Erde auftritt. Er ist aber groß in Relation zu der Menge des Süßwassers, das sich in Seen und Flüssen, als Feuchte in der ungesättigten Bodenzone und als Wasserdampf in der Atmosphäre befindet. Alle diese Anteile zusammen machen weniger als 1% der Hydrosphäre aus.³

Das in fester Form gebundene Wasser kommt in den meisten Teilen des Globus zur Deckung des Wasserbedarfs nicht in Betracht. Flüsse und Seen werden in vielfacher Weise genutzt, sind oftmals schon übernutzt. Von Schadstoff-Einleitern als Vorfluter behandelt, muß die Weiternutzung aus Gründen der schlechten Qualität in der Regel ausgeschlossen, zumindest aber reduziert werden. Diese Quellen sind zunehmend stärker belastet, so daß sie als Wasserreserve für die meisten Verwendungszwecke nicht mehr in Frage kommen. Es bleibt das Grundwasser als Süßwasserressource, die in weltweiter Perspektive den einzigen

¹ Holy M., FAO, zitiert nach 'Global 2000', Bericht an den Präsidenten (1980)

² Kalinin G.P./ Byko V.D., UNESCO, zitiert nach 'Global 2000', Bericht an den Präsidenten (1980)

³ Alle Zahlenangaben nach L'vovich (1979)

VIII

und letzten Puffer darstellt, aus dem heutzutage noch zusätzliche Entnahmen möglich sind. Es stellt sich die Frage, welche Fördermenge gerechtfertigt ist.

Gerade im Hinblick auf eine nachhaltige⁴ Entwicklung der Menschheit ist es ein dringendes Gebot, Quellen zu erhalten, d.h. sie nicht in einem solchen Maße auszubeuten, das nicht wieder regenerierbar ist und sie nicht durch Schadstoffeinträge zu belasten. Wendet man diese Forderung auf den Gesamthaushalt der Erde an, müssen die 37000 km³ Wasser berücksichtigt werden, die jährlich im globalen hydrologischen Kreislauf zirkulieren. Diese Zahl liegt nur um den Faktor 2 über der prognostizierten Entnahme für das Jahr 2000. Wenn man die derzeitige Entwicklung ins 21. Jahrhundert fortschreibt, ist die Grenze des Wasserverbrauchs für eine nachhaltige Entwicklung im Weltmaßstab leicht erreicht.

Für die globale Erneuerungsrate des Grundwassers liegen keine Abschätzungen vor, zwangsläufig liegt sie unter den 37000 km³ des Gesamtkreislaufs. Damit errechnet sich eine mittlere Verweildauer im Untergrund von mehr als 100 Jahren; entsprechend lang währt die Regenerierung eines unterirdischen Reservoirs. Um die Erneuerbarkeit zu gewährleisten, sind die Förderraten klein zu halten. Das gilt für oberflächennahe Aquifere in geringerer Masse, für tiefergelegene Horizonte stärker. Grundwasser, wie auch Feuchte und Boden, sind als Schutzgüter zu betrachten und sollten in der Gesetzgebung als solche behandelt werden⁵. Diese Klassifikation ist nicht nur für den Menschen selbst, für den die Verfügbarkeit von Wasser eine Lebensgrundlage darstellt, von fundamentalem Interesse.

Die genannten Bedingungen - der verstärkte Rückgriff auf Grundwasser als Süßwasserressource einerseits und die zunehmende Belastung durch Schadstoffe andererseits - machen lokale und regionale Maßnahmen zum Schutz der unterirdischen Reserven zur Notwendigkeit. Quantitative Abschätzungen in diesbezüglichen technischen Expertisen können in der Regel nur durch Modelle oder Modellansätze gewonnen werden.

Es ist der Wunsch des Autors, daß die in diesem Band vermittelten Methoden zur Erhaltung und zum Schutz der Ressourcen und nicht zu deren unverantwortlicher Ausbeutung eingesetzt werden.

⁴ Als Übersetzung des Begriffs 'sustainable development' der UN-Konferenz in Rio de Janeiro 1992

⁵ Sachverständigenrat Umweltfragen, Umweltgutachten 1994

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	1
1.1 Problemstellungen	1
1.2 Modelle	3
1.2.1 Ebenen der Modellierung	3
1.2.2 Modelltypen	4
1.3 Programme	7
1.4 Vorgehensweise bei der Modellierung	11
1.4.1 Schritt 1: <i>Wahl des Modelltyps</i>	12
1.4.2 Schritt 2: <i>Wahl des Modellgebiets</i>	15
1.4.3 Schritt 3: <i>Eingabedaten für das Strömungsmodell</i>	16
1.4.4 Schritt 4: <i>Programmlauf Strömungsmodell</i>	18
1.4.5 Schritt 5: <i>Strompfadsimulation</i>	20
1.4.6 Schritt 6: <i>Eingabe von Daten für das Ausbreitungsmodell</i>	21
1.4.7 Schritt 7: <i>Programmlauf Transportmodell</i>	22
1.4.8 Schritt 8: <i>Ergebnisaufbereitung, Eichung und Auswertung</i>	24
2 Strömungen in porösen Medien	25
2.1 Allgemeines	25
2.2 Porosität	27
2.3 Sättigung und Feuchte	30
2.4 Geschwindigkeit	31
2.5 Druck und Druckhöhe	32
2.6 Piezometerhöhe	33
2.7 Saugspannung und Kapillardruck	33
3 Analytische Beschreibung von Strömungen	35
3.1 Das Darcy-Gesetz und Verallgemeinerungen	35
3.2 Das Prinzip der Massenerhaltung	43
3.3 Zustandsgleichungen	45
3.4 Differentialgleichungen	49
3.5 Randbedingungen	53
3.6 Anfangsbedingungen	57

4 Numerische Verfahren für Strömungen	59
4.1 Diskretisierung des Raums	60
4.1.1 Finite Differenzen (FD)	60
4.1.2 Finite Volumen (FV)	67
4.1.3 Finite Elemente (FE)	71
4.2 Diskretisierung der Zeit	78
4.2.1 Instationäre Simulation	78
4.2.2 Fehlerfortpflanzung und Stabilität	84
4.3 FAST-A	86
5 Beispiele von Strömungsmodellen	89
5.1 Anströmung von Brunnen	89
5.2 Potentialströmung in einem Trog	94
5.3 Konstanter Durchfluß in der Aerationzone	98
5.4 Wall-Durchströmung	104
5.5 Oberflächennahe Deponie	107
6 Ausbreitungsprozesse	111
6.1 Konzentration	111
6.2 Advektion	113
6.3 Diffusion	114
6.4 Dispersion	115
6.5 Sorption	117
6.6 Abbau, Zerfall, Degradation	119
6.7 Produktion	119
6.8 Reaktion	120
7 Analytische Beschreibung von Ausbreitung	121
7.1 Einleitung	121
7.2 Energieerhaltung	122
7.3 Massenerhaltung einer Komponente	122
7.4 Fourier's Gesetz	125
7.5 Fick'sches Gesetz	126
7.6 Differentialgleichungen	127
7.7 Allgemeine Quell- bzw. Senkenterme	129
7.8 Randbedingungen	132
7.9 Anfangsbedingungen	133
8 Numerische Verfahren für Ausbreitungsprozesse	135
8.1 Diskretisierung des Raums	136
8.1.1 Finite Differenzen (FD)	136
8.1.2 Finite Volumen (FV)	142
8.1.3 Finite Elemente (FE)	144

8.1.4 Finite Zellen	145
8.2 Diskretisierung der Zeit	148
8.2.1 Verfahren der Simulation	148
8.2.2 Diskretisierungsfehler und numerische Dispersion	151
8.2.3 Stabilität und Diskretisierungskriterien	153
8.3 Particle Tracking	154
8.3.1 Euler-Verfahren	156
8.3.2 Verfahren höherer Ordnung	158
8.3.3 FASTpath	158
8.3.4 Verwendung der Stromfunktion	161
8.4 Charakteristikenverfahren und Lagrange-Ansatz	162
8.5 Random Walk	165
8.6 FAST-B(2D)	167
9 Beispiele von Ausbreitungsmodellen	171
9.1 Zerfall und schnelle Sorption	171
9.2 Advektion und Dispersion (1D)	173
9.3 Advektion, Diffusion und Zerfall	179
9.4 Langsame Sorption	182
9.5 Zweidimensionale Ausbreitung im 1D-Strömungsfeld	185
10 Numerische Lösung von Gleichungssystemen	191
10.1 Lineare Gleichungssysteme	191
10.1.1 Überblick	191
10.1.2 Verfahren der Konjugierten Gradienten (CG)	194
10.2 Nichtlineare Gleichungen	197
10.2.1 Überblick	197
10.2.2 Picard Iterationen	198
10.2.3 Newton Verfahren	198
Literatur	201
Sachverzeichnis	210
Anhang H: Handbücher	
Anhang I: In/Output-Dateien	

Symbolverzeichnis

Im folgenden sind die meistverwendeten Symbole mit ihrer Bedeutung aufgeführt. In der dritten Spalte ist zusätzlich die physikalische Einheit als Kombination der Grundeinheiten angegeben. Die Grundeinheiten sind dabei wie folgt abgekürzt: L=Länge, T=Zeit, M=Masse, K=Temperatur. Dimensionslose Variable sind durch eine 1 gekennzeichnet. Findet sich in der dritten Spalte ein Strich, so erübrigt sich die Einheitenangabe, da die Variable in unterschiedlicher physikalischer Bedeutung verwendet wird.

Hier wie im Band selbst sind skalare Größen im Normaldruck dargestellt, vektorielle Größen sind in arabischen Kleinbuchstaben in Fettdruck wiedergegeben, Tensorgrößen bzw. Matrizen in arabischen Großbuchstaben in Fettdruck.

1. Lateinische Anfangslettern

Symbol	Variable	Einheit	Englische Bezeichnung
A	Fläche	L^2	area
c_{cf}	Massenverhältnis im Fluid	1	fluid phase mass fraction
C	Konzentration im Fluid	M/L^3	fluid phase concentration
c_s	Adsorbierte Konzentration	1	solid phase concentration
C_f	Wärmekapazität des Fluids	$L^2/K/T^2$	fluid heat capacity
C_s	Wärmekapazität des Festgesteins	$L^2/K/T^2$	rock heat capacity
D	Diffusionskonstante	L^2/T	(solute) diffusivity
D_T	Thermische Diffusionskonstante	L^2/T	thermal diffusivity
D	Dispersionstensor	L^2/T	dispersion tensor
D_{xx} etc.	Komponenten von D	L^2/T	dispersivities
e_f	Innere Energie in Fluidphase	ML^2/T^2	internal fluid phase energy
e_g	Innere Energie in Gasphase	ML^2/T^2	internal gas phase energy
e_s	Innere Energie in fester Phase	ML^2/T^2	internal solid phase energy
g	Gravitationskonstante	L/T^2	constant of gravity
g	Gravitationsvektor	L/T^2	vector of gravity
G	Modellgebiet (1-D, 2-D, 3-D)	-	model region
h	Piezometerhöhe	L	piezometric head
h_c	Kapillardruckhöhe	L	suction head

Symbol	Variable	Einheit	Englische Bezeichnung
H	(Modell-) Höhe (z-Richtung)	L	height
k	Permeabilität	L^2	permeability
\mathbf{k}	Permeabilitätstensor	L^2	permeability tensor
K	Relative Permeabilität (ungesättigt)	1	relative permeability
\mathbf{K}	Durchlässigkeitstensor	L/T	conductivity tensor
K_d	Verteilungskoeffizient	L^3/M	distribution coefficient
K_f	Durchlässigkeitsbeiwert (gesättigt)	L/T	hydraulic conductivity
K_x, K_y, K_z	Komponenten des K-Tensors	L/T	hydraulic conductivities
l	Porengrößenindex	1	pore size index
L	Differentialoperator	-	
L_x, L_y	Modellgebietslängen (horizontal)	L	model-length, -width
m	Mächtigkeit	L	thickness
M_{mol}	Molare Masse	M	molar mass
n	Normalenrichtung (einer Fläche)	-	surface normal direction
N	Anzahl der Unbekannten	-	
p	Gesamtdruck	$M/L/T^2$	total pressure
p_{dyn}	dynamischer Druck	$M/L/T^2$	dynamic pressure
q	allg. Quell- und Senkenterm	M/T	sources / sinks
R	Retardationsfaktor	1	retardation factor
S_0	Speicherkoefizient	1	storativity
S	Sättigung	1	saturation
S_e	effektive Sättigung	1	effective saturation
t	Zeit	T	time
T	Temperatur	K	temperature
\mathbf{T}	Tensor der Transmissivitäten	L^2/T	transmissivity tensor
$T_{1/2}$	Halbwertszeit	T	halflife
\mathbf{u}	Abstandsgeschwindigkeit	L/T	real (interstitial) velocity
\mathbf{u}_f	Fluidgeschwindigkeit	L/T	fluid velocity
\mathbf{u}_s	Festgesteins-Geschwindigkeit	L/T	velocity of solid material
\mathbf{v}	Darcy-Geschwindigkeit	L/T	Darcy-velocity
$\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y, \mathbf{v}_z$	Komponenten von \mathbf{v}	L/T	components of \mathbf{v}
V	Volumen	L^3	volume
X	Bakterienpopulation	M/L^3	microbial mass concentration
x,y	Längen (Koordinatenachsen)	L	length, width
z	Länge (in Richtung von g)	L	height

2. Griechische Anfangslettern

Symbol	Variable	Einheit	Englische Bezeichnung
α	Transferfaktor	1/T	transfer factor
α_L	longitudinale Dispersionslänge	L	longitudinal dispersivity
α_T	transversale Dispersionslänge	L	transversal dispersivity
β	Kompressibilität	T ² L/M	compressibility
β_T	Thermischer Expansionsfaktor	1/K	thermal expansion factor
Δt	Zeitschritt	T	timestep
Δx Δy	Modell-Blocklängen	L	grid spacing
Δz			
ε	(rel.) Genauigkeit (in num. Lösung)	1	(rel.) accuracy (in num. solution)
φ	Porosität	1	porosity
φ_j	ortsabh. Basisfunktionen	-	basisfunctions
κ	Zeitschichtwichtungsfaktor	1	timelevel weighting factor
λ	Zerfalls- Abbaukonstante	bzw. 1/T	decay constant
$\lambda_f \lambda_g \lambda_s$	Thermische Leitfähigkeit in Phasen	ML/K/T ³	thermal conductivity
λ_T	Thermische Leitfähigkeit (gesamt)	ML/K/T ³	thermal conductivity
μ	dynamische Viskosität des Fluids	M/L/T	dynamic viscosity
μ_j	ortsabh. Gewichtsfunktionen	-	weighting functions
$\rho \rho_f$	Fluidichte	M/L ³	density
ρ_b	Trockendichte	M/L ³	bulk density
ρ_s	Gesteinsdichte	M/L ³	rock density
$(\rho c)_f$	Wärmekapazität	M/L/K/T ²	heat capacity
θ	allg. Transportvariable		
θ_r	Restfeuchte	1	residual water content
ω	Überrelaxationsfaktor	1	overrelaxation factor
Ω	Raumdiskretisierung-Operator	-	operator for space discretisation

3. Indizes

Index	bezeichnet
f	Fluid (flüssige Phase)
g	Gasphase
i, j, k	Blockkennzeichnung im Rechteckgitter
min, max	Extremwerte
s	Festgestein ('solid phase')
T	thermisch
x, y, z	Richtungen des Koordinatensystems

4. Sonstige

\mathfrak{R}^N	Raum der Vektoren mit N reellen Zahlen als Komponenten
$\nabla=(\partial x, \partial y, \partial z)$	Nabla-Operator (für 1D-, 2D, 3D mit entsprechenden Auslassungen)