

“Regionale Grundwassersysteme“

Veranstaltung im Modul Modellierung von Hydrosystemen

- Übung: Regionale Grundwassermodellierung

Prof. Dr. Olaf Kolditz

Dr. Erik Nixdorf

25.06.2023

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

 - I. Übung mit OpenGeoSys und ParaView
 - I. Analytische Lösungen vs. OpenGeoSys

 - II. Klausurfragen...
-

Einleitung

- Die Übung soll Ihnen einen Eindruck vermitteln, wie Simulationen mit OpenGeoSys mit analytischen Ergebnissen überprüft werden können
- 2 Übungsteile: 1) 2D Profilmodell : Grundwasserströmung **ohne** Grundwasserneubildung
2) 2D Profilmodell: Grundwasserströmung **mit** Grundwasserneubildung
- Die Daten liegen wie immer auf der Cloud
- Diese Übung setzt voraus, dass sie Grundlagen über den Aufbau der **OpenGeoSys6** Eingangsdatei (*.prj Datei) sowie der Nutzung von **ParaView** besitzen

Modellnutzung: Kurz

Präprozessierung

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

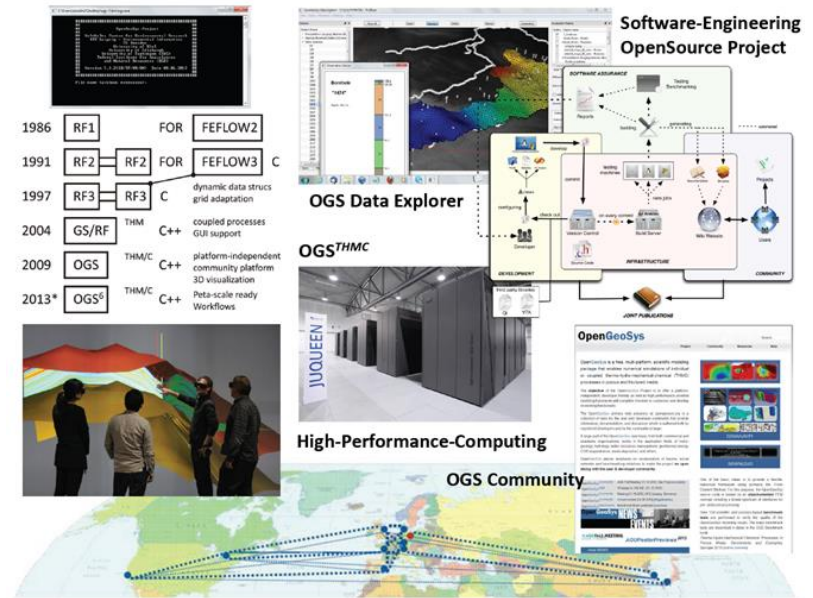
Simulation

Wir bilden den physikalischen Prozess mit mathematischen Methoden nach

Postprozessierung
(Visualization)

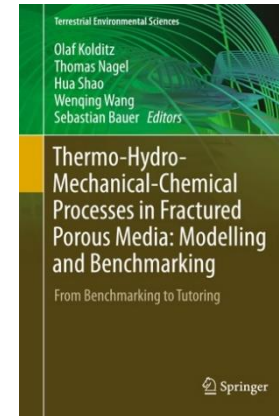
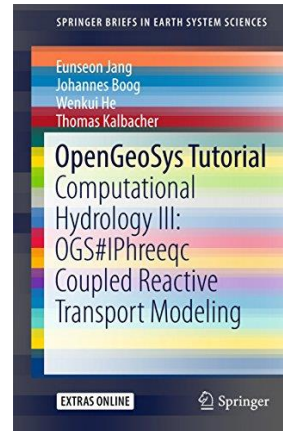
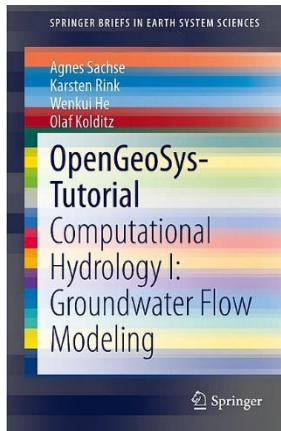
Wir interpretieren und analysieren die Simulationsergebnisse

- 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/>



OpenGeoSys Documentation

https://discourse.opengesys.org

OpenGeoSys
OPEN-SOURCE MULTI-PHYSICS

Releases Docs Publications [Sign Up](#) [Log In](#)  

all categories ▾ all tags ▾ **Categories** Latest Top

Category Topics

Announcements 52



Here we post about OpenGeoSys software releases and announce meetings, workshops, new books, etc.

Usability 121



Share your user experience with OpenGeoSys and provide helpful tips for other users.

Uncategorized 56



Topics that don't need a category, or don't fit into any other existing category.

Site Feedback and help 10




Discussion about this site, its organization, how it works, and how we can improve it.


Mailing List Archives 296



This is an archive of all mailing list posts from the Google Mailing lists [ogs-users](#) and [ogs-devs](#) as of 2018-12-04.


Latest


 **Welcome to Discourse** 0
Dec '18

 **Kozeny Carman implementation** 1
[Usability](#) ogs6 2d


 **Mismatch of results** 3
[ogs-users](#) ogs6 7d

 **OGS5 configuration** 1
[ogs-users](#) ogs5 9d

 **Web site about OGS5 environment configuration** 0
[ogs-users](#) ogs5 10d

 **Import OpenGeoSys?** 2
13d

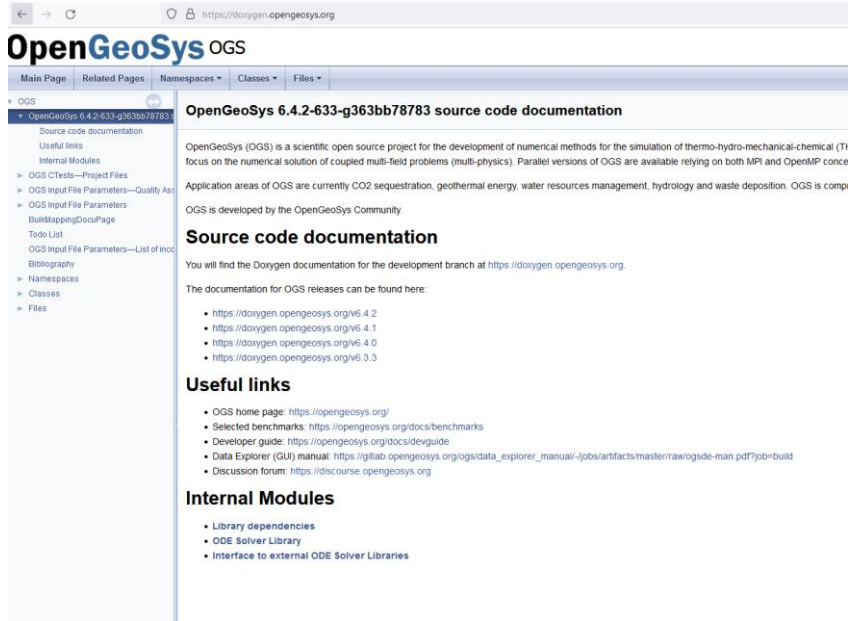
 **Gmsh geo to gli** 0
[mailing-list](#) 13d

 **Heterogeneous material such as position-dependent Youngs modulus** 5
[Usability](#) 22d

OpenGeoSys Documentation

```
/**
 * \brief Exemplarische Funktion
 *
 * Diese Funktion gibt den übergebenen Parameter
 * auf der Konsole aus.
 *
 * \param parameter Auszugebender Parameter
 * \return Status-Code
 */
int funktion(int parameter)
{
    printf("Parameter: %d", parameter);

    return 0;
}
```



OpenGeoSys OGS

Main Page | Related Pages | Namespaces | Classes | Files

OpenGeoSys 6.4.2-633-g363bb78783 source code documentation

OpenGeoSys (OGS) is a scientific open source project for the development of numerical methods for the simulation of thermo-hydro-mechanical-chemical (THM) coupled multi-field problems (multi-physics). Parallel versions of OGS are available relying on both MPI and OpenMP.

Application areas of OGS are currently CO₂ sequestration, geothermal energy, water resources management, hydrology and waste deposition. OGS is developed by the OpenGeoSys Community.

Source code documentation

You will find the Doxygen documentation for the development branch at <https://doxygen.opengeosys.org>.

The documentation for OGS releases can be found here:

- <https://doxygen.opengeosys.org/v6.4.2>
- <https://doxygen.opengeosys.org/v6.4.1>
- <https://doxygen.opengeosys.org/v6.4.0>
- <https://doxygen.opengeosys.org/v6.3.3>

Useful links

- OGS home page: <https://opengeosys.org/>
- Selected benchmarks: <https://opengeosys.org/docs/benchmarks>
- Developer guide: <https://opengeosys.org/docs/devguide>
- Data Explorer (GUI) manual: https://gitlab.opengeosys.org/ogs/data_explorer_manual/-/jobs/artifacts/master/raw/ogsde-man.pdf?job=build
- Discussion forum: <https://discourse.opengeosys.org>

Internal Modules

- Library dependencies
- ODE Solver Library
- Interface to external ODE Solver Libraries

- Source Code Documentation with **Doxygen**

OpenGeoSys Kontrollstruktur

- Zentraler Teil vom (kompilierten OGS) ist das Kommandozeilentool (ogs.exe)
- Gegenwärtig ist es in der Version 6.4.x verfügbar (bitte runterladen auf <https://www.opengeosys.org/releases/>)
- 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



```
E:\PhD_Model\RTH_Development\OGS#\PHQC\RTH Tutorial\wetland\ogs.exe
#####
||| | | |
||| OpenGeoSys-Project |||
|||
||| Helmholtz Center for Environmental Research |||
||| UFZ Leipzig - Environmental Informatics |||
||| TU Dresden |||
||| University of Kiel |||
||| University of Edinburgh |||
||| University of Tuebingen (ZRG) |||
||| Federal Institute for Geosciences |||
||| and Natural Resources (BGR) |||
|||
||| Version 5.5 (UL/ML/AN) Date 08.12.2014 |||
|||
#####
File name (without extension): wetland
```

Kommandozeilen-Tool

OGS: Conceptual Structure

- Seit **OGS** Version 6 wird der Modellaufbau durch eine einzige Projektdatei (*.prj) koordiniert (vorher: zahlreiche Einzeldateien).
- Dabei handelt es sich um eine XML-Datei (Extensible Markup Language), die die jeweiligen Prozesse, Netze und Parameter durch sogenannte "Tags" hierarchisch strukturiert.
 - Ein Start-Tag für den Beginn eines Prozesses usw.: <property>
 - Ein End-Tag für das Ende eines Prozesses etc.: </property> d.h. mit " / ".
 - Diese können ähnlich wie bei HTML verschachtelt werden.
 - Baumstrukturteile der XML-Datei können durch Verlinkung eingebunden werden
- neben der *.prj-Datei können externe Dateien verlinkt werden, um das Rechengitter zu beschreiben (einschließlich Startbedingungen etc.) zusätzlich können externe Python-Skripte eingebunden werden, z.B. um eigene "dynamische" Randbedingungen zu erstellen
- Alle verfügbaren Tags sind in der Quellcodedokumentation https://doxygen.opengeosys.org/d3/d36/ogs_file_param__prj.html beschrieben.

OGS: Conceptual Structure

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

OGS Conceptual Structure

- Die Projektdateien folgen in der Regel der folgenden Grundstruktur (mit gewissen Änderungen je nach simulierter Prozessklasse):
 - a. Verweis auf externe Dateien (Netz, Geometrien, Python-Skripte).
 - b. Beschreibung der zu simulierenden Prozesse (ggf. mit Verweisen auf die Prozessvariablen; siehe Punkt G).
 - c. Beschreibung des Systems, in dem die Prozesse ablaufen (Festkörpereigenschaften, Fluideigenschaften usw.)
 - d. Zeitliche Diskretisierung (einschließlich Definition des Ausgabeformats)
 - e. Definition der Systemparameter (z. B. hydraulische Leitfähigkeit, Porosität, ...)
 - f. Definition von Korrelationen zur Vorbereitung von z.B. zeitvariablen Randbedingungswerten
 - g. Definition von Prozessvariablen (Variablenwerte während der Simulation) und gleichzeitige Definition von Randbedingungswerten und -typen etc.
 - h. Einstellungen für den Gleichungslöser

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



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

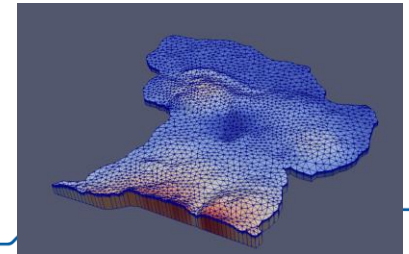
VTU Datei die das FEM Netz und die Geometrie beschreibt

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

GML Datei zur Geometriebeschreibung (outdated)

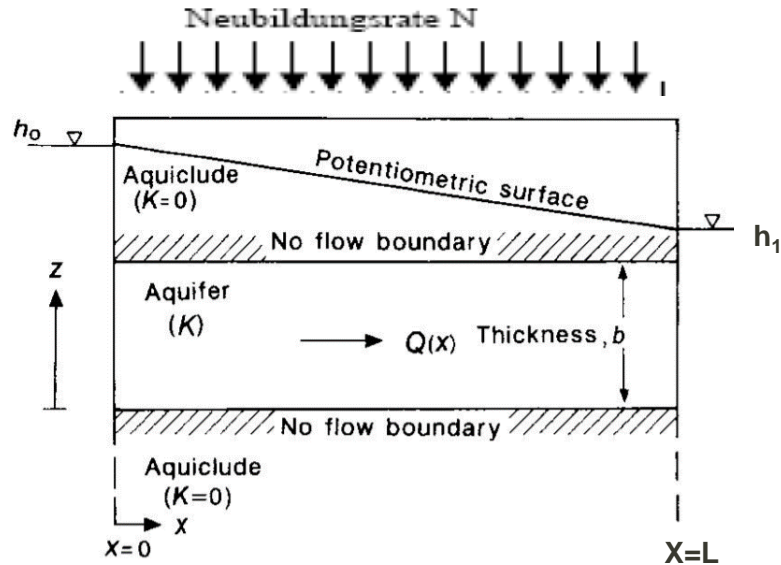


Kommandozeilentool



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

Teil I: Analytische vs Numerische Lösung: Gespannter Aquifer



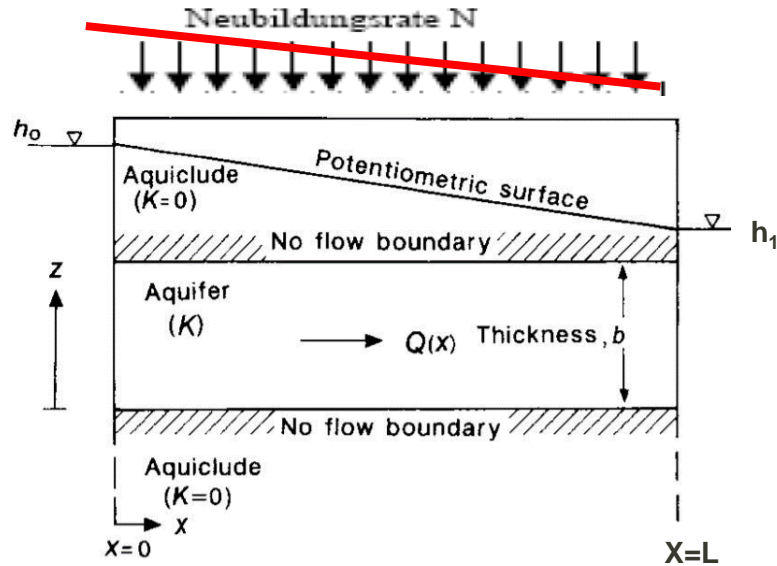
$$S \frac{\partial H}{\partial t} - \text{div}[KM \text{grad } H] - N = 0$$

- 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

1. Modell: Profilmodell ohne Grundwasserneubildung



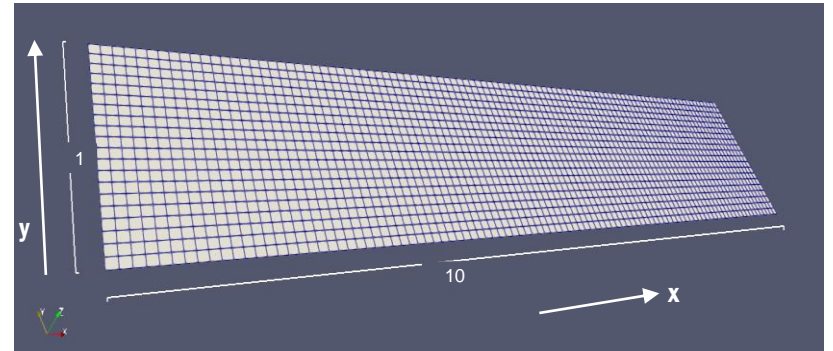
- $$H = h_0 + \frac{h_1 - h_0}{L} x + \frac{N}{2KM} x(L - x) \quad (1)$$
- Lineare Gleichung für $N = 0$
- Aufsetzen Grundwasserneubildung auf das Modell (**10x1x1m**)
- Homogener, isotroper Untergrund:

$$K = 9.81 \cdot 10^{-7} \frac{m}{s}$$
- 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/>



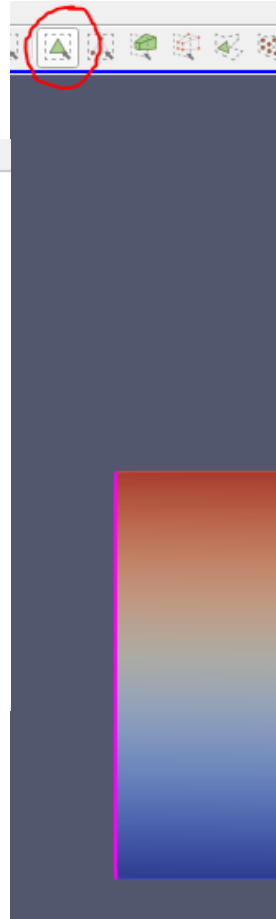
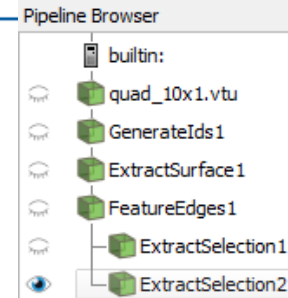
Befehl zum Erzeugen dieses Meshes über die OGS-Tools wäre:

```
generateStructuredMesh -o quad_10x1.vtu -e quad --lx 10 --ly 1 --nx 100 --ny 10
```


Numerische Berechnung der GW-Oberfläche

▪ Grundlegende Modellgeometrie und Mesh

- Zur Parametrisierung der Randgeometrie laden wir das Netz *quad_10x1.vtu* in **ParaView** ein
 - Suchen Sie den Filter mit dem Namen **Generate Ids**
 - Geben Sie *bulk_node_ids* und *bulk_element_ids* ein
 - Klicken Sie dann auf **Apply**
- Verwenden der Filter „**ExtractSurface**“ und „**FeatureEdges**“ zum Extrahieren des Modellrands
- Den Icon **Select Cells on** aktivieren um den linken und rechten Modellrand zu markieren und im Anschluss mit dem Filter „**ExtractSelection**“ extrahieren
- Daten als „*boundary_left.vtu*“ und „*boundary_right.vtu*“ speichern und in der Datei den Datentyp für *bulk_element_ids* und *bulk_node_ids* auf *Unint64* ändern



Profilmodell ohne Grundwasserneubildung


- *Schauen sie sich die Projektdatei im Ordner 0_keine_Neubildung an*
- Einige Verständnisfragen hierzu:
 - Wie viele Mesh-Dateien werden geladen?
 - Welche Prozess-Klasse wird betrachtet?
 - Welche Randbedingungen werden angesetzt?
 - Wie lange wird simuliert? Wie viele Zeitschritte werden ausgegeben?
 - Wieviel Dimensionen hat das Modell (1D, 2D, 3D)?

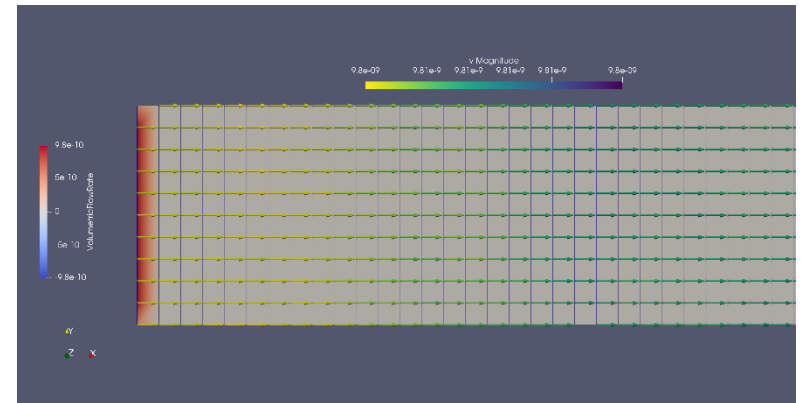
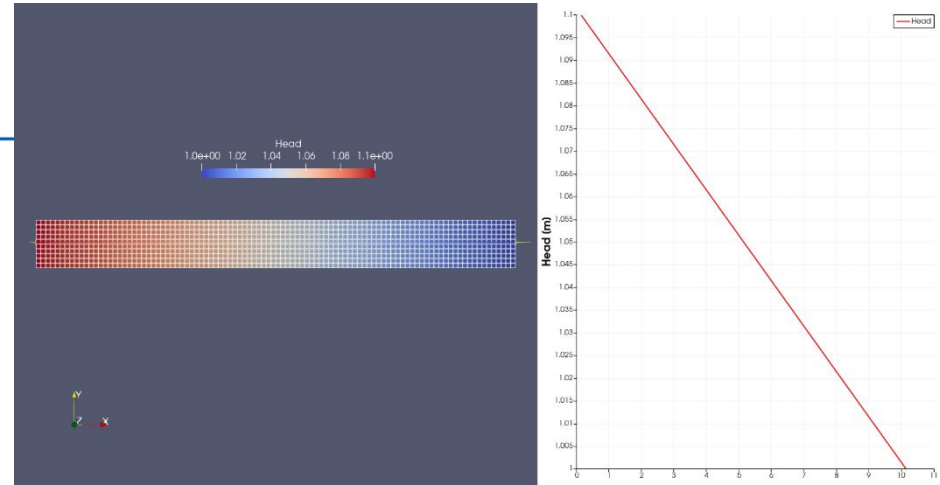
Übung OGS: Profilmodell ohne Grundwasserneubildung

- Wir simulieren ein OGS 2D Modell, welches einen Querschnitt durch den Aquifer darstellt (quasi 1D Strömungsproblem)
- Füllen sie die Lücken „<!-- -->“ in der *quad_querschnitt.prj* **Projektdatei**
- Da die Prozess Variable des **LIQUID_FLOW** der Druck ist, wird das Pascal'sches Gesetz angewandt
- $p_0 = \rho_f g h_0 = 1000 \frac{kg}{m^3} * 9.81 \frac{m}{s^2} * 1.1 m = 10791 Pa$
- Die hydraulische Leitfähigkeit muss in Permeabilität umgerechnet werden
- $K = \frac{K\mu}{\rho_f g} = \frac{9.81 * 10^{-7} \frac{m}{s} * 1 * 10^{-3} \frac{kg}{ms}}{1000 \frac{kg}{m^3} * 9.81 \frac{m}{s^2}} = 1 * 10^{-13} m^2$
- Kopieren sie die VTU Dateien und OpenGeoSys in denselben Ordner
- Starten sie die Simulation und laden sie die Ergebnisse in **ParaView**

```
<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>
```

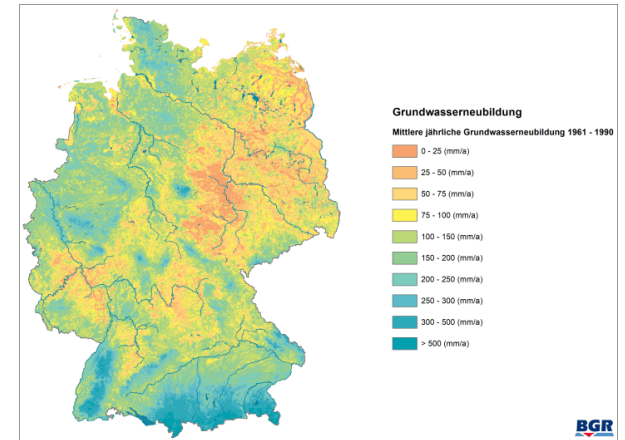
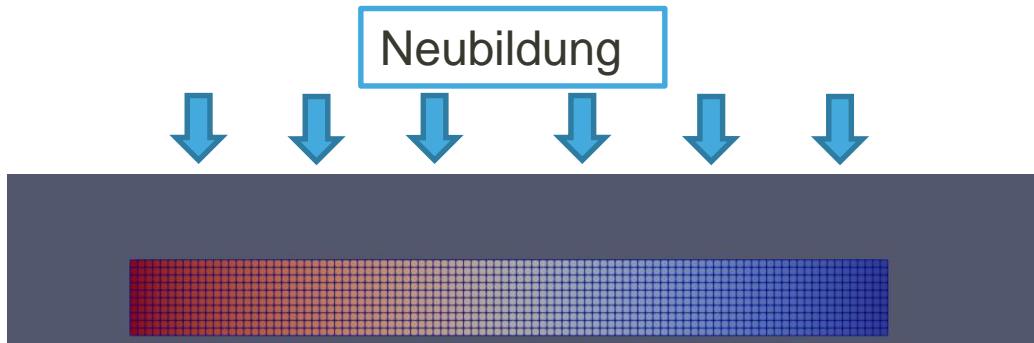
Übung OGS: Profilmodell ohne Grundwasserneubildung

- Öffnen sie **ParaView** und ziehen sie per *Drag&Drop* die Ergebnisdatei
- Hydraulische Potential kann über einen **Calculator** Filter  und Hydrostatische Druckformel berechnet werden
- **Plot over Line** Filter entlang des Profils veranschaulicht den linearen Verlauf des hydraulischen Potentials
- Die Variable v beschreibt die Darcy-Fließgeschwindigkeit (nur x-Richtung) und die Variable *VolumetricFlowRate* den Volumenstrom über einen Modellrand



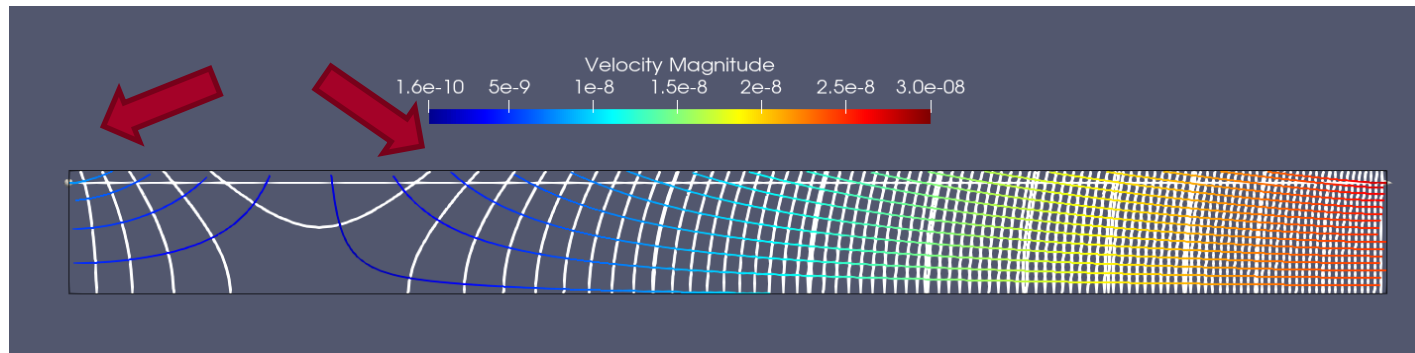
Übung OGS: Grundwasserneubildung

- Aufsetzen Grundwasserneubildung auf das Modell (10x1x1m)
 - Neubildung N: 100mm/a $\sim\sim 3.18e-9 \text{ m}^3/(\text{m}^2\cdot\text{s})$



Übung OGS: Grundwasserneubildung

- Wir überführen das planare Modell in ein Querschnittsmodell (*1_Neubildung*) und setzen die Neubildung auf das obere Linienelement als Neumann-Randbedingung
- Im Gegensatz zu einem planaren Modell (und zur Dupuit-Forchheimer Approximation) gibt es nun **eine** Geschwindigkeitskomponente in Y-Richtung → 2D Strömungsproblem
- Ersetzen sie die Lücken („<!-- -->“) in der Datei *quad_querschnitt_neubildung.prj*, starten sie die Simulation und visualisieren sie die Strömungslinien im System



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 $x_0 = 1.92m$

