1.13 Modellierung der Grundwasserströmung und des lateralen Stofftransportes

Das Grundwassermodul ist durch folgende Merkmale gekennzeichnet:

- Es können beliebig viele Layer modelliert werden, welche über vertikalen Austausch miteinander in Verbindung stehen. Die einzelnen Layer bzw. Aquifere werden jeweils horizontal zweidimensional im regelmässigen Raster modelliert.
- Es werden für den obersten Grundwasserleiter ungespannte, für die darunterliegenden Schichten gespannte oder ungespannte Verhältnisse angenommen, je nach Druckhöhen im Vergleich zur Aquiferoberkante.
- Es werden Anisotropien für die hydraulischen Leitfähigkeiten zugelassen, jedoch nur in x- und y-Richtung, also ohne Verdrehung der Bezugsrichtung. Dies muss erforderlichenfalls durch Drehen des Koordinatensystems für alle Grids und meteorologischen Stationen erfolgen (im Gegensatz zur Interpolation, wo eine Drehung der Anisotropieellipse möglich ist).
- Die Verbindung mit Oberflächengewässern wird im Modell der ungesättigten Zone über Leakage-Ansätze berücksichtigt. Es kann sowohl In- als auch Exfiltration aus dem Grundwasser modelliert werden. Tritt das Grundwasser an die Geländeoberfläche, so wird auch dieses im Modell der ungesättigten Zone berücksichtigt und es entsteht Oberflächenabfluss (als Schichtquellen interpretierbar).
- Die Lösung der Kontinuitäts- und Bewegungsgleichung erfolgt mit einem impliziten Finite Differenzen Verfahren: Gauss-Seidel-Algorithmus mit wahlweise automatischer oder manueller Ermittlung von Beschleunigungsfaktoren, den sogenannten Succesive Over Relaxations - Faktoren. Für spätere Modellversionen ist vorgesehen, einen effektiveren Gleichungslöser für die direkte Lösung (z.B. PCG: preconditioned conjugated gradients) zu implementiert.
- Der Stofftransport wird ohne Berücksichtigung der Diffusion auf die Wasserströme aufgesetzt, es ist aber möglich, nach der Modellierung auf die berechneten Strömungsfelder den Stofftransport nachträglich aufzusetzen (mit externen Programmen, die hier nicht weiter betrachtet werden)
- räumlich verteilte Parameter für das Grundwassermodell:
  - KX gesättigte horizontale hydraulische Leitfähigkeit (x-Richtung), 1 Grid für jeden Layer, in m/s
  - KY gesättigte horizontale hydraulische Leitfähigkeit (y-Richtung), 1 Grid für jeden Layer, in m/s
  - S0 spezifischer Speicherkoeffizient (S0), 1 Grid für jeden Layer, in m^3/m
  - GK Leakagefaktoren für den Austausch zwischen den Layern, 1 Grid für jeden Layer, in m^{-1}
  - BQ Randzuflüsse (bezogen auf die Vertikale $\rightarrow$ Recharge), 1 Grid für jeden Layer, in m/s
  - BH konstante Druckhöhen, 1 Grid für jeden Layer, in m
  - AQ Aquifermächtigkeit, 1 Grid für jeden Layer, in m

Lösung der Strömungsgleichung

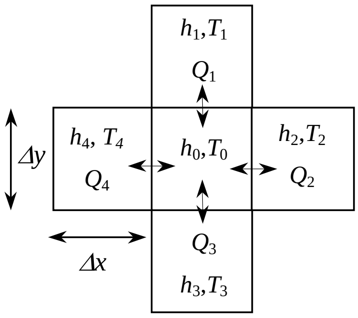
Die Strömungsgleichung wird aus der Kontinuitätsgleichung und aus dem Gesetz von DARCY gewonnen. Die Bilanz der während eines Zeitraums ∂t in ein Volumen $\partial x \cdot \partial y$ hinein oder aus ihm herausströmenden Wassermengen entspricht der Änderung der im Volumen gespeicherten Wassermenge:

$$\mathrm{div}(T\mathrm{grad}h) + q + l_{up}(h_{up} - h) + l_{lo}(h_{lo} - h) = S_0 \frac{\partial h}{\partial t} \tag{123}$$

mit
- T Transmissivität [m^2/s]
- h Druckhöhe im Kontrollvolumen [m]
- q Zugaben/Entnahmen, senkrecht zur Gridzelle [m/s]
- l_{up} Leakagefaktor für Fluss zwischen aktuellem und hangendem Aquifer [s^{-1}]
- h_{up} Druckhöhe im hangenden Aquifer [m]
- l_{lo} Leakagefaktor für Fluss zwischen aktuellem und liegendem Aquifer [s^{-1}]
- h_{lo} Druckhöhe im liegenden Aquifer [m]
- S_0 spezifischer Speicherkeffizient [1/1]

t Zeit [s]

Gleichung (123) enthält neben der eigentlich interessierenden horizonalebenen Strömung noch Terme für den Wasserfluss zwischen hangenden und liegenden Aquifern und dem aktuell betrachteten Aquifer sowie den Term q, welcher Entnahmen, z.B. durch Brunnen, und Zugaben, z.B. die Grundwasserneubildung, berücksichtigt. Es ist zu beachten, dass im ungespannten Fall der Speicherkoeffizient S_0 automatisch durch die aus der Bodenart bestimmbare effektive Porosität n_{eff} ersetzt wird. Um die diskrete Differenzengleichung zu erhalten, wird ein Kontrollvolumen mit diskreten Randlängen Δx und Δy definiert. Ausserdem wird ein finiter Zeitabschnit Δt betrachtet. Für die folgenden Gleichungen werden lokale Indizes zwischen 0 und 4 entsprechend folgender Skizze genutzt.



h_1, T_1 Druckhöhe und Transmissivität in der Zelle 1
Q_1 Fluss zwischen Zelle 0 und Zelle 1
h_2, T_2 Druckhöhe und Transmissivität in der Zelle 2
Q_2 Fluss zwischen Zelle 0 und Zelle 2
h_3, T_3 Druckhöhe und Transmissivität in der Zelle 3
Q_3 Fluss zwischen Zelle 0 und Zelle 3
h_4, T_4 Druckhöhe und Transmissivität in der Zelle 4
Q_4 Fluss zwischen Zelle 0 und Zelle 4
Δx,Δy Zellweite des Grids in x- bzw. y-Richtung

Werden in (123) die Leakage-Terme mit den Zugaben und Entnahmen zum Fluss Q_0 zusammengefasst, wird ferner die Divergenz der Flüsse als Bilanz der Flüsse durch die Seitenwände des Kontrollvolumens sowie durch die Dach- und Bodenflächen dargestellt, so ergibt sich:

$$\Delta t\left(Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_0\right) = \left[h_0(t+\Delta t) - h_0(t)\right] S_0 \Delta x \Delta y \tag{124}$$

mit den Flüssen Q_1 bis Q_4 als

$$\begin{aligned} Q_1 &= \Delta x T_{1,0} \frac{h_1(t') - h_0(t')}{\Delta y} & \qquad Q_2 &= \Delta y T_{2,0} \frac{h_2(t') - h_0(t')}{\Delta x} \\ Q_3 &= \Delta x T_{3,0} \frac{h_3(t') - h_0(t')}{\Delta y} & \qquad Q_4 &= \Delta y T_{4,0} \frac{h_4(t') - h_0(t')}{\Delta x} \end{aligned} \tag{125}$$

Dabei wird angenommen, dass die während des Zeitschritts Δt fliessenden Flüsse durch die zum Zeitpunkt t' (mit $t \le t' \le t+\Delta t$) geltenden Druckhöhen repräsentiert werden. Die zwischen den Zellen 0 und 1, 0 und 2, 0 und 3 bzw. 0 und 4 geltenden Transmissivitäten $T_{1,0}$ bis $T_{4,0}$ werden aus dem harmonischen Mittelwert der jeweiligen Transmissivitäten der beteiligten Zellen gebildet:

$$T_{i,0} = 2\frac{T_i T_0}{T_i + T_0} \tag{126}$$

mit i lokale Indizes zwischen 1 und 4

Die jeweilige Transmissivität ist bei gespannten Verhältnissen das Produkt aus Aquifermächtigkeit und gesättigter hydraulischer Leitfähigkeit in der betrachteten Richtung. X- und y-Richtung können unterschiedliche Leitfähigkeiten haben. In ungespannten Verhältnissen ergibt sich die Transmissivität aus dem Produkt aus der durchflossenen Mächtigkeit und der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit in der betrachteten Richtung.

Die folgenden Umformungen setzen voraus, dass $\Delta x = \Delta y$ ist, dass es sich beim Modellgrid also um ein regelmässiges, quadratisches Raster handelt. Damit vereinfachen sich die Brüche in den Gleichungen (125) entsprechend. Weiterhin wird die Druckhöhe h' zum Zeitpunkt t' dargestellt durch $h(t)$ und $h(t+\Delta t)$:

$$h(t') = (1-\alpha)\cdot h(t) + \alpha \cdot h(t+\Delta t) \tag{127}$$

Der Parameter α bestimmt mit seinem Wertebereich zwischen 0 und 1, ob die Strömungsgleichung explizit (α=0), teilweise implizit (0<α<1) oder voll implizit (α=1) berechnet werden soll. Explizite Lösungen können direkt in einem Schritt bestimmt werden, neigen aber bei zu langen Zeitschritten zu numerischen Instabilitäten, implizite Lösungen können durch iterative oder durch direkte Lösung der entstehenden linearen Gleichungssysteme bestimmt werden. Hier wird ein iteratives Verfahren angewandt, welches für sehr grosse Modellgebiete durchaus vernünftige Rechenzeiten im Vergleich zu Gleichungslösern wie z.B. PCG liefert, zumal das Grundwassermodell gegenüber dem Richardsmodell der ungesättigten Bodenzone vergleichsweise kurze Rechenzeiten in Anspruch nimmt. Für die in hydrologischen Modellen üblichen Zeitschritte von Stunden oder Tagen empfiehlt sich das voll implizite Verfahren mit α=1.0, da ansonsten Schwingungen in den Grundwasserständen zwischen aufeinanderfolgenden Zeitschritten auftreten können.

Werden die Flüsse aus Gleichung (125) nach der Vereinfachung $\Delta x/\Delta y$ = 1.0 in (124) eingesetzt und wird für die $h_0(t')$ die Gleichung (127) genutzt, so folgt nach Isolation von $h_0(t+\Delta t)$, welches die interessierende Grösse ist:

$$h_0(t+\Delta t) = \frac{\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} S_0 \cdot h_0(t) + (F_1 + F_2 + F_3 + F_4) - (1-\alpha)\cdot h_0(t) \cdot (T_{1,0} + T_{2,0} + T_{3,0} + T_{4,0})}{\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} S_0 + \alpha \cdot (T_{1,0} + T_{2,0} + T_{3,0} + T_{4,0})} \quad \textbf{(128)}$$

mit

$$F_1 = T_{1,0} h_1(t') \qquad F_2 = T_{2,0} h_2(t') \qquad F_3 = T_{3,0} h_3(t') \qquad F_4 = T_{4,0} h_4(t') \quad \textbf{(129)}$$

Da sich bei einem kompletten Grid-Durchlauf die Druckhöhen $h_1(t')$ bis $h_4(t')$ der Nachbarzellen 1 bis 4 ändern können, muss Gleichung (129) für das gesamte Grid iterativ solange durchlaufen werden, bis die Änderungen zwischen zwei Iterationschritten an keiner Stelle mehr grösser als eine vorgegebene Schranke ε_{max} (von z.B. 10^{-5} m) sind oder bis eine maximal erlaubte Anzahl an Iterationsschritten n_{iter} erreicht wurde. Beide Parameter werden global in der Steuerdatei vorgegeben. Dabei wird ε_{max} bei gespannten Verhältnissen automatisch um den Faktor 50 vergrössert, um die im Vergleich zu ungespannten Verhältnissen viel geringeren Zu- und Abflüsse zu berücksichtigen, die zum selben Unterschied in der Druckhöhe führen. Für die um die aktuelle Zelle umgebenden Zellen wird in jedem Iterationslauf die Druckhöhe als Ergebnis aus dem letzten Iteratiosschritt herangezogen. Dabei kommt der Geschwindigkeit der Lösungsfindung zugute, dass die Zellen mit den lokalen Indizes 1 und 3 bereits einen Iterationsschritt mehr hinter sich haben, als die anderen beiden Nachbarn, dort also bereits bessere Näherungen für h existieren.

Beschleunigung der Iterationskonvergenz

Um die Iterationsfehler noch schneller minimieren zu können, können Beschleunigungsfaktoren genutzt werden. Dabei wird der Unterschied der Druckhöhen zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten mit einem sogenannten Relaxationskoeffizienten (SOR: sucessive over relaxation) multipliziert. Dieser Faktor kann entweder fest vorgegeben werden, oder er kann automatisch bestimmt werden, indem er in der Steuerdatei als negativer Wert eingetragen wird. In diesem Fall bestimmt das Modell für jeden Punkt während der Iteration aus jeweils 3 aufeinanderfolgenden Iterationsschritten einen Beschleunigungsfaktor:

$$SOR = 1 + \frac{h(t) - h(t-\Delta t)}{h(t) - h(t+\Delta t)} \quad \textbf{(130)}$$

mit SOR Beschleunigungsfaktor, wird bei automatischer Ermittlung zwischen 1 und 2 begrenzt [-]

Wird dieser *SOR*-Faktor zu gross gewählt oder in der automatischen Ermittlung zu gross ermittelt, so kann es in den Druckhöhen zu Schwingungen zwischen aufeinanderfolgenden Zeitschritten kommen. Solche Ereignisse werden in der Bildschirmausgabe angezeigt, damit darauf mit einer Verringerung des *SOR*-Faktors reagiert werden kann.

Leakage zwischen verschiedenen Aquifern

Der Austausch zwischen verschiedenen Aquifern wird durch Leakageansätze berücksichtigt. Nach dem Gesetz von DARCY wird der Fluss entsprechned der Leitfähigkeit der Trennschicht und des hydraulischen Gradienten berechnet. Da aber in der Regel beide Grössen unbekannt sind, werden sie durch demnn Leakage-Faktor *l* ersetzt, der dargestellt werden kann als:

$$l = \frac{k'}{d'} \tag{131}$$

mit l Leakage-Faktor [s^{-1}]
k' Leitfähigkeit in der Trennschicht zwischen den Aquifern [$m \cdot s^{-1}$]
d' Dicke der Trennschicht [m]

Die Leakageflüsse selbst werden wie in Gleichung (123) gezeigt aus der Druckhöhendifferenz der Aquifere und dem Leakage-Faktor berechnet. Die Ergebnisse sind Flüsse in m/s senkrecht zur Fläche der Gridzelle.

Randbedingungen

Es können über Datengrids feste Druckhöhen und/oder Randbedingungen in Form konstanter Zuflüsse bzw. Entnahmen vorgegeben werden. Diese Randbedingungen können für jede Gridzelle einzeln angegeben werden und sind im gesamten Modellauf gültig. Für Zellen mit konstanter Druckhöhe erfolgt keine Berechnung der neuen Druckhöhen nach Gleichung (128). Zuflüsse oder Entnahmen, ein positives Vorzeichen steht für Zuflüsse, werden in m/s senkrecht zur Gridzellenoberfläche angegeben. Damit können auch laterale Randzuflüsse erfasst werden, wenn deren Grössenordnung auf die Grösse der Gridzelle umgerechnet wird. Es ist nicht möglich, zeitlich variable Randbedingungen oder Randbedingungen der 3. Art anzugeben (Linearkobination aus konstanter Druckhöhe und Randzufluss), es sei denn, es werden in den beiden Datengrids für die Randbedingungen gleichzeitig Werte eingetragen. Dann haben diese Zellen sowohl konstante Druckhöhen als auch konstante Zugaben oder Entnahmen, was zu Bilanzproblemen führen kann, wenn die Grössenordungen nicht mit den hydraulischen Eigenschaften des Aquifers zusammenspielen.

Bilanz für den obersten Grundwasserleiter

die Bilanz der Zu- und Abflüsse über die Zellenseiten, den Boden und die Dachfläche wird als effektive Änderungsgeschwindigkeit des Grundwasserspiegels an das Teilmodell der ungesättigten Bodenzone übergeben. Damit hat jenes Teilmodell Informationen über die Veränderung des Grundwasserspiegels innerhalb eines Zeitschrittes. Die Änderunggeschwindigkeit wird berechnet zu

$$\Delta_{GW} = \frac{h(t-\Delta t) - h(t)}{\Delta t} S_0 \tag{132}$$

mit Δ_{GW} Bilanz aus Zu- und Abflüssen senkrecht zur Zellenoberfläche [$m \cdot s^{-1}$]
$h(t\text{-}\Delta t)$ Druckhöhe im vorherigen Zeitschritt [m]
$h(t)$ Druckhöhe am Ende des aktuellen Zeitschrittes [m]
S_0 spezifischer Speicherkoeffizient [-]
Δt Zeitschritt [s]

Stofftransport im Grundwasser

Der Austausch bzw. die Vermischung der Tracer zwischen dem Grundwasser und der ungesättigten Bodenzone wird im Teilmodell der ungesättigten Bodenzone berechnet. Dabei wird der Fluss zwischen der letzten ungesättigten Schicht und dem Grundwasserspiegel als Brutto-Grundwasserneubildung betrachtet, welche eine den Stoffkonzentrationen in der letzten ungesättigten Schicht entsprechende Stofffracht mit sich führt. Bei kapillarem Aufstieg entspricht die Stofffracht dem Produckt aus dem nach oben gerichteten Fluss und der entsprechenden Stoffkonzentration im Grundwasser. Die Mischung bzw. Entmischung und der allfällige radioaktive Zerfall werden nach den in Kapitel 1.14 beschriebenen Gleichungen berechnet.

Innerhalb des Grundwassers erfolgt mit den horizontalen Flüssen ein Stofftransport entsprechend der Konzentrationen in den Herkunftszellen. Dasselbe gilt für vertikalen Transport mit den Leakage-Flüssen. Nach der Berechnung der Flüsse wird für jeden Fluss die jeweilige Stofffracht berechnet. Die Bilanz aus altem Stoffinhalt und den Zu- bzw. Abflüssen (in kg bzw. in relativen Einheiten) wird durch die zum Zeitpunkt *t* in der Zelle vorhandene Wassermenge geteilt, um die neue Konzentration zu berechnen:

$$\begin{aligned} c_0(t+\Delta t) = {} & c_0(t)\cdot\Delta x\cdot\Delta y\cdot n\cdot d + Q_1\cdot c_{1\cup 0}(t) + Q_2\cdot c_{2\cup 0}(t) + Q_3\cdot c_{3\cup 0}(t) + Q_4\cdot c_{4\cup 0}(t) + \\ & Q_{up}\cdot c_{up\cup 0}(t) + Q_{lo}\cdot c_{up\cup 0}(t) + Q_0\cdot c_0(t) \end{aligned} \tag{133}$$

mit

n	Porosität [-]
d	Mächtigkeit des Aquifers (gespannte Aquifer) bzw. Grundwasserstand über der Aquifersohle bei ungespannten Aquiferen [m]
$c_{1\cup 0}$ … $c_{4\cup 0}$	Tracerkonzentration in den 4 Herkunftszellen je nach Fliessrichtung kann das entweder die aktuelle Zele (Index 0) oder eine der 4 Nachbarzellen sein (Inizes 1 bis 4), Einheit in [10^3kg/m^3] oder als relative Konzentrationen, je nach Definition in der Steuerdatei
$c_{up\cup 0}$	Tracerkonzentrationen im hangenden oder im aktuellen Aquifer, je nach Fliessrichtung (wenn hangender Aquifer vorhanden, sonst 0), Einheiten wie c_1 … c_4
$c_{lo\cup 0}$	Tracerkonzentrationen im liegenden oder im aktuellen Aquifer, je nach Fliessrichtung (nur wenn liegender Aquifer vorhanden, sonst 0), Einheiten wie c_1 … c_4
c_0	Tracerkonzentration im Randzufluss (für Entnahmen unwichtig, da keine Konzentration$nderung eintritt), Einheiten wie oben
Q_1 … Q_4	Flüsse zwischen den Zellen 1 bis 4 und der aktuellen Zelle (Index 0) [m^3]
Q_{up}, Q_{lo}	Leakageflüsse, wenn hangende (up) oder liegende (lo) Aquifere vorhanden sind [m^3]
Q_0	Randzufluss [m^3]

Die Flüsse Q_1 bis Q_4 in Gleichung (133) werden berechnet zu:

$$\begin{aligned} Q_1 &= k_{S,1}\frac{h_0-h_1}{\Delta y}\cdot\Delta x\cdot\Delta t\cdot\frac{d_0+d_1}{2} \\ Q_2 &= k_{S,2}\frac{h_0-h_2}{\Delta x}\cdot\Delta y\cdot\Delta t\cdot\frac{d_0+d_2}{2} \\ Q_3 &= k_{S,3}\frac{h_0-h_3}{\Delta y}\cdot\Delta x\cdot\Delta t\cdot\frac{d_0+d_3}{2} \\ Q_4 &= k_{S,4}\frac{h_0-h_4}{\Delta x}\cdot\Delta y\cdot\Delta t\cdot\frac{d_0+d_4}{2} \end{aligned} \tag{134}$$

mit

$k_{S,1}$ … $k_{S,4}$	gesättigte laterale hydraulische Leitfähigkeiten der Herkunftszellen [m/s]
h_0 … h_4	Druckhoehen in den Zellen 0 bis 5 [m]
d_0 … d_4	durchflossene Mächtigkeiten in den Aquiferen in den Zellen 0 bis 5

Die in Gleichung (133) benötigte Wassermenge in der Zelle mit dem lokalen Index 0 kann sowohl aus der Bilanz der Zu- und Abflüsse mit der Wassermenge am Beginn des Zeitschrittes als auch aus der Druckhöhe am Ende des Zeitschrittes berechnet werden. Weicht letzterer Wert vom ersteren ab, so werden die

Massenflüsse auf den letzteren Wert hin reduziert. Auf diese Weise können Akkumulationen von numerischen Ungenauigkeiten, unter anderem hervorgerufen durch Verwendung der lokalen Leitfähigkeiten in Gleichung (134), ebenso verhindert werden wie die Bilanzreinheit gewährleistet wird.