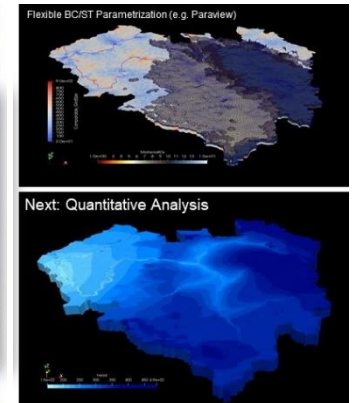
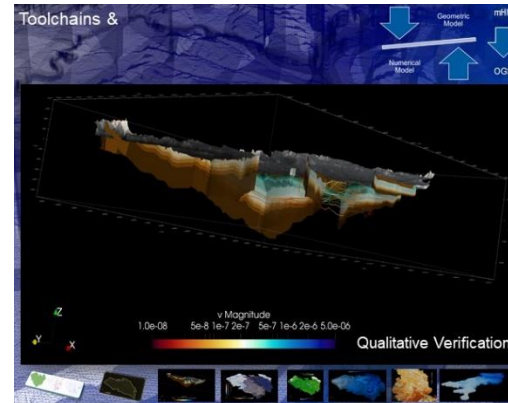


„Grundwassersysteme und Numerik“ Veranstaltung im Modul Hydrosystemanalyse

- Einführung in die Veranstaltung /Modelltheorie

Prof. Dr. Olaf Kolditz
Dr. Erik Nixdorf

23.04.2021



Veranstaltungsplan

Datum	No	Thema	Dozent	Übung
16.04.2021	1	V1: Einführung in die Veranstaltung	Nixdorf	
23.04.2021	2	V2: Wiederholung Strömungsgleichungen der Grundwasserhydraulik	Nixdorf	
30.04.2021	3	V3: Numerische Lösungsverfahren (FDM/FEM)	Kolditz	
07.05.2021	4	V4: Geographische Informationssysteme in der Grundwassermodellierung	Nixdorf	
14.05.2021	5	Ü5: GIS in Grundwassermodellierung	Nixdorf	x
21.05.2021	6	VÜ6: Randbedingungen und Modellparameter	Nixdorf	(x)
04.06.2021	7	V7: Selke Modell: Grundlagen	Nixdorf	
11.06.2021	8	E8: Vislab Exkursion	Kolditz	
18.06.2021	9	Ü9: Selke Modell: Präprozessierung der Eingabegeometrien I	Nixdorf	x
25.06.2021	10	Ü10: Selke Modell: Datenkonvertierung und Modellaufbau	Nixdorf	x
02.07.2021	11	V11: Selke Modell: Kalibrierung und Optimierung	Nixdorf	
09.07.2021	12	Ü12: Selke Modell: Kalibrierung und Optimierung	Kolditz	x
16.07.2021	13	V13: Theoriegeleitete datenbasierte Methoden	Nixdorf	
23.07.2021	14	Ü14: Vorbereitung Klausur	Kolditz	x

- **Struktur:** 14 Veranstaltungen a 90 min: 8 Vorlesungen, 5 Übungen, 1 Exkursion

- **Zeit:** Freitag, 4.DS: 13:00-14:30 Uhr

- **Raum:** Bis auf Weiteres Digital

<https://ufz.collocall.de/html5client/join?sessionToken=skwuewowzqle7zix>

Zugangscode: 237120

- **Dozenten:** Professor Olaf Kolditz, Erik Nixdorf

Arbeitsschwerpunkte

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

Lehrveranstaltungen

Aktuelle Lehrveranstaltungen

Hydrosystemanalyse (TU Dresden)

Catchment Scale Groundwater Modelling (GRAES, Peking)

Vergangene Lehrveranstaltungen

- Hydrological and Hydrogeological Field Methods (Graduiertenschule HIGRADE)

Dr. Erik Nixdorf

→ Department Umweltinformatik

→ AG Hydroinformatik

Department Umweltinformatik
Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung - UFZ
Permoserstrasse 15
04318 Leipzig

Tel.: +49 341 235 - 4669

✉ erik.nixdorf@ufz.de



Veranstaltungsplan

Datum	No	Thema	Dozent	Übung
16.04.2021	1	V1: Einführung in die Veranstaltung	Nixdorf	
23.04.2021	2	V2: Wiederholung Strömungsgleichungen der Grundwasserhydraulik	Nixdorf	
30.04.2021	3	V3: Numerische Lösungsverfahren (FDM/FEM)	Kolditz	
07.05.2021	4	V4: Geographische Informationssysteme in der Grundwassermodellierung	Nixdorf	
14.05.2021	5	Ü5: GIS in Grundwassermodellierung	Nixdorf	x
21.05.2021	6	VÜ6: Randbedingungen und Modellparameter	Nixdorf	(x)
04.06.2021	7	V7: Selke Modell: Grundlagen	Nixdorf	
11.06.2021	8	E8: Vislab Exkursion	Kolditz	
18.06.2021	9	Ü9: Selke Modell: Präprozessierung der Eingabegeometrien I	Nixdorf	x
25.06.2021	10	Ü10: Selke Modell: Datenkonvertierung und Modellaufbau	Nixdorf	x
02.07.2021	11	V11: Selke Modell: Kalibrierung und Optimierung	Nixdorf	
09.07.2021	12	Ü12: Selke Modell: Kalibrierung und Optimierung	Kolditz	x
16.07.2021	13	V13: Theoriegeleitete datenbasierte Methoden	Nixdorf	
23.07.2021	14	Ü14: Vorbereitung Klausur	Kolditz	x

Angewandte Grundwassermodellierung

Modellierung

Konzepte

Mathematik

Simulation

Werkzeuge

Arbeitsabläufe

Ausblick und Exkursionen

- **Vorlesungsmaterial:**

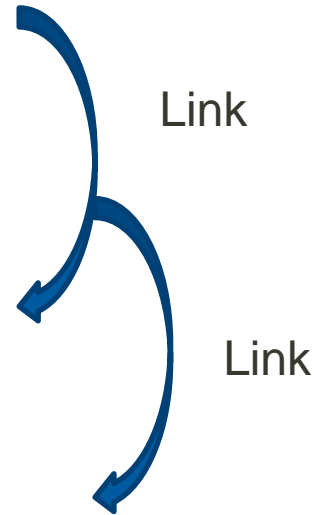
- <https://www.ufz.de/index.php?de=40426>

- **Übungen:**

- <https://www.ufz.de/index.php?de=40426>
 - <https://git.ufz.de/nixdorf/angewandte-grundwassermodellierung>

- **Tutorial Daten und Videos:**

- <https://nc.ufz.de/f/123870633>
 - **Pw: grundwasser**



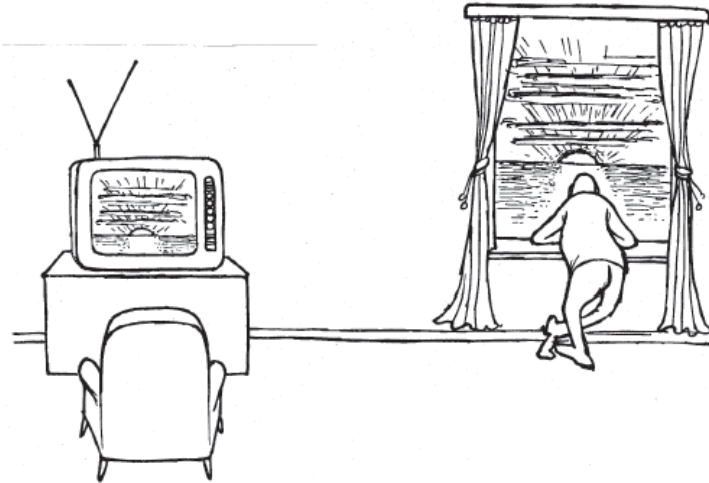
Empfohlene Literatur

- Anderson, M.P. & Woessner, W. W. (1992): "Applied Groundwater Modelling", Academic Press, San Diego
 - Domenico, P.A. & Schwartz F.W. (1998): "Physical and Chemical Hydrogeology", John Wiley & Sons, New York.
 - Wang & Anderson (1995): Introduction to Groundwater Modeling: Finite Difference and Finite Element Methods, Academic Press
 - Kinzelbach & Rausch: Grundwassermodellierung: Eine Einführung mit Übungen, Gebrüder Borntraeger
 - Jacob Baer (1988): Dynamics of Fluids in Porous Media. Dover Publications Inc.
 - Bernward Hölting und Wilhelm G. Coldewey. Hydrogeologie: Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie.
-
- Karl Popper (1934) Logik der Forschung. Zur Erkenntnistheorie der modernen Naturwissenschaft.
 - Herbert Stachowiak (1973): Allgemeine Modelltheorie

Der Kurs soll ihre Fähigkeiten erweitern, Methoden der numerischen **Modellierung** zur Beantwortung **geeigneter** Fragestellungen im Bereich der **Grundwasserhydrologie** anzuwenden:

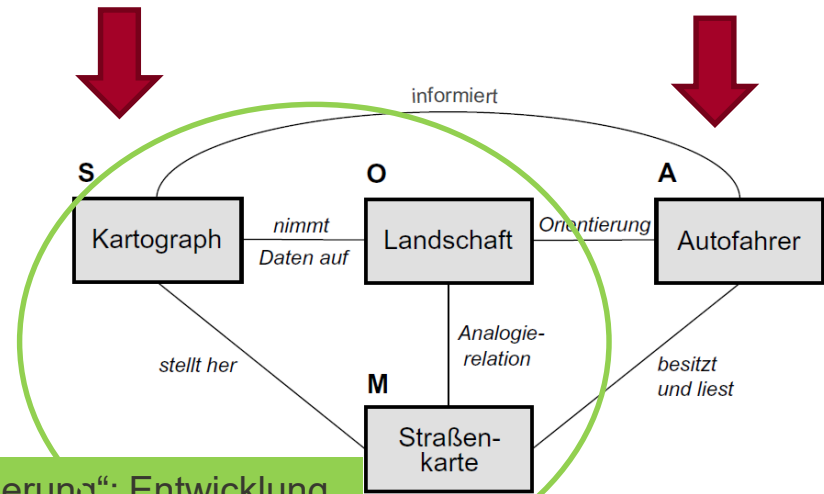
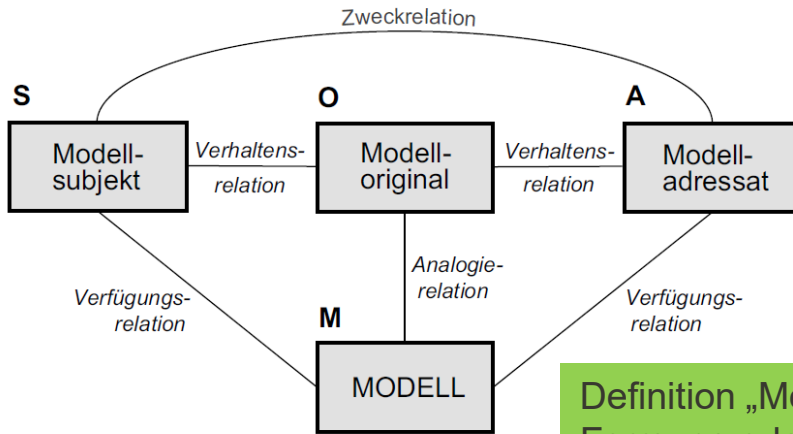
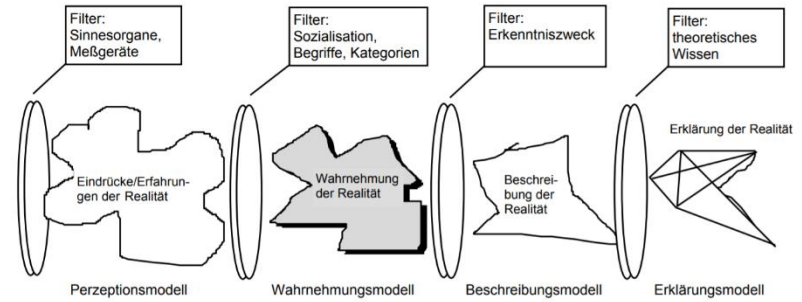
- Erlernen, wie man ein geeignetes Modell zur Simulation von Problemen in Grundwassersystemen beschreibt, auswählt und parametrisiert
- Erlernen der Verwendung von **QGIS** zur Definition der Modellgeometrie und zur Generierung des FEM-Netzes
- Erlernen der Verwendung der Software **ParaView** zur Manipulation zur Netzgenerierung numerischer Modelle
- Lernen, wie man verschiedene Modellansätze und Arten von Randbedingungen in der Modellumgebung **OpenGeoSys** (OGS) einrichtet
- Lernen, wie man OGS (sowie die ergänzenden Softwarepakete QGIS und ParaView) für eigene Problemstellungen nutzen zu können

Modelltheorie



Definition Modell

- **Modell:** (vereinfachendes) Abbild einer (partiellen) Realität, dem Original
- „Modell ist stets **Modell-wovon-wozu-für wen.**“ (Steinmüller)



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

Peters, 1998

Definition Modell -3 Hauptmerkmale Stachowiak 1973

- **Abbildungsmerkmal**

- Modelle sind stets Modelle von etwas, nämlich Abbildungen, Repräsentationen natürlicher oder künstlicher Originale die selbst wieder Modelle sein können

- **Reduktionsmerkmal**

- Modelle erfassen im allgemeinen nicht alle Attribute des durch sie repräsentierten Originals, sondern nur solche, die den jeweiligen Modellerschaffern und/oder Modellbenutzern relevant scheinen

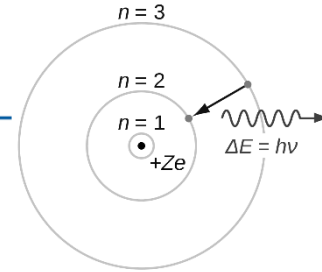
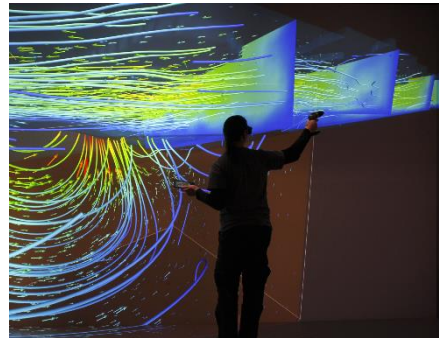
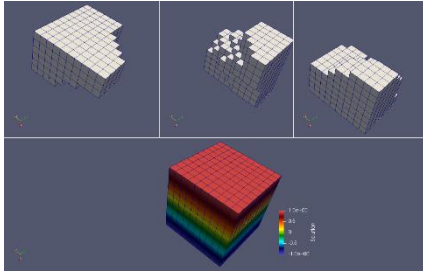
- **Pragmatismusmerkmal**

- Modelle sind ihren Originalen nicht per se eindeutig zugeordnet. Sie erfüllen ihre Ersetzungsfunktion für **bestimmte Subjekte** innerhalb **bestimmter Zeitintervalle** und unter **Einschränkung auf bestimmte Operationen**

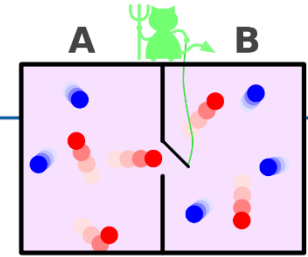
Modellarten

- Gedankenexperimente/Analogien
- Physikalische Modelle
- **Abstrakte Modelle** (typischerweise (aber nicht nur) mit dem Methodenapparat der Mathematik)

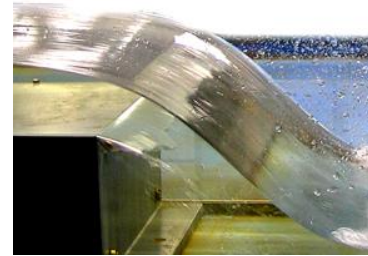
$$v(t) = gt \quad \rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p + \mu \Delta \vec{v} + \vec{f}$$



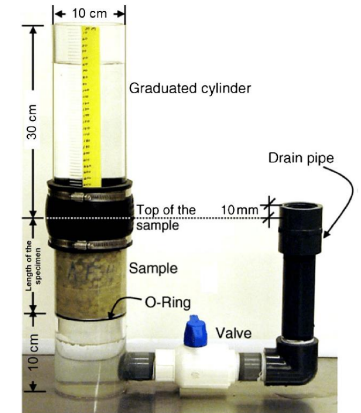
<https://tinyurl.com/4c2pjzya>



<https://tinyurl.com/c4zsdvkx>



<https://tinyurl.com/js8ctw>



<https://tinyurl.com/hsdw6jnk>

Modelloperationen

- Modelle werden aus unterschiedlichsten Gründen zur Originalrepräsentation herangezogen:

- Demonstrationsmodelle
- Experimentalmodelle
- Theoretische Modelle
- Operative/Prognosemodelle



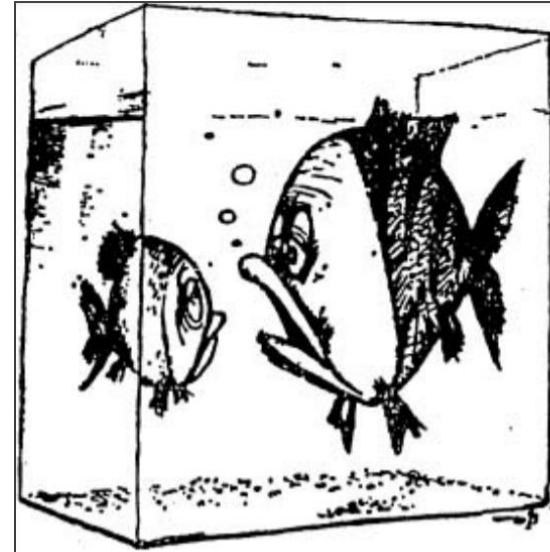
<https://tinyurl.com/fs3ajshj>



- Die Anzahl der Motive kann sich auch überschneiden → z.B. **mathematisches Grundwassermodell**
- **Simulation:** Experiment am Modell

Modellgrenzen

- Relative Grenzen ergeben sich aus dem Reduktions und Pragmatismusmerkmal von Modellen.
- Besitzt mein Modell die Attribute des Originals um die Operation (Fragestellung) zu simulieren?
- Können diese Grenzen durch eine Veränderung des Modellansatzes so verschoben werden, dass das Modell seinen Zweck erfüllt?
- Gelten absolute Modellgrenzen (z.B. Eingeschränkte Objektivierbarkeit des Originals, Einschränkungen der Strukturwissenschaft Mathematik als Grundlage der Modellbildung)



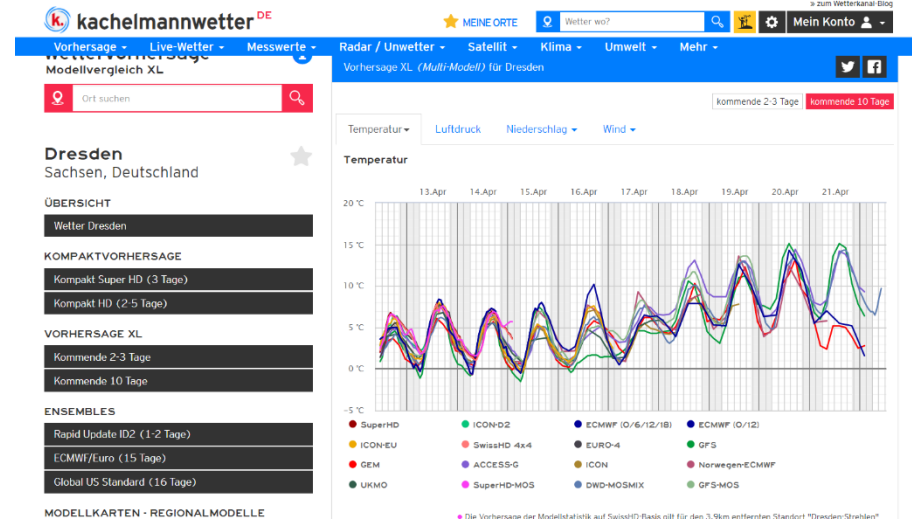
Die Welt, mein Sohn, ist ein großer Kasten voller Wasser.

Operative/Prognosemodelle



<https://kitmetricslab.github.io/forecasthub/forecast>

- Was sind die Modellgrenzen?
- Wie überprüfen wir Modelle?



<https://kachelmannwetter.com/de/vorhersage/2935022-dresden/xtrend/euro/temperatur>

Validierung von Modellen

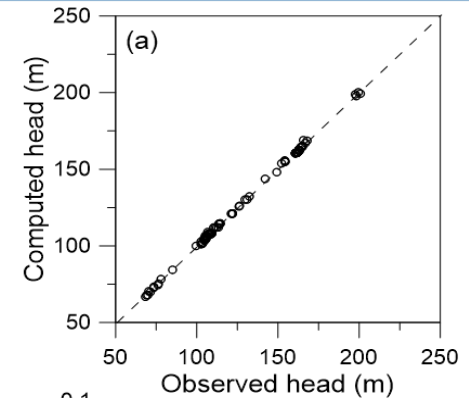
- **Validierung** eines Modells hat zum Ziel, eine Aussage über die Gültigkeit eines Modells für seinen Anwendungszweck, die Abbildung von Eigenschaften des Originals, zu treffen → Stimmt das Modell?

1. Verifizierung der Modellergebnisse mit Beobachtungen

- **Induktionsproblem** (*Wieviele Äpfel muss man fallen lassen um das Newtonsche Gravitationsgesetz zu beweisen?*)

2. Falsifizierung der Modellergebnisse mit Beobachtungen

- Voraussetzung **Falsifizierbarkeit** des Modells bzw. der Modellergebnisse „*Das Evolutionsmodell sagt, dass alle Schwäne weiß sind*“ vs. „*Ein Modell für die Wetterprognose auf Trappist-1 e für morgen*“



Poppers Schwarze Schwäne
<https://tinyurl.com/44vnm4up>
www.ufz.de

Mathematische Modelle zur Grundwassermodellierung

Entwicklung eines abstrakten Modellen

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

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

Konzeptionelles Modell

Mathematisches Modell

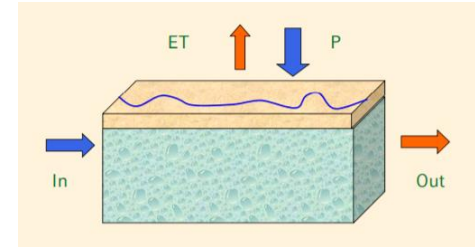
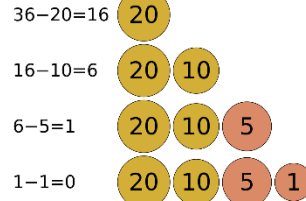
Analytisch

Vereinfachte Gleichungen ermöglichen formale direkte Lösung

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

Heuristisch

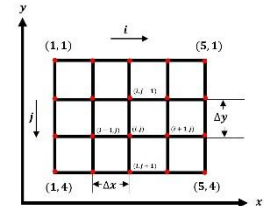
Trial & Error Lösung der Gleichungen gemäß bestimmter Strategie



Numerisch

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

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



Grundwassermodelle: Warum?

- Beispielhafte hydrologische Fragestellungen für einen Grundwassermodelleinsatz:

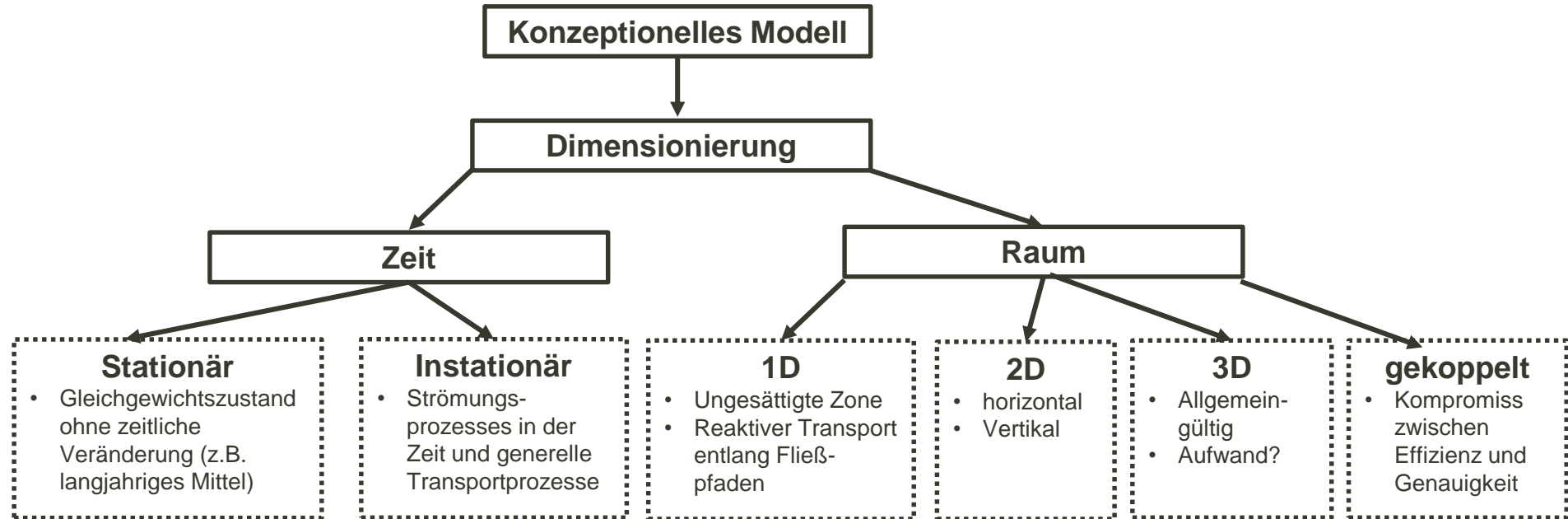
Art des Problems	Motivation der Studie
Untersuchung des Grundwasserfließverhaltens	Untersuchung der Prozesszusammenhänge
	Erarbeitung einer effektiven Messstrategie
Untersuchung von Aquifereigenschaften	Pumpversuch Analyse
	Quantifizierung valider Parametersätze
Verständnis der Vergangenheit	Beschreibung historischer Entwicklungen im Aquifersystem
	Bestimmung des natürlichen Ausgangszustands im Aquifersystem
Verständnis der Gegenwart	Einfluss von Brunnen auf Oberflächengewässer
	Ausweisung von Schutzzonen um Trinkwasserbrunnen oder Schadstoffquellen
	Zuweisung von nachhaltigen Wassernutzungsmengen/IWRM
Verständnis der Zukunft	Bestimmung der Resilienz gegenüber klimatischen Veränderungen
	Bewertung der hydrologischen Tragfähigkeit ökonomischer Entwicklungspläne

Auswahl des Grundwassermodells

Ein paar Fragen für die Modellauswahl:

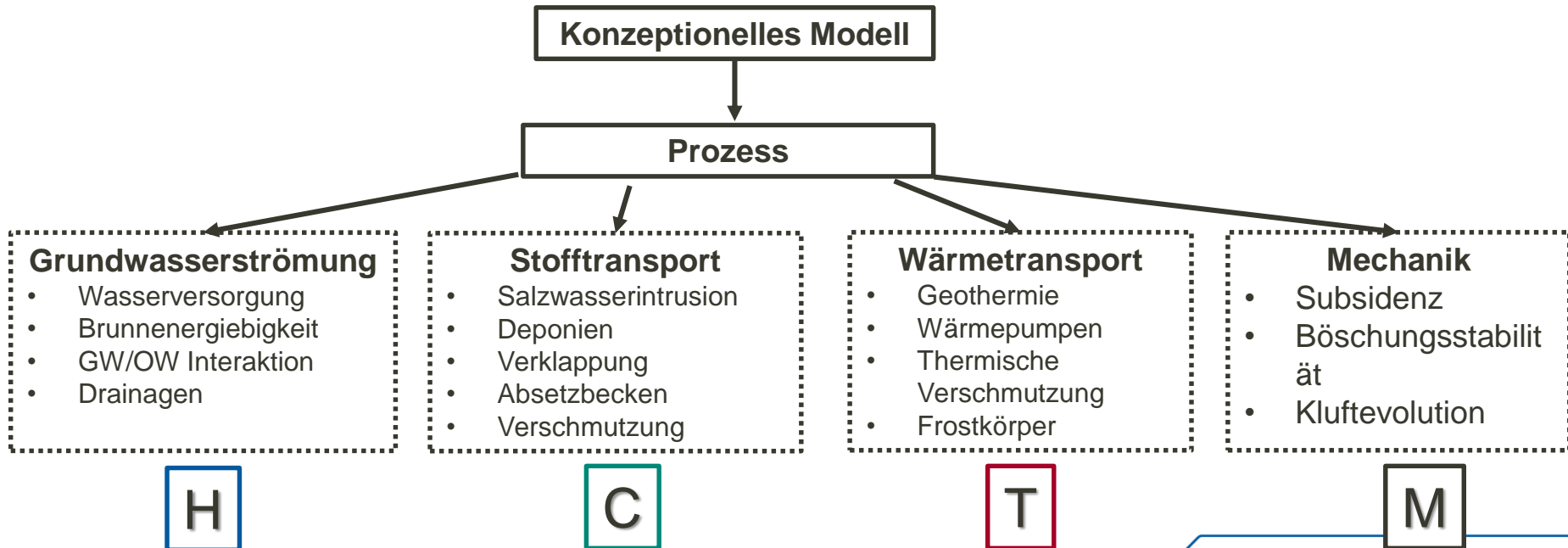
- Wurde die Genauigkeit des Codes gegen eine oder mehrere analytische Lösungen verifiziert ?
- Enthält das Modell **die** Gleichungen, die ich für mein Problem lösen muss?
- Wurde der Code in anderen Feldstudien verwendet?
- Habe ich die Daten, um eine Simulation mit diesem Modell aufzusetzen?

Modelauswahl: Dimensionen



Modelauswahl: Prozesse

- Welche Prozesse soll das Modell abbilden (Überlegung Konzeptionelles Modell, kann eine Auswahl getroffen werden:



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

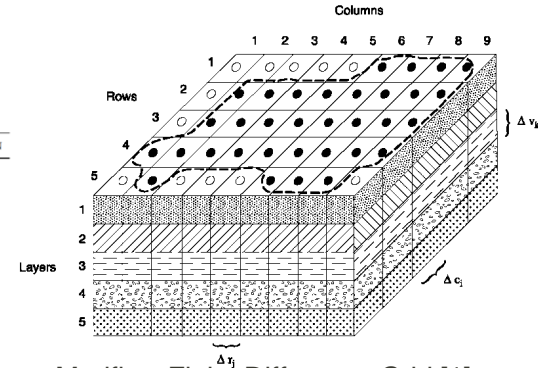
Modelauswahl: Prozesse III

- 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...)

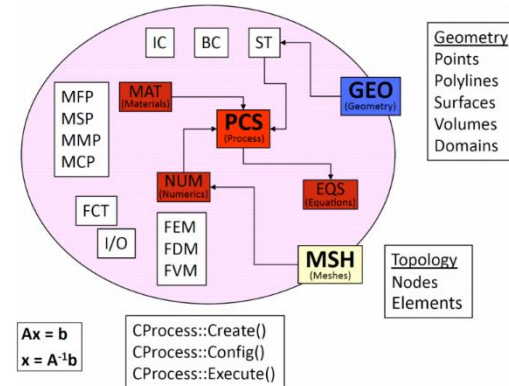
Programmpakete

Table 1 A comparison of the key flow and transport features of reactive transport modeling codes

Capabilities/features	PHREEQC	HPI/HPx	PHITS	OpenGeoSys	HYTEC	ORCHESTRA	TOUGHREACT	eSTOMP	HYDROGEOCHEM	CrunchFlow	MIN3P	PFLOTRAN
Dimensions	ID	1,2,3D	1,2,3D	1,2,3D	1,2,3D	ID	1,2,3D	1,2,3D	1,2,3D	1,2,3D	1,2,3D	1,2,3D
Flow												
Saturated flow	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
Richards equation	No	Yes	No	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	No	Yes	Yes
Multiphase-												
multicomponent flow	No	No	No	No	Yes	No	Yes	Yes	Yes	No	No	Yes
Variable density flow	No	No	Yes	Yes	No	No	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	No
Non-isothermal flow	No	No	No	Yes	No	No	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
Transport												
Advection	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
Molecular diffusion	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
Electrochemical												
migration	Yes	No	No	No	No	Yes	No	No	No	Yes	Yes	No
Dispersion tensor	Diagonal	Diagonal	Diagonal	Diagonal	Diagonal	Diagonal	No	Diagonal	Full	Diagonal	Diagonal	Diagonal
Gas phase advection	No	Yes	No	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
Gas phase diffusion	No	Yes	No	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes
Colloids	Yes	No	No	Yes	Yes	Yes	Yes	No	Yes	No	No	Yes
Multiple continua	Yes	Yes	No	Yes	Yes	Yes	Yes	No	No	Yes ^a	Yes ^b	Yes



Modflow Finite Difference Grid [1]



Object-orientated structure of OGS-project [2]

- Eine Vielzahl verschiedener Modelle ist auf den Markt mit unterschiedlichen Funktionalitäten
- Es gibt keine “eierlegende Wollmilchsau”

Kommerzielle Modelle die Sie vlt einmal benutzen



3D FLOW + MASS

~5k Euro



Groundwater Modeling System

Based on the free USGS MODFLOW

2k to 11k Euro



(basiert auf MODFLOW)

1.5k to 5.5k USD

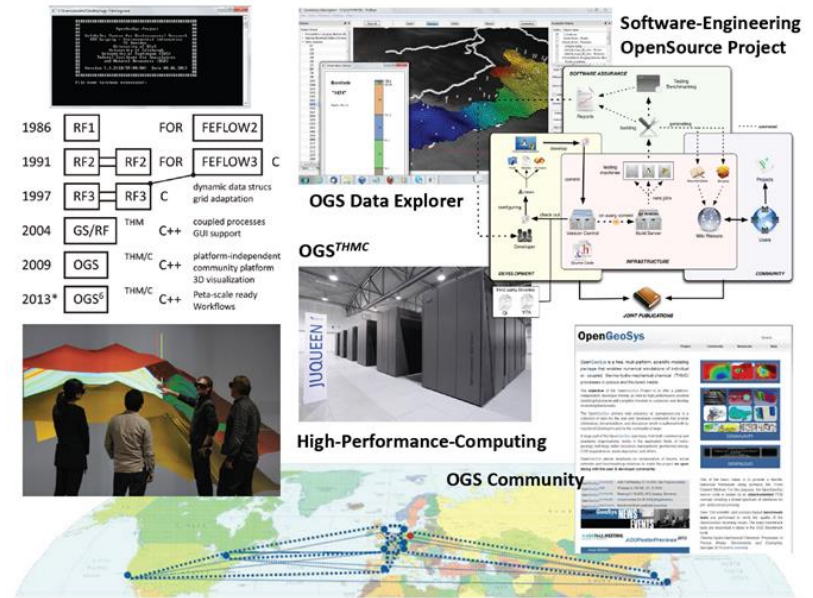


10k Euro + jedes Modul ~5k



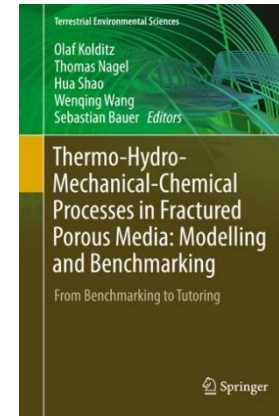
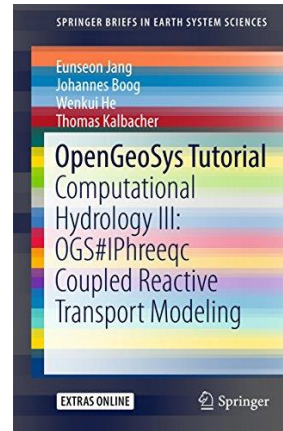
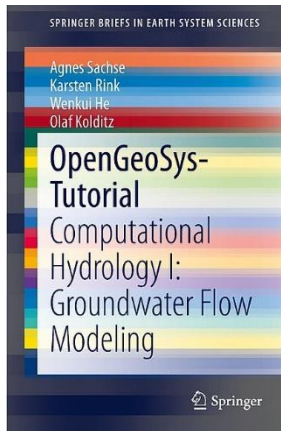
1k to 6k USD + Module

- Wissenschaftliches Open-Source-Projekt zur Entwicklung von numerischen Methoden zur Simulation von thermo-hydro-mechanisch-chemischen (THMC) Prozessen in porösen und geklüfteten Medien
 - Implementiert in C++
 - Objektorientiert mit Fokus auf die numerische Lösung von gekoppelten Mehrfeldproblemen (Multiphysik)
 - Anwendungsgebiete von OGS: CO₂-Sequestrierung, Geothermie, Wasserressourcenmanagement, Hydrologie und Abfallablagerung
- Übersetzt mit



OpenGeoSys: Dokumentation

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



Modellnutzung: Kurz

Präprozessierung

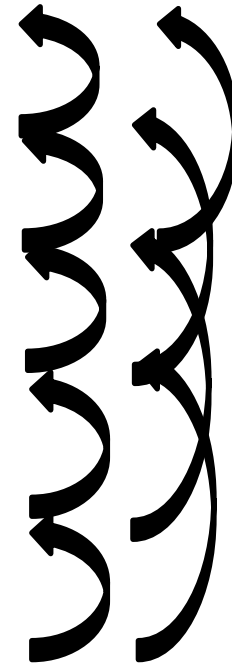
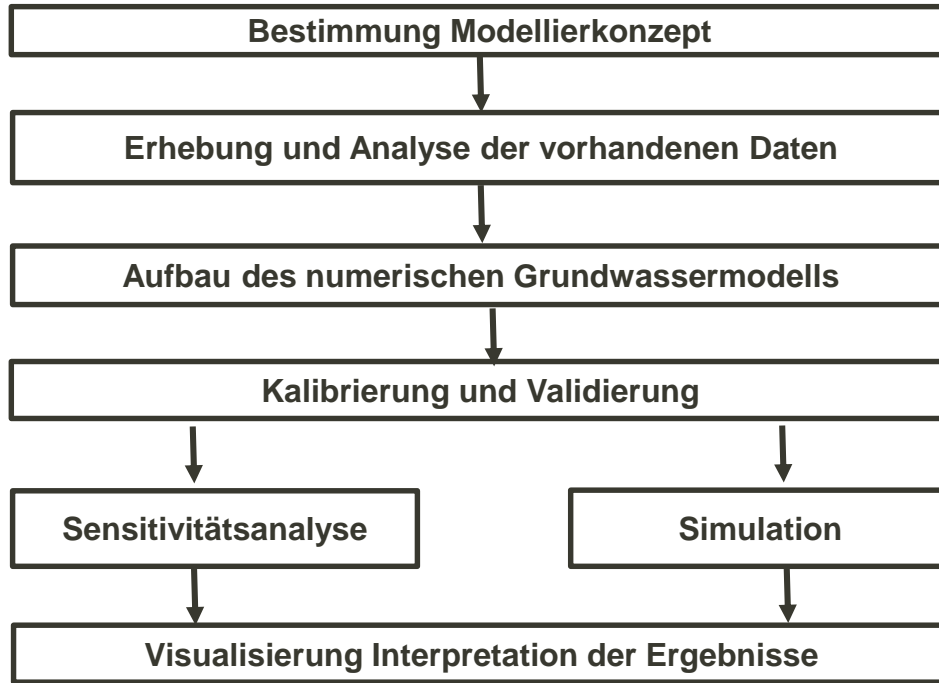
Wir abstrahieren das Problem und diskretisieren in Raum und die Zeit.

Simulation

Wir bilden den physikalischen Prozess mit mathematischen Methoden nach

Postprozessierung
(Visualization)

Wir interpretieren und analysieren die Simulationsergebnisse



**Numerische
Modellerung ist ein
iterativer Prozess!**