

## **Teilthema 2.7:**

### **Simulation von Grundwasserströmungs- und Transportprozessen (einschließlich der ungesättigten Bodenzone)**

Beitrag des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie,  
des Niedersächsischen Landesamtes für Ökologie  
und des Landesamtes für Natur und Umwelt Schleswig-Holstein

## **Vorwort**

Die Simulation von Strömungs- und Stofftransportprozessen im Grundwasser ist Kristallisationspunkt der Modellvorstellungen verschiedener Fachdisziplinen. Ihre Qualität wird durch die jeweiligen Fachbeiträge und die interdisziplinäre Zusammenarbeit bestimmt. In einfachen Fällen liegt diese interdisziplinäre Arbeit oft in einer Hand.

In den hier zu betrachtenden Fällen ist in der Regel das Zusammenwirken von Fachleuten verschiedener Disziplinen erforderlich. Die Qualitätssicherung hinsichtlich der Beiträge der genannten Fachgebiete an den Ergebnissen der Simulationsrechnungen kann umfassend nur allgemein als Aufforderung zum fachgerechten, gut dokumentierten Arbeiten aller Beteiligten und gedeihlicher Zusammenarbeit formuliert werden. Bei größeren Modellierungsprojekten ist u.U. die Leitung durch einen Projektkoordinator empfehlenswert.

Aus Erfahrungen der Autoren und Anmerkungen in der Literatur werden Hinweise auf besondere Probleme der Qualitätssicherung bei der Umsetzung von Modellprojekten gegeben. Die Anmerkungen sollen Hilfestellung und Anstoß zum weiteren Nachdenken über die Qualitätssicherung bei der Simulation von Strömungs- und Stofftransportprozessen im Grundwasser sowie der ungesättigten Bodenzone sein.

Es wird zudem versucht, Prüfkriterien zu formulieren, deren Abarbeitung vor und nach der Modellierung Hinweise zur kritischen Betrachtung der Aufgabenstellung und des Ergebnisses gibt. Mithin soll hier nicht festgelegt werden, wie eine Modellierung durchzuführen ist, sondern eine Hilfe zur einzelfallbezogenen Aufgabenbearbeitung gegeben werden.

## Inhaltsverzeichnis

Vorwort .....	1
2.7.1 Allgemeines .....	3
2.7.1.1 Einleitung und Zielstellung .....	3
2.7.1.2 Modelle und Simulation .....	4
2.7.1.3 Bereiche der Qualitätssicherung bei der Simulation .....	5
2.7.1.4 Abgrenzung und Gültigkeitsbereich dieses Papiers .....	5
2.7.2 Erarbeitung der Modellfragestellung und Vorbereitung des Modellprojekts ....	6
2.7.2.1 Notwendigkeit der Modellierung .....	6
2.7.2.2 Prinzipieller Ablauf .....	6
2.7.2.3 Formulierung der Aufgabenstellung .....	8
2.7.2.4 Vorläufige Abgrenzung des Betrachtungsraumes .....	8
2.7.2.5 Grundlagenermittlung .....	9
2.7.2.6 Datenakquisition .....	9
2.7.2.7 Auswahl von Lösungsverfahren .....	11
2.7.3 Fachbegleitung und Durchführung der Modellierung .....	14
2.7.3.1 Modellkonzept und Modellparametrisierung .....	14
2.7.3.2 Modellerstellung (inkl. Diskretisierung) .....	19
2.7.3.3 Kalibrierung und Parameteranpassung (inkl. Sensitivitätsanalyse) .....	20
2.7.3.4 Anwendungsrechnung mit Szenarien .....	22
2.7.3.5 Bewertung der Ergebnisse (inkl. Fehlerbetrachtung) .....	24
2.7.4 Dokumentation und Abnahme durch den Auftraggeber .....	25
2.7.4.1 Allgemeines .....	25
2.7.4.2 Dokumentationsbestandteile .....	25
2.7.4.3 Datenübergabe an die Behörde .....	28
2.7.5 Literaturverzeichnis .....	29
2.7.6 Glossar .....	32
Anlage 1 .....	37
Anlage 2 .....	40
Anhang: Leistungsverzeichnis für das Niedersächsische Modellprojekt „Woxdorf“ .	42

## 2.7.1 Allgemeines

### 2.7.1.1 Einleitung und Zielstellung

Die meisten Altlastenfälle haben als Ursprungsort die ungesättigte Bodenzone und als entscheidenden Ausbreitungspfad das Grundwasser zu berücksichtigen. Daher hat die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen im Boden und Grundwasser mit Hilfe von Modellen eine große Bedeutung bei der Altlastenbearbeitung. Sie ist eine wichtige Entscheidungshilfe bei der stufenweisen Altlastenbearbeitung, wie

- Erkundung und Gefährdungsabschätzung
- Sanierungsuntersuchung
- Sanierung
- Monitoring,

gewinnt aber auch bei einer integralen Betrachtungsweise an Bedeutung. (vgl. hierzu Abbildung 1).

Beweis-niveau	Stufe	Einsatzmöglichkeiten
	Verdachtsfallerhebung	
BN 0	Formale Erstbewertung	
	Historische Erkundung E <sub>0-1</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Historie der Gefährdungsentwicklung</li> <li>• Verursacherklärung</li> </ul>
BN 1	Bewertung auf BN1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Gefährdungsprognose</li> <li>• (Einzelfall und integrale Betrachtung)</li> </ul>
	Orientierende Erkundung E <sub>1-2</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Planung und Auswertung komplexer *technischer Erkundungsmaßnahmen</li> <li>*Meßstellenanordnung</li> <li>*Meßstellenausbau</li> <li>*Meßrhythmus</li> <li>*Pumpversuche</li> </ul>
BN 2	Bewertung auf BN2	
	Detailerkundung und integrale Betrachtung E <sub>2-3</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Planung und Auswertung von Überwachungsmaßnahmen</li> </ul>
BN 3	Bewertung auf BN3	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ableitung des vorläufigen Sanierungszieles</li> </ul>
	Sanierungsuntersuchung E <sub>3-4</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Projektierung geeigneter Maßnahmen</li> <li>• Erfolgsprognose</li> <li>• Zeitbetrachtungen</li> <li>• Kostenschätzungen</li> </ul>
BN 4	Sanierungsentscheid	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Begründung des endgültigen Sanierungszieles</li> <li>• Überwachung des Sanierungsfortschrittes</li> <li>• Prüfung des Gefahrenzustandes bei neuen Informationen</li> </ul>
	Sanierung	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Prüfung und Prognose der Gefahrensituation auf der Basis aktueller Meßwerte</li> </ul>
BN 5	Sanierungskontrolle	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Überwachung der Langzeitwirkung von Sanierungsmaßnahmen</li> </ul>

Abbildung 1 Einsatzmöglichkeiten der Simulation bei der Altlastenbearbeitung am Beispiel der Sächsischen Altlastenmethodik

Die Simulation mit Hilfe von Modellen im Rahmen der Altlastenbehandlung ist unter anderem aus folgenden Gründen vorteilhaft:

- ⇒ Komplexe hydraulische Regimes lassen sich oft nur mit einer Modellierung erfassen und bewerten
- ⇒ Hinsichtlich der Prognose von Systemzuständen und der Entscheidungsfindung ist die Möglichkeit der Variation von Randbedingungen unerlässlich
- ⇒ Wassermengenbilanzen und Stoffinventare lassen sich oft nur digital verarbeiten und berechnen (die Anwendung von Grundwassersoftware liegt nahe)
- ⇒ Oft ist schon das "Heranarbeiten" mittels einfach handhabbarer analytischer oder numerischer Lösungen an ein Problem zum Verständnis der Strömungs- und Transportprozesse von Vorteil.

### 2.7.1.2 Modelle und Simulation

#### 2.7.1.2.1 Definitionen

Die Bildung von Modellvorstellungen führt zu einer starken Vereinfachung schwer erfassbarer komplexer Zusammenhänge. Die Bildung eines Modells wird immer dann notwendig, wenn sich Entscheidungen nicht mehr auf der Grundlage der natürlichen Beobachtungen treffen lassen. Dabei kommt es vor allem darauf an, im Modell nur das widerzuspiegeln, was für die Beantwortung der Fragestellung des Auftraggebers bzw. des Entscheidungsträgers notwendig ist.

Die Begriffe "Modell" und "Modellierung" werden häufig in einer Reihe von verschiedenen Zusammenhängen verwendet. Die Grundidee eines Modells ist ein realistisch begründeter Erklärungsansatz für eine Beobachtung, die nicht notwendigerweise mathematisch formuliert sein muss [1]. Dieser Erklärungsansatz besitzt aber notwendige und (experimentell) nachprüfbar Konsequenzen. Der Gebrauch des Begriffs "Modell" sollte dann vermieden werden, wenn lediglich Szenarien oder Möglichkeiten aufgezeigt werden sollen. Ein Modell ist eine *überprüfbar* Idee, Hypothese oder Theorie (oder Kombinationen davon), die neue Erkenntnisse oder Interpretationen eines bekanntes Problems ermöglicht.

Meist wird unter einem Modell im Bereich der Gefährdungsabschätzung und Sanierung von Altlasten ein geohydraulisches Struktur- und Transportmodell und dessen mathematische Umsetzung mit Hilfe von sog. "Grundwassersoftware" verstanden. Aber auch schon die Auswertung von Bohrungen z.B. durch einen Geologen ist ein Modell, d.h. sie liefert eine modellhafte Vorstellung vom Aufbau des Untergrundes. Der Begriff "digitale Simulation", der oft mit dem Begriff "Simulation" gleichgesetzt und synonym verwendet wird, kennzeichnet die numerische Lösung systembeschreibender mathematischer Modelle mit Hilfe von Computern [2].

#### 2.7.1.2.2 "Richtigkeit" von Modellen

Jedes Modell kann nur Züge der Wirklichkeit abbilden. Es kann niemals den Anspruch stellen, die Wirklichkeit exakt abzubilden. Die mathematische Exaktheit einer numerischen Lösung täuscht jedoch häufig eine Genauigkeit vor, mit der die Natur nicht abgebildet werden kann. Das hat mit der Bestimmung und Bewertung der Eingangsdaten sowie des unvermeidbaren Auftretens systematischer Fehler bei der Überführung dieser aus der Natur gewonnenen Daten ein mathematisch verarbeitbares System zu tun. Da der Mensch aber nicht in der Lage ist die Verhältnisse des Untergrundes komplett aufzudecken und die hydrologischen und geologischen Da-

ten für ein Gebiet exakt zu bestimmen und vorherzusagen, ist ein Modell also niemals "richtig" im Sinne des Abbildens der Natur. Andererseits lassen sich aber auch mit Hilfe von Modellen, die mit Unsicherheiten behaftet sind, sinnvolle Entscheidungen ableiten. Es ist grundsätzlich zu unterscheiden zwischen Modellen, die fehlerbehaftet sind, und solchen bei denen der Modellansatz falsch gewählt wurde. Letztergenannte sind dann folgerichtig auch als "falsche Modelle" zu bezeichnen.

Um den Grad der Unsicherheiten und die Anzahl der Fehler bei fehlerbehafteten Modellen reduzieren zu können, kann man auf verschiedene Techniken zurückgreifen (siehe Abschnitt 2.7.3.3)

### **2.7.1.3 Bereiche der Qualitätssicherung bei der Simulation**

Grundlage für eine Qualitätssicherung bei der Durchführung von Simulationsprojekten ist eine enge Zusammenarbeit der beteiligten Fachleute sowie die Transparenz der Bearbeitung für den Auftraggeber. Der Modellierer muss in die Lage versetzt werden, nicht um jeden Preis ein Ergebnis zu liefern, sondern die getroffenen Annahmen und Vereinfachungen darzustellen und hinsichtlich ihrer Aussagekraft zu bewerten. Dazu ist es notwendig, dass der Auftraggeber eng mit dem Modellierer zusammenarbeitet. Dies bedeutet ein stufenweises Vorgehen, bei dem wesentliche Entscheidungen nachvollziehbar begründet werden müssen.

Die hier vorgestellten Aspekte der Qualitätssicherung bei der Simulation von Hilfe von Grundwasserströmungs- und Transportmodellen werden in folgende Bereiche unterteilt:

- ⇒ **Erarbeitung der Modellfragestellung**
- ⇒ **Vorbereitung des Modellprojekts**
- ⇒ **Fachbegleitung und Durchführung**
- ⇒ **Dokumentation und Abnahme**

**Somit werden die Aspekte der Qualitätssicherung analog der Bearbeitung von der Beauftragung bis zur Dokumentation und Abnahme der Ergebnisse aufgezeigt.**

Ein möglicher prinzipieller Ablauf ist in Abbildung 2 dargestellt.

Es ist hier nicht Ziel, jedes erdenkliche Modell zu berücksichtigen, sondern vielmehr auf übliche Lücken im Kenntnisstand und Fehlerquellen bei der Vorbereitung und Durchführung von Modellen zur Simulation von Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozessen und in der ungesättigten Bodenzone hinzuweisen.

### **2.7.1.4 Abgrenzung und Gültigkeitsbereich dieses Papiers**

In einigen Bundesländern sowie von Umweltbundesamt wurden zur Simulation von Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozessen verschiedene Materialien und Handbücher herausgegeben, siehe z.B. [2], [3] und [4]

Dieses Papier behandelt weder die mathematischen Grundlagen der Modellierung noch deren rechentechnische Umsetzung. Es geht auch nicht auf die Gültigkeit der verschiedenen mathematische Lösungsansätze bei den entsprechenden Anwendungsfällen ein.

Dazu muss auf die einschlägige Fachliteratur, so z.B. [5], [6] sowie o.g. Materialien verwiesen werden.

Vielmehr versucht es, dem Auftraggeber (z.B. einer Behörde) und dem Auftragnehmer einer Modellierung zu vermitteln, welche Bereiche und Stufen der Modellierung der Untersetzung mit qualitätssichernden Maßnahmen bedürfen..

Die Simulation der Bodenluftabsaugung, die Auswertung von Pumpversuchen, und die indirekte Parameterermittlung z.B. mit Hilfe von Software ist nicht Gegenstand dieses Papiers. Ebenso wenig werden Fragen der nulldimensionalen Modellierung chemischer Umsetzungsprozesse sowie der Mehrphasenströmung und analoger Modelle behandelt.

## **2.7.2 Erarbeitung der Modellfragestellung und Vorbereitung des Modellprojekts**

### **2.7.2.1 Notwendigkeit der Modellierung**

Vor dem eigentlichen Erarbeiten der Aufgabenstellung sind zunächst folgende Fragen zu klären:

*Ist der Einsatz z.B. eines numerischen Grundwasserströmungs- und ggf. Transportmodells sinnvoll und machbar ?*

*Gibt es andere Entscheidungshilfen, welche sind das, und tragen sie zu ähnlicher oder besserer Aussagegenauigkeit bei?*

Die Entscheidung, ob eine Simulation mit Hilfe eines Strömungs- oder Transportmodells sinnvoll ist, welchen Umfang die Modellierung/Simulation einnimmt und welche Lösungsalgorithmen bzw. Software Anwendung finden, ist kein einfacher Prozess. In manchen Fällen bietet sich eine gemeinsame Bearbeitung altlastenrelevanter und wasserwirtschaftlicher Fragestellungen an. Dies hängt wiederum von der Größe des Schadensfalles bzw. der Gefahrensituation, Beeinflussungen auf Trinkwassergewinnungsanlagen und deren Schutzzonen, und der Anzahl der in einem Betrachtungsraum vorhandenen Altlasten ab.

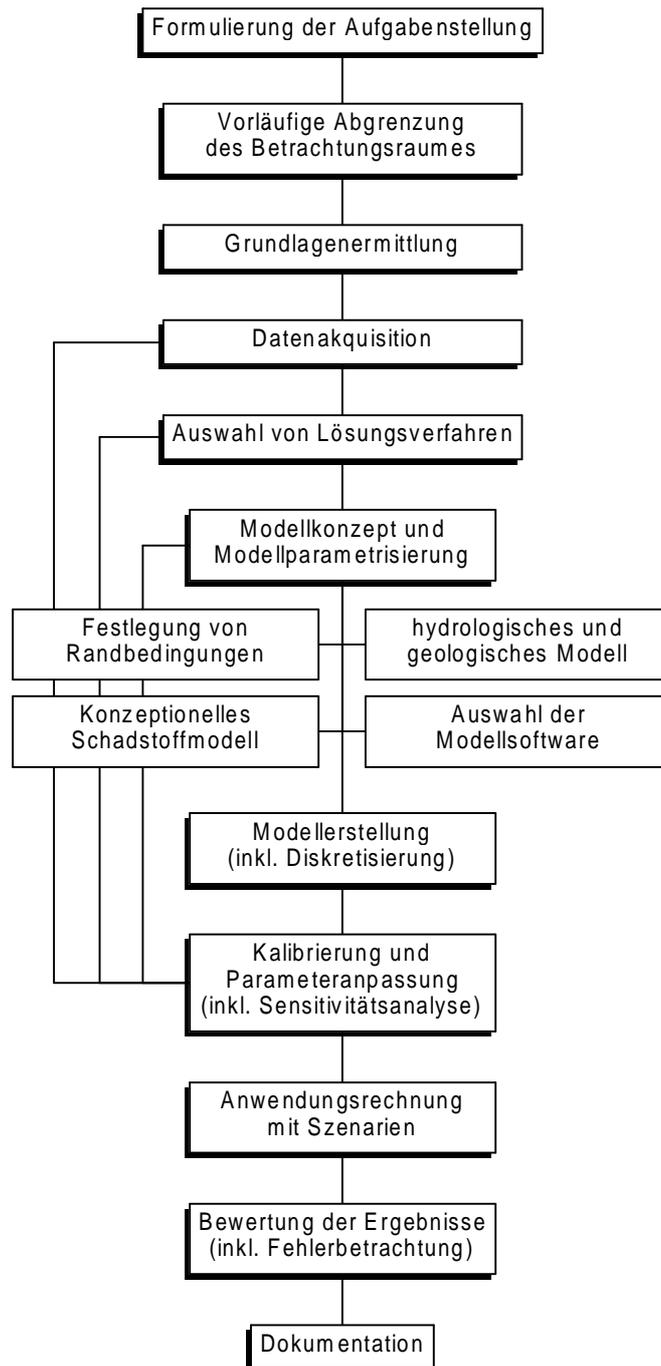
Ebenso kann bei Unkenntnis des Umweltverhaltens der zu betrachtenden Schadstoffe zunächst eine Modellierung der Grundwasserdynamik (i.A. bezeichnet als Strömungsmodell) sinnvoll sein, da hier dann schon wesentliche Fragestellungen beantwortet werden können (z.B. Grundwasserfließrichtung, Wassermengen). Dann müssen auf der Basis der reinen Wasserteilchenbewegung analog einer sog. "worst-case"-Betrachtung Abschätzungen vorgenommen werden, die mit Informationen zum Schadstoffverhalten im Untergrund untersetzt werden müssen.

*Modelle sind Hilfsmittel, die bei sachgemäßem Gebrauch für bestimmte Aufgaben die einzige Entscheidungshilfe bieten.*

Die als Anlage 2 dokumentierte Checkliste soll eine Hilfestellung zur Analyse des Kenntnisstandes vor Erarbeitung der Modellfragestellung und Abgrenzung des Betrachtungsraumes geben. Ein tabellarischer Leitfaden zu dieser Problematik findet sich in [6].

### **2.7.2.2 Prinzipieller Ablauf**

Es wird im Rahmen der Aspekte der Qualitätssicherung bei der Simulation von folgendem prinzipiellem Ablauf ausgegangen, der nach Umfang der Aufgabenstellung und des gewählten Lösungsansatzes variieren kann:



**Abbildung 2: Prinzipieller Ablauf der Bearbeitung von Simulationsaufgaben mit Hilfe von Modellen**

### 2.7.2.3 Formulierung der Aufgabenstellung

Die Formulierung der Modellfragestellung im Sinne der Gesamtaufgabe und der zu lösenden Teilaufgaben ist entscheidend für Art und Umfang der Modellierung, Daher muss der Auftraggeber die Fragestellungen klar und überprüfbar formulieren. Die Möglichkeit einer akzeptablen Schadensprognose oder -epignose hängt jedoch auch vom Kenntnisstand der Transportparameter und des Zusammenwirkens mit den örtlichen Gegebenheiten ab. Sind diese Kenntnisse in nicht ausreichendem Maße vorhanden, kann man mit einer Betrachtung des rein advektiven Stofftransports mit verschiedenen Methoden (Finite Differenzen oder Random Walk) dennoch akzeptable Ergebnisse erzielen. Hier müssen jedoch die Ergebnisse vom Gutachter sinnvoll interpretiert und hinsichtlich ihrer Aussagekraft und den Gültigkeitsgrenzen nachvollziehbar dargestellt werden.

**Modellierungsaufgaben sollten immer so konkret wie möglich gestellt werden.**

Die reine Formulierung der Leistung "geohydraulische Modellierung und/oder Stofftransportmodellierung" ist für Auftragnehmer und Auftraggeber meist zu unkonkret.

#### **Die Fragen**

- Welchen Transportweg schlagen der oder die Kontaminanten ein?,
- Wie lange beträgt die Transportzeit zwischen dem Schaden und dem maßgeblichen Schutzgut und weiteren Schutzgütern?,
- Wie ist der Konzentrationsverlauf am maßgeblichen Schutzgut?
- Wie wirken sich veränderte Randbedingungen (z.B. hydraulische Sanierung, Förderraten) auf die Kontaminationssituation aus?,
- Ist eine Epignose (rückwirkende Schadensbetrachtung) möglich und wie ist diese umsetzbar
- Wie wirkt sich eine Unterbrechung des Kontaminationspfades auf eine Veränderung der Schadstofffracht aus?,

können Ansatzpunkte für eine konkretere Beschreibung der zu lösenden Aufgaben liefern.

Mit der Formulierung solcher Aufgaben sind wiederum eine Reihe von prinzipiellen Festlegungen verbunden, wie z.B. über eine stationäre oder instationäre Lösung, die Konsequenzen auf den Umfang der zu ermittelnden Daten haben können (z.B. zeitlich variable Grundwasserneubildungsraten, Wasserstandsganglinien).

### 2.7.2.4 Vorläufige Abgrenzung des Betrachtungsraumes

Eine vorläufige Abgrenzung des Betrachtungsraumes als spätere Hilfestellung zur Erstellung der Modellgebietsgrenzen sollte zunächst den Gesichtspunkten der Lösung der altlastenbezogenen Fragestellung entsprechen. Generell gilt:

**Erkundungsgebiet > Betrachtungsraum > Aussagegebiet (z.B. Altlast mit Umfeld)**

Dass das Erkundungsgebiet meist größer sein muss als der Betrachtungsraum hat folgende zwei Ursachen:

- a) Die vorliegenden erhobenen Daten gehen über den Betrachtungsraum hinaus, und
- b) es werden genauere Aussagen über die räumliche Verteilung der Daten erreicht. Hingegen ist die Abgrenzung des Betrachtungsraumes naturgemäß an geographische Grenzen gebunden, die nicht willkürlich gelegt werden dürfen. So muss man sich neben der Orientierung an geologischen Grenzen an Oberflächengewässern und Einzugsgebietsgrenzen orientieren, damit diese gewählten Grenzen dann auch mathematisch umsetzbar sind (z.B. als Randbedingungen). Eine Abgrenzung des Betrachtungsraumes der Modellierung auf die Altlast oder die dazugehörige Grundstücksgrenze entfällt damit zumeist. Allerdings ist es nicht immer notwendig, das Betrachtungsgebiet bis zu einer Randbedingung auszuweiten. Wichtig ist zudem, dass bei der Zwei- oder Dreidimensionalität des Problems eine Vorstellung über die Abgrenzung des Betrachtungsraumes sowohl in horizontaler als auch in vertikaler Richtung existiert.

#### **2.7.2.5 Grundlagenermittlung**

Dieser Abschnitt behandelt die als Grundlage einer Simulation notwendigen Eingabeparameter und deren Ermittlung. Es sollte vor der Auftragsvergabe immer eine Abstimmung zwischen Auftragnehmer und Auftraggeber erfolgen, welche Eingangsparameter mit einfachen Mitteln zu beschaffen sind und welche zusätzlicher Erkundungsarbeiten bedürfen. Es kann aber auch die Datenerhebung in Form einer "Grundlagenermittlung" als eigenständige Leistung vergeben werden. Ist eine Analyse des Kenntnisstandes notwendig, kann diese Teil einer zu formulierenden Leistung "Grundlagenermittlung und Kenntnisstandanalyse" sein. Hinweise dazu gibt die Anlage 2. Das sich aus der Kenntnisstandanalyse und Grundlagenermittlung ergebende Defizit zur Ermittlung systembeschreibender Parameter sollte dann in einem Schritt "Datenakquisition" behandelt werden.

Der notwendige Grad der Detailliertheit der Parameter hängt entscheidend von den zu lösenden Aufgaben und der Größe des Modellgebietes ab. Analytische Lösungen sollten dann verwendet werden, wenn es sich um einen sehr begrenzten Betrachtungsraum mit stark idealisierbaren Eigenschaften handelt (z.B. Brunnenlösung) oder wenn innerhalb eines numerischen "größeren" Modellgebietes einzelne Prinziplösungen mit dem kompletten Algorithmus nicht gelöst werden können (z.B. analytische Bestimmung von Randbedingungen). Diese Vorgehensweise ist ebenso bei der Stofftransportmodellierung sinnvoll, wenn man sich bei der Beschreibung des Schadstofftransports zunächst auf z.B. charakteristische Bahnlinien beschränkt. Die Vorgabe der Anfangs- und Randbedingungen für die Schadstofftransportsimulation sind sehr komplexer Natur und setzen eine hohe Detailkenntnis der Stoffverteilung im Untergrund bzw. an der Quelle voraus.

#### **2.7.2.6 Datenakquisition**

Der Prozess der Recherche nach vorhandenen Daten und der technischen Datenerhebung, z.B. durch Bohrungen, Pumpversuche oder Elutions- und Feldtests kann als eigenständige Leistung verstanden und auch so vergeben werden.

Probleme bereiten zumeist nicht die technische Erhebung oder das Auffinden von Quellen von früheren Erhebungen, sondern das Einordnen der gewonnenen Informationen in die naturräumlichen Zusammenhänge und die dann notwendig werden Vereinfachungen.

Die Daten sollten hinsichtlich Ihrer Repräsentanz für den Untersuchungsraum bewertet werden.

Ein Beispiel zur Bewertung dieser Repräsentanz liefert die Gegenüberstellung von durch Siebanalysen gewonnenen und durch Pumpversuche ermittelten Durchlässigkeitskoeffizienten. Die Siebanalyse liefert einen örtlich sehr begrenzten Wert (wobei er durch Verwendung von Mischproben beeinflusst werden kann), während Pumpversuche die hydraulischen Eigenschaften des Untergrundes über einen größeren Raum repräsentieren.

Bei der Festlegung der Aquiferbasis größerer Modelle, wenn sie durch wenige Bohrungen belegt ist, können geophysikalische Aussagen im Verein mit regionalgeologischen Überlegungen von besonderer Wichtigkeit sein. Im Lockergesteinsbereich ist dies mit dem geringen spezifischen Widerstand mächtiger, als Modellbasis geeigneter liegender Stauer (z.B. tertiärer Tone) oder auch für die Hydraulik und den Transport in abgedeckte Förderhorizonte entscheidender bindiger Zwischenschichten begründet. Im Festgesteinsbereich liefert die Geophysik z.B. mit der Magnetik Aussagen über den Verlauf von Störungen, die in hydraulischer Hinsicht bedeutsam sein können.

Hinsichtlich möglicher Datenfehler bei der instationären Grundwasserneuberechnung sei auf die Notwendigkeit der Verwendung des korrigierten Niederschlags in Form des Niederschlagsdargebotes (NDG) hingewiesen. Entsprechende Daten (auch der potenziellen Verdunstung PET) können vom Deutschen Wetterdienst (DWD) zur Verfügung gestellt werden.

Die an doppelt- oder mehrfach-poröse Modellansätze gekoppelte Bestimmung der Gesteinseigenschaften von Klüften und Matrix (hydraulisch wirksame Durchlässigkeit, Porosität) und der erforderlich Austauschparameter ist mit hohen Anforderungen verbunden

Hinsichtlich der Sorptionseigenschaften von Kontaminanten sind bindige Strukturen oft von ausschlaggebender Bedeutung und müssen ggf. für eine spätere Transportmodellierung detaillierter erkundet werden.

Bei der Auswertung hydraulischer Tests ist auf mögliche Eigenkapazität und Unvollkommenheit von Messstellen zu achten.

Die geprüften Daten können ggf. mit statistischen Verfahren hinsichtlich ihrer räumlichen Aussagekraft untersucht werden.

Stoffdaten zur Diffusion in Wasser liegen meist vor und können unter Berücksichtigung der Tortuosität auf die Verhältnisse im Untergrund angepasst werden. Die Dispersion (ggf. als Tensor im Raum) ist vom Betrachtungsmaßstab abhängig und dieser wiederum von der Größe des Problemgebietes, aber auch vom Detaillierungsgrad geologischer Kenntnisse und ihrer Modellierung im Strömungsmodell. Die Dispersivität kann z.B. auch aus der Form einer Schadstofffahne bestimmt werden [3]. Dispersivitäten und Parameter zur Beschreibung der Ad- und Desorption können weiterhin aus Tracertests, das Abbau-, Umwandlungs- und Reaktionsverhalten beschreibende Parameter aus Säulentests ermittelt werden. Die Übertragbarkeit solcher Testergebnisse auf großräumige Grundwasserleiter ist jedoch mit Unsicherheiten verbunden.

### **2.7.2.7 Auswahl von Lösungsverfahren**

Die Auswahl eines geeigneten Lösungsverfahrens sollte immer vor dem Auswählen der eigentlichen Software stehen. Sie ist eine grundlegende Entscheidung, die sich auf den gesamten Prozess von der Datenerhebung bis zur Ergebnispräsentation und –diskussion auswirkt. In der Regel liegt Grundwasserströmungsmodellen eine Massenerhaltungsgleichung für das Wasser und das Darcy - Gesetz zur Energieerhaltung zu Grunde. Die Grenzen der Gültigkeit des Darcy - Gesetzes sollten beachtet werden. Spielen solche Fragen für die Lösung eines Problems eine Rolle und werden sie nicht beachtet, so liegen Fehler in den Modellgleichungen vor.

Prinzipiell lassen sich für die Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in der Boden- und Grundwasserzone dazu drei praxisrelevante Lösungsverfahren unterscheiden, die sich hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit, des Aufwandes und des simulierten Betrachtungsraumes grundlegend unterscheiden (Tabelle 1).

Der Modellierer sollte die Entscheidung über das Lösungsverfahren selbst treffen können. Der fachlicher Begleiter sollte aber über ausreichend Wissen verfügen, die Entscheidung einschätzen zu können und ggf. beeinflussen zu können. Auf jeden Fall sollten der Fragestellung und der Situation angemessene Verfahren zum Einsatz kommen. Dies müssen nicht immer aufwändige numerische Verfahren sein. Der Umfang und die Qualität der Eingabedaten eines Modells sollten mit der physikalischen Komplexität, die in der jeweiligen Software implementiert ist, korrespondieren.[29]

**Tabelle 1: Lösungsverfahren der Simulation**

	<b>Analytische Verfahren</b>	<b>Numerische Verfahren, z.B.</b> •Finite Differenzen •Finite Elemente	<b>Analytisch-numerische Verfahren</b>
Lösung mit Hilfe von	Analogiemodellen, per Hand, Computer	Computer	Computer
Anwendungsbeispiele	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grabenanströmung</li> <li>• Brunnenanströmung (z.B. Sanierungsbrunnen)</li> <li>• Vertikal-ebene Strömung</li> <li>• Horizontal-ebene Strömung</li> <li>• Einige Brunnen einer Wassserfassung</li> <li>• Prinziplösung zum Transport</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Einzugsgebiet v. Trinkwasserfassungen</li> <li>• Industriebrachen, Werksge-lände</li> <li>• Integrale Betrachtung von mehreren Altlasten</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Einzugsgebiete</li> <li>• Gebiete mit starken Inhomogenitäten</li> </ul>
Spezifika	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Homogene Materialkennwerte</li> <li>• Stark schematisierte Randbedingungen</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Auffinden von repräsentativen Elementarvolumina</li> <li>• Instationäre Berechnung</li> <li>• Bilanzierung (auch in Teilbereichen) möglich</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kombination v. analytischen und numerischen Verfahren</li> <li>• maßstabsunabhängig</li> </ul>
Programmlösungen (Beispiele)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• WSG</li> <li>• PAT</li> <li>• HSSM</li> <li>• MULTIMED</li> <li>• MYGRT</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• ASM</li> <li>• MODFLOW</li> <li>• FEFLOW™</li> <li>• PCGEOFIM™</li> <li>• SPRING</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• DIANA</li> <li>• MLAEM</li> <li>• TWODAN</li> </ul>

Die grundlegende Unterscheidung zwischen den eher einfach zu handhabenden analytischen Modellen und den komplexeren numerischen Modellen kann dem Auftraggeber die Entscheidung zu einer Modellierung erleichtern, ihm aber auch die Möglichkeiten und Grenzen der erwarteten Aussagen verdeutlichen.

Mögliche Kriterien sind hierzu:

- die Verfügbarkeit der geologischen Daten
- Flächenrepräsentanz der Eingangsparameter
- Aufwand für mögliche zusätzliche Erkundungsarbeiten
- Kopplung der Altlastenproblematik mit anderen (z.B. wasserwirtschaftlichen) Fragestellungen
- Formulierung der Simulationsaufgaben

Die Aussageschärfe der Eingangsparameter hängt ab von ihrer flächigen bzw. räumlichen Repräsentanz. Um diese zu bewerten, gibt es eine Reihe von statistischen bzw. geostatistischen Verfahren, die für die Ermittlung der Modellgrundlagen und die Auswahl des Lösungsverfahrens hilfreich sein können .

### 2.7.3 Fachbegleitung und Durchführung der Modellierung

Die mögliche Intensität der fachlichen Begleitung der Modellierung wird durch die Kenntnisse zur Modellbildung beim Auftraggeber / fachlichen Begleiter - insbesondere auf den Gebieten Hydrogeologie und Strömungsphysik (Hydraulik) - und seinen personellen Kapazitäten bestimmt. Neben der Qualitätssicherung bei der Durchführung der Modellierung (interne Qualitätssicherung des Auftragnehmers) sollte die fachliche Begleitung eine externe Qualitätssicherung ermöglichen. Diese erfordert zumindest bei größeren Modellprojekten einen strukturierten Bearbeitungsablauf, wie er als Beispiel im Anhang dargestellt ist.

Nachfolgend sollen Hilfestellungen für eine Qualitätssicherung bei der Durchführung und Fachbegleitung von Modellierungen in der ungesättigten und gesättigten Zone gegeben werden. Dabei wird zwischen der Simulation der Wasserströmung und der Simulation des Schadstofftransports unterschieden und qualitätssichernd für diese beiden Bereiche eine **Teilleistungsabnahme** vorgeschlagen. Diese beiden Bereiche müssen im Einzelfall jedoch gekoppelt berechnet werden, z.B. bei der Berücksichtigung unterschiedlicher Fluidichte.

#### 2.7.3.1 Modellkonzept und Modellparametrisierung

Ein falsches Modellkonzept gehört zu den häufigen Fehlern bei der Modellierung. Die Überlegungen, die zu einer bestimmten Interpretation und Verfahrensweise geführt haben, müssen transparent gemacht, mit dem Auftragnehmer diskutiert und einvernehmlich verabschiedet werden.

Für die Altlastenbearbeitung von unmittelbarem Interesse ist nur der Weg der emittierten Kontaminanten vom Eintragsort in die gesättigten Zone - und damit in das in diesem Moment schon betroffenen Schutzgut Grundwasser - zu einem Ort möglicherweise gefährdeter Grundwassernutzung.

Für die Parameterbelegung eines Modell stehen Flächen-, Linien- und Punktdaten zur Verfügung, die räumlich verteilt sein können.

Automatische Verfahren der Parametrigenerierung sind mit den Informationen zu den geologischen Gegebenheiten und den Eingangsdaten abzugleichen. Dabei können solche Verfahren nicht eine aus genetischen Vorstellungen zur Entstehung der angetroffenen geologischen Strukturen gespeiste geologische Interpretation ersetzen. Ggf. ist ihre Anwendung auf Teilbereiche der erwarteten Strukturen angemessen.

Im Festgestein wird das Modellkonzept von der Größenskala des zu modellierenden Problems im Verhältnis zur Größe des repräsentativen Elementarvolumens bestimmt. Danach entscheidet sich, ob mit einem porösen Aquifer gerechnet werden kann oder ob ein doppelporöses Modell zur Berücksichtigung des Austausches zwischen Klüften und Matrix erforderlich ist, ob Einzelklüfte (mit eigener Hydraulik) mit dazwischen befindlichen Matrixblöcken gerechnet werden müssen oder ggf. nur Tracerversuche (z.B. im Karst) zur Lösung der Aufgabenstellung angewandt werden können.

### 2.7.3.1.1 *Randbedingungen und Modellgebietsabgrenzung*

#### Ungesättigte Zone

In der ungesättigten Zone ist bezüglich der Bewegung von Wasser zwischen annähernd hangparallelem Zwischenabfluss und der etwa vertikal erfolgenden Grundwasserneubildung zu unterscheiden. Ersterer wird ein Oberflächengewässer, letzterer das Grundwasser (die gesättigte Zone) erreichen. Beide Abflussarten bilden gemeinsam mit dem Oberflächenabfluss den Gesamtabfluss, der wiederum gemeinsam mit der Evapotranspiration gleich dem Niederschlag sein muss. Eine Überprüfung der Stimmigkeit dieser Bilanzanteile beugt grob falschen Grundannahmen vor.

Die mehr oder weniger vertikale Versickerung von Wasser, die letztendlich zur Grundwasserneubildung führt, ist für die Altlastenbearbeitung wegen des mit ihr verbundenen Schadstofftransports auch quantitativ von Bedeutung

Wird die Grundwasserneubildung aus Kartenwerken entnommen oder mit (halb)empirischen Formeln abgeschätzt, muss berücksichtigt werden, dass auf Altlastenflächen oft keine oder eine veränderte Vegetation besteht, mithin die Grundwasserneubildung höher als in der Umgebung sein kann. Negativ kann die Grundwasserneubildung nur dann sein, wenn durch hohe Grundwasserstände eine direkte Verfügbarkeit des Grundwassers für Pflanzen gegeben ist oder wenn temporär freie Wasserflächen entstehen. Die verwendeten Daten sollten mit Flurabstandskarten und anhand von Erfahrungswerten auf ihre Plausibilität geprüft werden.

Die Morphologie, höhere Durchlässigkeiten sowie evtl. vorhandene Reaktionswärme bei Deponien kann einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf die Verdunstungs- und Abflussbedingungen, und damit auf die Grundwasserneubildungsrate haben.

Der Versickerungsprozess muss bei großem Grundwasserflurabstand u.U. zeitlich differenziert betrachtet werden. Der zeitliche Verlauf der Grundwasserneubildung kann anhand vorliegender Messdaten durch die Variation von oft nicht detailliert bekannten Landnutzungsparametern (z.B. effektive Wurzeltiefe, Waldalter) sowie des Versiegelungsgrades und ggf. Einbeziehung von Flurabstandsschwankungen angepasst werden.

#### Gesättigte Zone

Die Festlegung der Randbedingungsarten ist eng gekoppelt an die Abgrenzung des Modellgebietes (d.h. das Gebiet, das aktiv am simulierten Strömungsgeschehen teilnimmt). Demgegenüber hat die Abgrenzung des Modellgebietes aber so zu erfolgen, dass die die Strömung und den Schadstofftransport beeinflussenden Randbedingungen berücksichtigt werden.

Im Hinblick auf eine spätere Verwendung des Strömungsmodells als Grundlage für ein Transportmodell kann durch Überschlagsrechnungen die erforderliche Größe des Modellgebietes in Ausbreitungsrichtung der Kontaminanten bestimmt werden.

Die Abgrenzung des Modellgebietes für das Transportmodell ergibt aus der vorangegangenen Strömungsmodellierung, aus der Form der Emissionsquelle, den o.g. Einflussgrößen und dem Betrachtungszeitraum.

Im Rahmen der Modellkalibrierung (vgl. Abschnitt 2.7.3.3) kann festgestellt werden, dass Absenkungen z.B. bis in den Bereich einer als vorläufige Randbedingung verwendeten Randstromlinie reichen. Dann muss das Modellgebiet unter Umständen noch einmal korrigiert werden, auch wenn der damit verbundene Aufwand erheblich

sein kann. Unter Umständen kann auch die Art der Randbedingung geändert werden und die Wasserbilanz an diesen Stellen auf Plausibilität geprüft werden.

#### 2.7.3.1.2 *Hydrologisches und geologisches Modell*

##### Ungesättigte Zone

Die Existenz von Zwischenabfluss kann unter Umständen an bodenkundlichen Horizontmerkmalen erkannt werden. Die Quantifizierung des Zwischenabflusses ist aufwändig, da sie von der Durchlässigkeit der liegenden bindigen Schicht ( $k_{f,v}$ ), derjenigen des temporär wasserführenden, hangenden Materials ( $k_{f,h}$ ), der Neigung der bindigen Schicht und den instationären Niederschlags- und Versickerungsbedingungen abhängt. Da für Ort und Zeitpunkt des Auftretens von Zwischenabfluss gesättigte Verhältnisse vorliegen, können die diesbezüglichen Ansätze zum Einsatz kommen. Die Qualität der Berechnung / Abschätzung wird darüber hinaus von der Sicherheit bezüglich des flächigen Vorhandenseins der den Zwischenabfluss hervorriefenden Stauschicht bestimmt.

Die geologische Modellbildung beschränkt sich i.d.R. auf die Beschreibung der Schichtenfolge an den vom Aufbau der ungesättigten Zone her unterschiedlich Standorten im Modellgebiet, ggf. auch nur auf die Verhältnisse am Kontaminationssort.

Die Wasserdurchlässigkeit der ungesättigten Zone wird von der Mobilität der Phase Wasser (Verhältnis aus spezifischer Permeabilität zur dynamischen Viskosität) und der Wassersättigung bestimmt. Da beim Zweiphasensystem (versickerndes Wasser und Bodenluft) ein Teil der Stromwege von der Bodenluft ausgefüllt wird, ist die Durchlässigkeit für Wasser kleiner als bei voller Sättigung. Das Verhältnis zwischen den Durchlässigkeiten bei Teil- und Vollsättigung wird als relative Permeabilität bezeichnet. Mathematisch wird das System durch die Gleichung von MUALEM - VAN GENUCHTEN - LUCKNER beschrieben [4]. Diese Parameterfunktion kann experimentell bestimmt werden [ebenda].

##### Gesättigte Zone

Die Erarbeitung der geometrischen Struktur des geologischen Untergrundes für den gesättigten Locker- und Festgesteinsbereich erfolgt auf der Grundlage der vorhandenen Bohrungen und geologischer Karten als auch ggf. vorhandener geophysikalischer Messungen und Interpretationen.

Sie ist also eine Interpretationsaufgabe insbesondere für Geologen und Geophysiker. Aber auch hydrologische Gesichtspunkte wie das Verschwinden von Druckdifferenzen verschiedener lokal vorhandener Aquifere gemeinsam mit dem Auskeilen der sie trennenden bindigen Schicht sind zu berücksichtigen.

Insbesondere im Festgesteinsbereich ist die Frage nach der Struktur des geologischen Untergrundes mit der nach dem repräsentativen Elementarvolumen für die einzelnen Strukturelemente verknüpft. Die Strukturelemente müssen dabei so groß sein, dass für sie statistisch mittlere Verhältnisse hinsichtlich der sie charakterisierenden Parameter angenommen werden können [23].

Das hydrologische Teilmodell beinhaltet die zur Verfügung stehenden Wassermengen aus Grundwasserneubildung und Gewässern bzw. für Grundwasserentnahmen im Sinne der Massenerhaltung des Wasser sowie die Vorstellungen zum Fließverhalten (Gleichenpläne) und die instationären Gesichtspunkte dieser Komponenten

(Grundwasserganglinien). Es entsteht aus meteorologischen, hydrologischen, bodenkundlichen und wasserwirtschaftlichen Komponenten.

Hinweise zu Quellen von Naturdaten gibt [27].

Die Aussagefähigkeit von Modellen kann verbessert werden, wenn auch die Einzugsgebiete in Randlage z.B. bezüglich der Grundwasserneubildung genau untersucht werden.

#### 2.7.3.1.3 *Konzeptionelles Schadstoffmodell*

Ausgehend von der Fragestellung müssen prioritäre Kontaminanten bestimmt werden, deren Verhalten simuliert werden soll (und kann).

Es wird empfohlen, qualitätssichernd direkt Grund- bzw. Bodensickerwasser unter der belasteten Bodenfläche in Mächtigkeit der der Grundwasserneubildung entsprechenden Tiefe (meist wenigen Dezimetern) orts- und zeitdifferenziert (verschiedenen hydrologische Situationen) zu beproben, wenn dies hinsichtlich des prognostizierten zeitlichen Transportverlaufs sinnvoll ist. An die gleiche Bedingung ist eine alternative oder ergänzende zonare Überwachung des Grundwassers im unmittelbaren Abstrom gebunden. Findet schon ein quasi stationärer Schadstoffaustrag in das Grundwasser statt, liefern lang andauernde Abpumpversuche (sog. Migrationpumpversuche) mit begleitender Analytik zumindest für den Versuchszeitraum verlässliche Daten zum Schadstoffmassentransport. Für eine langfristige Prognose des Austrags von Kontaminanten aus der ungesättigten in die gesättigte Zone sind i.d.R. Versuche und eine modelltechnische Bearbeitung erforderlich.

Für Modellierungen im Rahmen von Sanierungsuntersuchungen können flächenrepräsentative Laborversuche Feldversuche in ihren Aussagen stützen. Zudem sollten Aussagen zur Maßstabsabhängigkeit der im Labor ermittelten Parameter getroffen werden. Variantenvergleiche zu den Sicherungs- und Dekontaminationsmaßnahmen können laborativ und modelltechnisch gestützt werden, um bei der modellgestützten Simulation zur Sanierungsplanung auf gesicherten Erkenntnissen aufbauen zu können [4].

Wichtige Daten für prinzipielle Überlegungen zur möglichen emittierten Gesamtmenge von Kontaminanten kann die historische Erkundung liefern. Bisweilen setzen Differenzen zwischen Einkauf- / Entsorgungsmengen Obergrenzen für die Gesamtmenge emittierter Kontaminanten. Des Weiteren ist der mögliche grobe zeitliche Verlauf der Kontamination anhand historischer und technischer Untersuchungsergebnisse bisweilen in Umrissen rekonstruierbar (z.B. Zeit vom Betriebsbeginn bis zur bindigen Abdeckung einer Altablagerung).

#### Ungesättigte Zone

Der zeitliche Verlauf der Wasserversickerung in der ungesättigten Zone ist für die Berücksichtigung einer möglichen Kinetik bei den Adsorptions- und Desorptionsvorgängen und den Vergleich mit dem zeitlichen Verlauf von Wasserständen und gemessenen Konzentrationen im Grundwasser zur instationären Eichung von Strömungsmodellen der gesättigten Zone von Interesse. Für seine Berechnung werden i.d.R. 1D - vertikale Modelle verwendet.

Für den Transport von Kontaminanten mit dem Zwischenabfluss können theoretisch Transportmodelle analog denen für die gesättigte Zone zum Einsatz kommen. Das Auftreten von Zwischenabfluss ist jedoch oft nur temporär und das Liegende nicht

völlig undurchlässig, so dass eine kombinierte Situation von Stofftransport unter zeitweilig gesättigten, zeitweilig ungesättigten Bedingungen entsteht.

Die Simulation von an die Grundwasserneubildung gekoppelten Stofftransportprozessen steht noch am Anfang ihrer Entwicklung. Während im gesättigten Bereich unabhängig vom Lösungsverfahren mit gleichen Parametersätzen zumindest ähnliche Ergebnisse erzielt werden, ergeben sich im ungesättigten Bereich z.T. deutlich voneinander abweichende Ergebnisse [4].

Werden in einer ersten Bearbeitungsphase Migrationsparameter aus Literaturdaten herangezogen, ist stets zu beachten, dass die Versuchsbedingungen tatsächlich zutreffend für den eigenen speziellen Anwendungsfall sind bzw. die Idealisierung, die bei der Verwendung der Literaturwerte getroffen wird, aufgabenadäquat ist.

In [4] werden für die Transportmodellierung in der ungesättigten Zone Laborversuche zur Parameterermittlung (0-dimensionale Batch- bzw. REV - Tests und 1-dimensionale Bodensäulenversuche) empfohlen, verbunden mit Sensitivitäts- und Szenarioanalysen zur Planung von weiteren Labor- sowie von Felduntersuchungen und des Monitoring. Dabei sind auch die Zeitmaßstäbe der einzelnen Prozesse zu betrachten.

Günstig sind in diesem Zusammenhang auch lokal und zeitdifferenzierte Bodensickerwasserbeprobungen. Sie sind wegen der lokalen Differenzen in der Bodenbelastung und in der den Transport bestimmenden Struktur der ungesättigten Zone als auch wegen der Zeitabhängigkeit der Grundwasserneubildung und einer möglichen Kinetik bei den Adsorptions- und Desorptionsvorgängen in der ungesättigten Zone [19] zum Vergleich mit Laborversuchen und zur Verifizierung der Modellvorhersagen empfehlenswert.

#### Gesättigte Zone

Eine mögliche Grundbelastung mit dem oder den zu modellierenden Kontaminanten, die schon im Anstrom des Schadensfalles vorhanden ist, muss bei der Transportmodellierung mit bedacht werden. Meist kann die zusätzliche Belastung durch den Kontaminanten im Schadensfall selbst separat behandelt werden. Dies ist jedoch z. B. dann nicht mehr der Fall, wenn das Adsorptions- und Desorptionsverhalten von der Konzentration des Kontaminanten abhängig ist.

In der Regel wird der Transport der Schadstoffe ohne Rückwirkung auf das Fließen des Wassers betrachtet und lediglich die Massenerhaltung der Kontaminanten überwacht. Die Kontaminanten sind die Dispersion betreffend in physikalischer Hinsicht den gleichen Vorgängen ausgesetzt wie die Wasserteilchen. Die Diffusion folgt der BROWNschen Molekularbewegung. Ad- / Desorption werden meist über Verteilungsgleichgewichte (Isothermen) beschrieben. Zum Teil werden jedoch auch chemische Reaktionen direkt modelliert (z.B. geochemisch - thermodynamische Modellierung).

Bei hohen Schadstoffkonzentrationen wurde auch ein dichtebedingtes Absinken von Schadstofffahnen beobachtet. In solchen Fällen oder auch im Bereich von Salzstöcken ist mitunter eine dichtegekoppelte Modellierung erforderlich, bei Einbeziehung der Temperatur auch ggf. eine thermohaline Modellierung.

#### 2.7.3.1.4 Auswahl der Modellsoftware

Die Modellsoftware dient der Realisierung der Simulationsrechnungen. Üblicherweise werden auf dem Markt verfügbare Programme eingesetzt. Hinweise zu Kriterien bei der Auswahl geeigneter Software gibt die Checkliste (siehe Anlage 2).

Der der Software innewohnende Lösungsansatz sollte dem Auftragnehmer vertraut sein und hinsichtlich seiner Gültigkeit für die Problemstellung geprüft und dem Auftraggeber begründet werden. Vom Auftragnehmer können Referenzberechnungen vorgelegt werden, die ähnliche Aufgabenstellungen behandeln.

Auch sind sog. benchmark - Berechnungen möglich. Sie dienen der Leistungseinschätzung eines Programmes und können bei numerischen Modellen vergleichend zu bekannten, oft analytisch ermittelten Lösungen vorgenommen werden.

Einen Überblick zu Programmen für die Simulation der Strömung und des Stofftransports in der gesättigten und ungesättigten Zone und Berechnungsbeispiele geben [2],[3] und [4].

Darüber hinaus können eine Reihe von Internet-Angeboten von teils kommerziellen und nichtkommerziellen Anbietern (Geologische Dienste, Umweltbehörden) genutzt werden [10] - [13].

#### 2.7.3.2 Modellerstellung (inkl. Diskretisierung)

Unter Modellerstellung wird hier die Überführung der Parameter (aus der Natur erhobene Daten und errechnete bzw. experimentell bestimmte Daten) in die Software verstanden. Da sie bei numerischen Lösungen eng an die Festlegung der dazugehörigen diskreten Feldelemente geknüpft ist, ist die Diskretisierung an dieser Stelle ebenfalls Gegenstand der Betrachtung.

Übliche Fehlerquellen sind:

##### **Diskretisierungsfehler:**

Der bei der Diskretisierung entstehende Fehler bei der Überführung der geometrischen Abmessungen von tatsächlichen Objekten (z.B. Fluss, Oberflächengewässer) in die Gitterstruktur (Belegung der Flächen- bzw. Volumenelemente) ist zu beachten. Im Bereich größerer Strömungsgradienten ist eine feinere Diskretisierung erforderlich, wenn sie für den Strömungs- und Transportprozess von Interesse sind. Ebenso ist bei der Transportmodellierung eine feinere Diskretisierung im Bereich von abrupten Parameterübergängen (z.B. Sand/Geschiebelehm) erforderlich – ggf. dreidimensional.

Ein Maß für die räumliche und zeitliche Diskretisierung können Gitter - PECLER - Zahl und die COURANT - Zahl liefern [20]. Einige Programme verfügen auch über Verfahren des automatic mesh refinement (AMR) auf der Basis von mathematischen Fehlerschätzern. Durch eine zu große Anzahl von Feldelementen und/oder Berechnungszeitschritten können jedoch auch die dabei auftretenden Rundungsfehler von Bedeutung werden.

**Systematische Fehler** entstehen durch Rundungen von Werten, die die Software u.U. verlangt, oder auch durch die Anwendung von automatischen Parameterbelegungsprogrammen.

**Zufällige Fehler** entstehen durch Eingabefehler von Werten.

Bei komplexeren geologischen Modellen, bei denen eine numerische Lösung erforderlich ist, ist die Verarbeitung der geologischen Informationen in einer GIS - gestützten Datenbank sinnvoll. Besonders effektiv ist dieser Weg, wenn von hier aus die diskrete Parameterbelegung vorgenommen werden kann.

Die unsachgemäße Diskretisierung in Stofftransportmodellen [20] ist ein häufiger Fehler, dem entsprechend der o.g. Hinweise begegnet werden muss. Der Einsatz von Fehlerschätzern für die automatische Netzverfeinerung oder Steuerung adaptiver Gitter (hierbei läuft der Bereich der Netzverfeinerung mit den Schadstoffen durch das Modellsystem) wirft die Frage nach deren Qualität auf.

### **2.7.3.3 Kalibrierung und Parameteranpassung (inkl. Sensitivitätsanalyse)**

Zunächst ist eine Überschlagsrechnung zum Vergleich der in das Modell einströmenden Wassermengen (z.B. Grundwasserneubildung, Zufluss von Randbedingungen) mit den ausströmenden (z.B. Abfluss über Randbedingungen, Grundwasserentnahmen) empfehlenswert. In einem stationären Modell müssen diese gleich sein, bei einem instationären gleich der Speicheränderung. Dieser Schritt kann vor der dem eigentlichen Einsetzen des Berechnungsprogramms manuell oder durch Hilfsprogramme erfolgen. In vielen Simulationsprogrammen sind Berechnungen der Wasserbilanzanteile für das gesamte Modellgebiet als auch Teile desselben implementiert und zur Bewertung der Ergebnisse ohnehin vorgesehen.

Zusätzlich sind Tests empfehlenswert, ob die Abbruchkriterien richtig gesetzt sind bzw. der Abbruchfehler vernachlässigbar klein ist.

Die Daten müssen hinsichtlich ihrer flächigen bzw. räumlichen Repräsentanz bewertet werden. Fehlt eine solche Betrachtung ganz, sind grobe Fehler bei der Übertragung punktuell gewonnener Daten auf die Fläche oder den Raum wahrscheinlich.

Bei der Kalibrierung von Modellen werden Vergleiche mit Messdaten zum Modellfitting bzw. dessen Überprüfung herangezogen. Mögliche Messfehler in diesen Daten sind genauso in Betracht zu ziehen, wie dies bei den Modelleingangsdaten erforderlich ist. Werden geschätzte Eingangsdaten des Modells bei der Kalibrierung verändert, so muss das im physikalisch sinnvollen Bereich geschehen. Die vorgenommenen Veränderungen, die jeweilige Absicht und die Reaktion des Modells sollten im Eigeninteresse des Modellierers (effektiven Veränderung von Kalibrierparametern, Beleg der zeitaufwändigsten Phase der Modellierung, Darlegung der schon durchdachten Aspekte) detailliert und unter Benennung von ggf. bestehenden Schwierigkeiten aufgezeichnet werden.

Es sollte immer nur ein Parameter pro Kalibrierungsschritt verändert werden. Bei gleichzeitigem Kalibrieren von mehreren Parametern ist das Problem der Mehrdeutigkeit zu beachten. Werden zu vielen Parameter variiert, wird oft vom „overfitting“ gesprochen.

Vorher ist zu überlegen, welche Daten in welchem Umfang variiert werden sollten. Der Unterschied zwischen gemessenen und berechneten Daten kann mit Hilfe von statistischen Verfahren bewertet werden. Weiterhin kann ein direkter Vergleich der Wasserbilanzen und von Isolinienplänen erfolgen. Die Messdaten müssen bezogen auf die Berechnung hydrologisch repräsentativ sein.

Bei dem Vergleich mit den Messdaten muss die Position der Messstelle (z.B. des virtuellen Pegels) im Modell beachtet werden.

Üblicherweise werden Parameter zonenweise verändert.

Um den Grad der Unsicherheiten bei der Parameteranpassung reduzieren zu können, kann man auf verschiedene Techniken zurückgreifen:

### *Worst case Technik:*

Sie besteht darin, bei der Parameterwahl innerhalb des möglichen Fehlerintervalls immer die Werte zu wählen, die zu den ungünstigsten Resultaten führen. Dadurch sind Ergebnisse möglich, die auf "der sicheren Seite" liegen, also z.B. für eine Gefährdungsabschätzung den schlimmsten anzunehmenden Zustand darstellen. Um herauszufinden, welche Richtung der Parametervariation zu ungünstigeren Ergebnissen führt, ist eine Sensitivitätsanalyse notwendig.

### *Szenariotechnik*

Die Szenariotechnik versucht, von den Parameterwerten her in sich konsistente Bilder der Wirklichkeit zu entwerfen die obere und untere Schranken sowie mittlere Fälle des tatsächlichen Geschehens abstecken können.

### *Stochastische Modellierung*

Neben den exakten, deterministischen Lösungen existieren eine Reihe von Möglichkeiten zur Erzeugung von stochastischen Parameterfeldern. Ihnen liegt die systematische Suche nach wahrscheinlichen Verteilungen von Parametern nach systematischen Gesetzmäßigkeiten zu Grunde. Es wird ein Ensemble von Lösungen erzeugt, welches einen Gültigkeitsbereich innerhalb vorgegebener Grenzen darstellt, z.B. die Erzeugung mehrerer stochastischer, heterogener Durchlässigkeitsfelder für einen Aquifer. Gängige Verfahren sind die Monte-Carlo-Methode oder fuzzy-Verfahren.

### *Inverse Modellierung*

Bei der inversen Modellierung wird das Berechnen der Parameter mit Hilfe einer Software zur automatischen Kalibrierung durchgeführt [30],[31],[33]. Hierbei findet zuerst eine Parameteranpassung statt, gefolgt von einer Simulationsberechnung unter Verwendung der neu angepassten Parameter [34],[35],[37],[38]. Hierbei wird ein Optimum zwischen dem Parametersatz und den Ergebnissen berechnet [32] bzw.[36].

Viele Eingangsdaten werden geschätzt und über ihre Genauigkeit ist wenig bekannt. Bei einer automatischen Kalibrierung muss jedoch eine Trennung zwischen bekannten und unbekanntem Modellparametern gemacht werden. Die maximale Anzahl zu berechnender Parameter hängt von der Anzahl vorhandener Messergebnisse (z.B. Pegelmessungen) ab und davon wie gut das Modell die Realität nachbildet. Um die Anzahl zu bestimmender Parameter zu minimieren werden Gruppen von Werten (oder Konstanten) und Randbedingungen gleichzeitig berechnet.

Die Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Daten (Restfehler) sind Fehler, die sich das Modell nicht erklären kann. Hierzu ist eine Fehleranalyse notwendig.

### *Sensitivitätsanalyse*

Durch eine Sensitivitätsanalyse kann die Auswirkung der Unsicherheiten bezüglich diverser Modellparameter auf das Modellergebnis überprüft werden [38].

Die Parameter werden dabei so variiert, dass ermittelt werden kann, welche oder Parameterveränderung den größten Einfluss auf die Veränderung des Berechnungsergebnisses hat. Somit kann ermittelt werden, welche Parameter am "unsichersten" sind und die Berechnungsergebnisse dementsprechend bewertet werden.

Es sei darauf hingewiesen, dass gerade die Szenarientechnik, die inverse Modellierung sowie die Sensitivitätsanalyse verdeutlichen können, welche zusätzlichen Untersuchungen welchen Beitrag zur Verbesserung der Aussagesicherheit einer Strömungs- und/oder Stofftransportmodellierung leisten können.

#### *Fehleranalyse bei der Kalibrierung:*

Hierbei werden können drei Fehlergruppen unterschieden werden:

- Akzeptable Modellfehler;
- Verkehrte Parameterauswahl;
- Eingabefehler und konzeptionelle Modellfehler.

**Akzeptable Modellfehler** sind Fehler welche logisch zu erklären sind und nicht die Ergebnisse zur Fragestellung des Modells beeinflussen [32]. Zum Beispiel können in der direkten Nähe von Brunnen auf Grund der Diskretisierung systematische Abweichungen entstehen. Ebenso kann durch das Vorkommen von lokalen Inhomogenitäten, welche nicht in dem Modell berücksichtigt sind, Abweichungen zwischen kurz beieinander gelegenen Pegeln auftreten. Die wichtigsten Fehler in einem qualitativ guten Modell sind erklärbar und somit zu akzeptieren.

Eine **verkehrte Parameterauswahl** ergibt sich nicht direkt aus der Restfehlerberechnung, sondern aus der statistischen Information.

Eine Restfehleranalyse kann ebenso ergeben, dass das Modell **Eingabefehler** hat, z.B. ein Entnahmewert falsch oder nicht berücksichtigt worden ist. Ebenso kann aus der Fehleranalyse folgen, dass das Modell in mehr Ebenen unterteilt werden müsste, oder dass z.B. eine Abhängigkeit der Dichteströmung vernachlässigt worden ist. Manche Parameter können nicht unabhängig voneinander berechnet werden. Beispiele hierzu sind u.a.:

- Die Transmissivität kann nicht ermittelt werden, wenn die Grundwasserströmung nur durch ein Festpotenzial auf den Rändern des Modells bestimmt wird;
- Der Leakagefaktor eines Grundwasserstauers kann nicht berechnet werden, wenn keine Potenzialdifferenz vorhanden ist;
- Bei einem freien Grundwasserspiegel, bei dem die Grundwasserströmung nur bestimmt wird durch den Abfluss der Grundwasserneubildung, kann die Grundwasserneubildung nicht unabhängig von der Transmissivität berechnet werden.

#### **2.7.3.4 Anwendungsrechnung mit Szenarien**

Bestehen unterschiedliche strukturelle Auffassungen zur Interpretation geologischer und geophysikalischer Daten oder in wichtigen Bereichen des Modellgebietes nicht schließbare Datenlücken, müssen ggf. mehrere Modellvarianten hinsichtlich des geologischen Modellaufbaus untersucht werden.

Bei den Modellrechnungen selbst besteht die Gefahr, dass Diskretisierungsfehler (Abschnitt 2.7.3.2) unerkannt bleiben.

Schließlich können auch Bedienfehler bei der Nutzung gerade komplexer Modellsoftware nicht ausgeschlossen werden.

#### Stofftransportsimulation

Transportmodelle sind mit einer Reihe von Unsicherheiten verbunden. Oft liegen keine oder sehr unzureichende Daten zur Emission von Kontaminanten an der Ein-

trittsstelle in das Grundwasser vor (Anfangs- und Randbedingungen). Ebenso sind die Transportparameter (Diffusion, Dispersion, Ad-/Desorption, Reaktionen) mit erheblichen Unsicherheiten behaftet. Dennoch kann die Transportmodellierung nützliche Aussagen liefern, wenn

- konservative, d.h. zu Aussagen mit Sicherheitsreserven führende Annahmen getroffen werden,
- der Einfluss von Unsicherheiten in Parametern auf die Unsicherheit von Ergebnissen im Sinne der Sensitivitätsanalyse untersucht wird oder
- eine stochastische Modellierung als Kombination der Modellierung von Mittelwert und Streuungsmaß vorgenommen wird.

Kategorien von Konservatismen, die Bedeutung der Sensitivitätsanalyse für das Verständnis des Einflusses verschiedener Parameter und die Möglichkeiten der stochastischen Modellierung wurden in [20] dargestellt.

Neben der dispersionsfreien Bahnlinienlösung werden für die Transportmodellierung im engeren Sinne häufig Finite-Differenzen- und Finite-Elemente-Verfahren, das Charakteristikenverfahren und das Random-Walk-Verfahren eingesetzt. Untersuchungen zur Anwendung dieser Verfahren im Detail hinsichtlich der Unterdrückung der numerischen Dispersion und Oszillation, verbunden mit Hinweisen zur erforderlichen Diskretisierung, zur Ausrichtung der Elemente bei FE-Verfahren, zur Zeitschrittsteuerung und dem Einfluss der Partikelanzahl, wurden von Kinzelbach [20] erarbeitet. Insbesondere wird hier auf eine Diskretisierung quer zur Hauptausbreitungsrichtung der Kontaminanten ( $\Delta x = \alpha T$ ) hingewiesen [ebenda].

Zur Orientierung kann zu Beginn der Transportmodellierung eine dispersionsfreie Bahnlinienberechnung auf der Basis des Strömungsfeldes erfolgen. Ergebnisse von Transportberechnungen im engeren Sinne können später damit verglichen und überschlägig auf Plausibilität geprüft werden.

Ebenso ist die Anwendung unterschiedlicher Berechnungsverfahren (z.B. Random-Walk im Vergleich mit dem Transport in einem Finite-Differenzen-Netz) sinnvoll

### **2.7.3.5 Bewertung der Ergebnisse (inkl. Fehlerbetrachtung)**

Das Berechnungsergebnis und die Szenarien können zunächst überschlägig hinsichtlich der Wasserbilanzen auf Plausibilität geprüft werden.

Generell muss im Auge behalten werden, dass die Sicherheit von Modellaussagen vom Grad der Erfassung bzw. allgemeiner der Erfassbarkeit von Naturzuständen wesentlich bestimmt wird [28]. Vor einer Überinterpretation der Ergebnisse ist zu warnen. Ein Modell hat seine Aufgabe erfüllt, wenn es erlaubt, eine robuste Lösung zu finden, die auch dann noch Sinn macht, wenn die tatsächlichen Parameterwerte von den bei der Modelleichung bestimmten in gewissem Rahmen unterschiedlich sind. [20]

Abhängig vom Lösungsverfahren und der verwendeten Software treten bei numerischen Lösungen folgende mathematisch bedingten Probleme auf [5]:

- Konvergenzprobleme
- Numerische Dispersion
- Numerische Oszillation

Die häufigste Probleme bereitet die numerische Dispersion. Sie ist eng an die Diskretisierung geknüpft.

## **2.7.4 Dokumentation und Abnahme durch den Auftraggeber**

### **2.7.4.1 Allgemeines**

Die Qualität einer Modellstudie lässt sich über die vorgelegte Dokumentation und Darstellung der Ergebnisse beurteilen. Es ist prinzipiell vorteilhaft, und das wird an dieser Stelle auch ausdrücklich empfohlen, die Ergebnisse der Strömungs- und Schadstofftransportmodellierung als **gesonderte Dokumentation** einer Altlastenbearbeitung zu erarbeiten. Die Dokumentation soll den Arbeitsprozess der Modellerstellung vollständig beschreiben und hat das Ziel, die Ergebnisse zu präsentieren. Im Allgemeinen sollte die Aufbereitung so stattfinden, dass die Arbeiten gemäß dem Ablauf in Abbildung 2 ähnlich sind und eindeutig nachvollziehbar und überprüfbar sind.

Allgemeine Beschreibungen zur Geologie und Hydrologie sollen nur soweit in die Dokumentation aufgenommen werden, wie sie relevant für die Fragestellung und die Modellerstellung sind.

Bei einer Fremdvergabe der Modellierungsarbeiten sollte die Angebotsanfrage mit der Beschreibung der zu bearbeitenden Fragestellung sowie das Angebot inhaltlich einen Bestandteil der Dokumentation bilden. Auch bei einer eigenen Bearbeitung sollte die Fragestellung vor Beginn der Modellierungsarbeiten deutlich beschrieben sein. Die Dokumentation sollte bereits mit der Dateninventarisierung und der Modellerstellung zu beginnen. Sie ist eine wichtige Arbeitshilfe für den Bearbeiter, um Zwischenergebnisse abzuleiten und eventuelle Daten- und Modellfehler frühzeitig zu erkennen. Mit Hilfe der Dokumentation soll der ganze Modellprozess transparent und nachvollziehbar sein.

Die Dokumentation soll aus einem ausführlichen Textteil mit Diagrammen, Tabellen und Karten bestehen.

Der Einsatz von geographischen Informationssystemen (GIS) kann bei der Modellerstellung und -bearbeitung, ebenso hilfreich sein bei der Erstellung der Dokumentation. Er ist aber nicht zwingend erforderlich.

### **2.7.4.2 Dokumentationsbestandteile**

Folgende Dokumentationsbestandteile sollten, in soweit sie für die Art der Modellierung zutreffen, berücksichtigt werden:

#### *Einleitung und Fragestellung:*

Für alle Modellstudien ist am Anfang eine ausführliche Beschreibung der zu Grunde liegenden Fragestellung aufzunehmen. Hierbei soll klargestellt werden was von dem zu erstellenden Modell zu erwarten ist. Bei der Altlastenbearbeitung ist hierbei eine Standortbeschreibung mit Angaben zur Ausdehnung, historischer Entwicklung etc. erforderlich.

### *Datenrecherche und Datenbeschreibung:*

Eine evtl. durchgeführte Datenrecherche ist vollständig zu dokumentieren, versehen mit einem vollständigen Nachweis der Datenquellen, auch wenn manche Datenquellen keine verwertbaren Daten für das Modell geliefert haben.

Eine Beschreibung der Geologie bzw. Stratigraphie (evtl. mit geologischen Profilen) ist nur insoweit aufzunehmen wie sie relevant für die Fragestellung und die Modellarbeiten ist. Zum Beispiel kann eine Abhandlung über die Gesteinsgenese sinnvoll sein wenn dies eine hydraulische Anisotropie zur Folge hat. Grundsätzlich sind allgemeine geologische Abhandlungen zu vermeiden. In einem Kapitel Geologie soll deutlich die Beziehung der Geologie zur Fragestellung und dem Modell hergestellt werden. Bei einem Grundwasserströmungsmodell gehört eine Beschreibung der Hydrologie und Hydrogeologie ebenfalls zur Dokumentation. Die Morphologie des Gebietes ist allgemein und in ihrer Wirkung auf die Grundwasserneubildung zu beschreiben. Wenn die Morphologie aus digitalen Daten abgeleitet wird ist auch die Rasterweite oder Größe der Dreiecksvermaschung darzustellen. Art, Herkunft, Zeitraum, Umfang Größe und räumliche Verteilung der Klimadaten (z.B. Niederschlag, Verdunstung etc) sind vollständig in dem Bericht aufzunehmen. Insbesondere sollte hier der Zeitraum, welcher für die Modellberechnungen von Interesse ist besonders dargestellt sein.

Die Oberflächengewässer sind hinsichtlich ihrer Lage, Ausbildung, Pegelstände und Kolmation in Form von Text, Tabellen und Karten darzustellen. Darstellungen von vorliegenden  $k_f$ -Werten sowie Pegelstände des Grundwassers können tabellarisch oder in Form von Diagrammen aufgenommen werden. Wenn Auswertungen von Pumpversuchen vorgenommen worden sind, sollten diese in einem separaten Abschnitt im Anhang behandelt werden. Im Textteil soll lediglich eine allgemeine Beschreibung und Zusammenfassung der Ergebnisse erfolgen.

Bei einem Strömungsmodell der ungesättigten Zone sollte eine Bodenbeschreibung, eine Beschreibung der Kornverteilung, der Bodenfeuchtigkeit, eventuell vorhandener Lysimeterdaten und Labordaten einen Bestandteil der Dokumentation bilden. Insbesondere sind hier auch eine Flächenverteilung der Grundwasserneubildung, Flurabstände der oberflächennahen Grundwasserspiegel, Landnutzungsdaten und Versiegelungsgrad darzustellen.

Bei einer Transportmodellierung ist eine Beschreibung der Ausgangsdaten, des zu Grunde liegenden Strömungsmodells (analytisch, numerisch oder konzeptionell), der Quellen und Senken, mögliche Stoffeinträge in die Dokumentation aufzunehmen.

Ebenso sollten auch die Grenzen des eingesetzten Verfahrens / der verwendeten Software deutlich gemacht werden. Weiterhin sollte eine Beschreibung der Transportparameter in Abhängigkeit von Stoffen, Grundwasserleiter und Gebietsausbreitung (Dispersion, Advektion etc.) erfolgen. Bei einer Transportmodellierung der ungesättigten Zone werden jedoch häufig angenommene Migrationsparameter bzw. Werte aus der Fachliteratur verwendet. Diese sind dann vollständig zu dokumentieren, mit einer Beschreibung evtl. durchgeführter Laborversuche (0- und 1- dimensional) und einer Beschreibung des Monitoringprogramms.

### *Modellgeometrie:*

Die Geologie und Hydrologie sollen hier schematisiert in Einheiten zusammengefasst werden. Die geologischen und hydrologischen Randbedingungen sind zu beschreiben. Hieraus ableitend soll die Auswahl des gewählten mathematischen Verfahrens dokumentiert werden (z.B. bei Strömungsmodellen: 2- oder 3-dimensionale Betrachtung, Finite Elemente, Finite Differenzen oder Analytische Elemente, oder bei Transportmodellen z.B. Charakteristikenverfahren, Random Walk etc). Die aus der Berechnung abgeleitete Modellgeometrie soll im Textteil beschrieben und in Karten im geeigneten Maßstab dargestellt werden. Detailgebiete mit einer kleinen oder komplizierten Modellgeometrie sind in einem kleineren Maßstab gesondert darzustellen. Die Auswahl des Verfahrens soll auch in Bezug zur Fragestellung diskutiert werden.

### *Modellerstellung und Datenübernahme:*

Sowohl die Ausgangsdaten als auch die Übertragung der Daten auf die Modellgeometrie sind soweit wie möglich in Karten (im geeigneten Maßstab) darzustellen. Ein Abgleich zwischen Ausgangsdaten und Modelldaten soll möglich sein. Das Verfahren der Datenübertragung ist zu beschreiben und darzustellen (z.B. Thiessenpolygone, Dreieckvermaschung, Kriging etc.).

### *Modellkalibrierung*

Bei der Beschreibung der Modellkalibrierung ist eine Begründung der gewählten Zeitperiode notwendig. Die Auswahlkriterien für eine stationäre oder instationäre Kalibrierung sind darzulegen. Die angewendete Strategie der Parameteranpassung während der Kalibrierung ist zu beschreiben. Es ist nicht unbedingt notwendig alle Berechnungen der Kalibrierung zu beschreiben, jedoch aber die Folge von Veränderungen der Parametersätze. Es können dann exemplarisch Ergebnisse in Form von Karten, Tabellen und Diagrammen erzeugt werden. Das Endergebnis ist vollständig zu präsentieren. Bei Strömungsmodellen gehören u.a. hierzu:

- ✓ Isolinienpläne der gemessenen und berechneten Grundwasserstände der einzelnen Stockwerke,
- ✓ Differenzenpläne und tabellarische Darstellungen zwischen gemessenen und berechneten Grundwasserständen
- ✓ Flurabstandskarten
- ✓ statistische Auswertungen (positive und negative Abweichungen, absolute Abweichungen, Standardabweichungen, etc.)
- ✓ Wasserbilanzen (evtl. Teilbilanzen)
- ✓ Darstellung der Randbedingungen und Auswertungen der Strömung über die Ränder
- ✓ Darstellungen in Form von Strombahnen über die altlastrelevante Fläche (evtl. mit Laufzeitangaben)
- ✓ Darstellung und Diskussion der absoluten und relativen Fehler des Modells.

In der Dokumentation soll die Empfindlichkeit des Modells und der verwendeten Parameter ersichtlich sein. Eine inverse Modellierung kann ggf. hierzu beitragen.

Bei der ungesättigten Zone soll außerdem ein Abgleich mit der Grundwasserneubildung der gesättigten Zone stattfinden.

Für der gemachten Annahmen soll eine Betrachtung aufgestellt werden, wie diese sich auf das Modell auswirken.

### *Ergebnisdarstellung*

Die Ergebnisse sind in Plänen und Karten darzustellen. Hierzu gehören die Isolienpläne von allen Modellebenen sowie die mit Hilfe von Strombahnen dargestellte Grundwasserströmung. Werden Darstellungen in Karten zu groß und unübersichtlich, sollten sie in verkleinerter Form in den Text mit vereinfachter Topographie bzw. in tabellarischer Form aufgenommen werden.

Das Intervall der Isolien ist so zu wählen, dass die Strömungsverhältnisse eindeutig daraus hervorgehen. Eventuelle Abweichungen, bedingt durch Randbedingungen, sind im Textteil gesondert zu erwähnen. Strombahnen können klassifiziert werden nach Laufzeit, Herkunft oder Ziel. Die gesamte Wasserbilanz ist zu dokumentieren und, wenn möglich, ebenso unterschiedliche Teilwasserbilanzen. Eine Darstellung in Form von Strombahnen führt zu einem besseren Verständnis der Strömungsverhältnisse. Strombahnen können in Karten oder in Schnitten dargestellt werden, unter Berücksichtigung der Laufzeit, Herkunft, Ziel oder Modellebene. Angaben über die gesamte Wasserbilanz des Modells und über Teilwasserbilanzen sind im Endbericht darzustellen. Bei instationären Verhältnissen sind Zeitreihen für die entsprechenden Datengruppen darzustellen. Es sind Angaben über die Gültigkeit des Modells in Betracht zu den berechneten Szenarien zu machen (z.B. relative Fehler, Wasserbilanzen etc). Eine Bewertung der Ergebnisse gehört ebenso zur Dokumentation.

### **2.7.4.3 Datenübergabe an die Behörde**

Zur Datenübergabe an die Behörde gehört ein vollständiger Bericht, wie zuvor beschrieben, ggf. mit farbigen Karten und Plänen. Digitale Bestände können der Behörde ebenso übertragen werden, jedoch wäre hier vorab zu klären wofür diese Daten benötigt werden. Wenn ein Modell weiter gepflegt oder damit weitere Berechnungen durchgeführt werden sollen, sind sämtliche Daten des Modells zu übertragen. Hierzu gehört dann ebenso eine detaillierte Beschreibung der einzelnen Daten und Dateien. Für die Pflege des Modells und der Modelldaten ist die Frage zu klären, ob eine Lizenz für die Modellsoftware erforderlich und dann zu beschaffen ist.

Wenn nur die Eingangsdaten und/oder Ergebnisse in ein Informationssystem eingehen sollen, sind alle benötigten Daten und die Modellgeometrien digital aufzubereiten. Zu beachten ist hier das Format der Daten, sodass auch der Sachdatentransport Gewähr leistet ist. Empfehlenswert ist, dass bei Anfang der Modellerstellung (oder bei der Angebotserstellung) die Frage der Datenübertragung geklärt wird.

## 2.7.5 Literaturverzeichnis

- [1] Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten, Band Geochemie, herausgegeben von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
- [2] Materialienband zur Altlastenbehandlung 4/1997 "Simulation von Grundwasserströmungs- und Transportprozessen im Rahmen der Altlastenbehandlung", herausgegeben vom Sächsischen Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung, Bereich Öffentlichkeitsarbeit und dem Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie, ebenfalls erschienen als UBA-Text Nr.203 40 109/07
- [3] Materialien zum Altlastenhandbuch Niedersachsen: "Berechnungsverfahren und Modelle", herausgegeben vom Niedersächsischen Landesamt für Ökologie, Springer Verlag Berlin Heidelberg 1996
- [4] Materialien zur Altlastenbehandlung 5/1997: Simulation des Schadstofftransportes in der ungesättigten Zone im Rahmen der Altlastenbehandlung, herausgegeben vom Sächs. Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung, Bereich Öffentlichkeitsarbeit und dem Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie, Dresden
- [5] BUSCH, K. F.; LUCKNER, L.; TIEMER, K.: Geohydraulik, Lehrbuch der Hydrogeologie Band 3, Gebrüder Bornträger Berlin-Stuttgart 1993
- [6] LEGE, T.; KOLDITZ, O.; ZIELKE, W.: Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten, Band 2, "Strömungs- und Transportmodellierung", herausgegeben von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe
- [7] HÖLTING, BERNWARD: "Hydrogeologie", Ferdinand Enke Verlag Stuttgart 1996
- [8] KINZELBACH, RAUSCH: Grundwassermodellierung - Eine Einführung mit Übungen, Gebrüder Bornträger Berlin, Stuttgart 1995
- [9] Kinzelbach, W. (1987): Numerische Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser, Oldenbourg - Verlag, München
- [10] <http://www.mines.edu/research/igwmc/software>
- [11] <http://water.usgs.gov/software/>
- [12] <http://www.scisoftware.com>
- [13] <http://www.epa.gov/ada/models.html>
- [14] HELMIG, R: Einführung in die numerischen Methoden der Hydromechanik, Heft 86, Mitteilungen des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart 1996
- [15] LANGGUTH, VOIGT: Hydrogeologische Methoden
- [16] KOBUS: Wärme- und Stofftransport im Grundwasser 1992
- [17] HOLZBECHER, ECKEHARD: Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie - Eine Einführung, Springer Verlag
- [18] CHIANG, W.H.; KINZELBACH, W.; RAUSCH, R.: ASM for Windows, Bornträger Verlag Stuttgart, Berlin 1998

- [19] Hildenbrand, M., Luckner, L. (1995): Laborative Untersuchungen zur Beschreibung des Migrationsverhaltens sprengstofftypischer Verbindungen in Porengrundwasserleitern, Acta hydrochim. Hydrobiol. 23 (1995) 3, VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim
- [20] Kinzelbach, W. (1990): Computer - Modelle zur Grundwasser - Hydraulik und zum Stofftransport, Materialien für die Sommeruniversität Bremen, unveröffentlicht
- [21] Pfützner B (1994): Gekoppelte flächen- und zeitdifferenzierte Abflussbildungsberechnungen und Grundwassermodellierung, Hrsg. WASY GmbH, Tagungsbericht des IWU, Magdeburg
- [22] Scheffer; Schachtschabel (1992): Lehrbuch der Bodenkunde, Enke, Stuttgart
- [23] Strayle, G., Stober, I., Schloz, W. (1994): Ergiebigkeitsuntersuchungen in Festgesteinsaquiferen, Geologisches Landesamt Baden - Württemberg, Freiburg i. Br.
- [24] WASY GmbH (1998 a): 3. Fachtagung Graphik - gestützte Grundwassermodellierung (Tagungsband noch in Arbeit)
- [25] WASY GmbH (1998 b): Grundwassermodell Woxdorf, Entwurf im Auftrag des LK Harburg, unveröffentlicht
- [26] Zielke, W. (1998): Modellbildung, - Kalibrierung und -Validierung, BfG Kolloquium „Mathematische Modelle in der Gewässerkunde“ 15./16.09.1998, Koblenz
- [27] DVWK 1985, Voraussetzungen und Einschränkungen bei der Modellierung der Grundwasserströmung, DVWK-Fachausschuss "Grundwasserhydraulik und -modelle, DVWK-Merkblätter, Heft 206
- [28] Zipfel, K. (1998): Grundwassermodellierung - Überblicksvortrag, BfG Kolloquium "Mathematische Modelle in der Gewässerkunde" 15./16.09.1998, Koblenz
- [29] Vreugdenhil, C. B. (1998): Modellbildung, Strömungs- und Durchflussmodellierung - Überblicksvortrag, BfG Kolloquium "Mathematische Modelle in der Gewässerkunde" 15./16.09.1998, Koblenz
- [30] Doherty, J., Brebber L.. & Whyte P.(1994), PEST: Model Independent Parameter Estimation, Watermark Computing Trademarks, Australian.
- [31] Doherty, J. (1995), MODINV: Modflow parameter optimization; Australian Centre for tropical freshwater Research, James Cook University, Townsvill
- [32] Hemker, C. J.(1997), De betrouwbaarheid van Parameters bij automatische Kalibratie, in Modelkalibratie, NHV special nummer 2, 1997, ISBN 90 803565 14, pp 39-51.
- [33] Hill, M.C. (1992), A Computer Program (MODFLOWP) for Estimating parameters of a Transient, Three-Dimensional, Ground-water Flow Model Using Non-Linear regression, U.S. geological Survey.
- [34] Hoogendoorn, J. H., B. Minnema & C. B. M. te Stroet (1997), Kalibratie met behulp van Monte Carlo en MODFLOWP: enkele ervaringen, in Modelkalibratie, NHV special nummer 2, 1997, ISBN 90 803565 14, pp 89-100.

- [35] Kamps, P. T. W. J., & T. N. Olsthoorn (1997), optimalisatie van een stationair model met MODINV, in Modelkalibratie, NHV special nummer 2, 1997, ISBN 90 803565 14, pp 75-87.
- [36] Olsthoorn, T.N. (1995) Effective Parameter optimization for Groundwater Model Calibration, in: Groundwater, jrg 33, p. 42-48
- [37] Olsthoorn, T.N. (1997), Kalibratiegereedschappen, in Modelkalibratie, NHV special nummer 2, 1997, ISBN 90 803565 14, pp 67-73.
- [38] Samper, J., J. Carrera,, G. Galarza & A. Medina (1990), A. Application of an Automatic Calibration Technique to Modelling an Alluvial Aquifer, in ModelCARE 90: Calibration and Reliability in Groundwater Modelling, IAHS Publ. no. 195 1990, pp87-95.

## 2.7.6 Glossar

### **Abstandsgeschwindigkeit**

Quotient aus Filtergeschwindigkeit und effektiver Porosität, reale Fließgeschwindigkeit eines Wasserteilchens

### **Analytische Lösung, analytisches Verfahren**

Exakte Lösung einer Differenzialgleichung

### **Anisotropie**

Unterschiedliche Eigenschaften eines Materials oder Stoffes in verschiedenen Richtungen

### **Bahnlinien**

Siehe Strombahnen

### **Bilanz, Bilanzierung**

Überprüfung der Stimmigkeit der Zu-, Abflüsse sowie der Speicherinhaltsänderung

### **Charakteristikenverfahren**

Numerisches Lösungsverfahren für Schadstofftransportprozesse

### **Diskretisierung, diskrete Elemente**

Unterteilung eines Untersuchungsraumes, einer Untersuchungsfläche in eine Vielzahl geometrischer, endlicher Teile

### **Dispersivität, hydrodynamische Dispersion**

Verlagerung von Wasser- bzw. Schadstoffteilchen abweichend zur Fließrichtung, verursacht durch unterschiedlich große Porenkanäle und Reibungsverluste

### **Durchlässigkeitsbeiwert**

Kennwert der hydraulischen Leitfähigkeit eines porösen Mediums

### **Effektive Porosität**

Für den Wassertransport im Untergrund nutzbares oder auch wirksames prozentuales Porenvolumen; Differenz aus Gesamtporenvolumen und Haftwasservolumen

### **Epignose**

Berechnung von bereits vergangenen Systemzuständen

### **Finite-Elemente-; Finite-Differenzen-; Finite-Volumen-Methode**

Numerisches Lösungsverfahren für Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportprozesse

### **Filtergeschwindigkeit**

rechnerisch ermittelte Strömungsrate als Produkt aus Durchlässigkeitsbeiwert und hydraulischem Gefälle

### **gesättigte Zone**

vollständig vom Wasser erfüllte Boden- und Gesteinsschichten, einschließlich des geschlossenen Kapillarsaumes

### **Gradient**

Potenzialdifferenz, hydraulisches Gefälle

## **Hydroisohypsen, Hydroisohypsenplan**

Darstellung von Linien gleicher Wasser- bzw. Grundwasserstände

## **Instationäre Modellierung**

Das Verhalten des Modells ist von der Zeit abhängig; es müssen Zeitstützstellen mit gemessenen Werten vorgegeben werden, z.B. bei der Betrachtung der zeitlichen Veränderung der Grundwasserhöhen

## **Inverse Modellierung**

Während bei der Modellierung ein durch festgelegte Parameter (Anfangs- und Randbedingungen, Parametrisierungen) spezifiziertes Modell benutzt wird, um Beobachtungen vorherzusagen, versucht die "Inverse Modellierung" aus (fehlerbehafteten) Beobachtungen die Modellkonfiguration abzuleiten, die die Beobachtungen (in problemabhängigen Sinne) "optimal" reproduziert.

## **Isochronen**

Darstellung von Linien gleicher Laufzeitabstände

## **Isohypsen**

Siehe Hydroisohypsen

## **Isokonzentrationslinien**

Darstellung von Linien gleicher Konzentration

## **Isotherme; Sorptionsisotherme**

Kennzeichnet die Wechselwirkung bei der Schadstoffsorption zwischen der Schadstoffkonzentration in der Flüssigkeit und der Feststoffmatrix im Gleichgewichtszustand, bei organische Substanzen zusätzlich zwischen organischer und silikatischer Feststoffmatrix; dient der Bestimmung von Verteilungskoeffizienten

## **Isotropie**

Gleiche Eigenschaften eines Materials oder Stoffes in verschiedenen Richtungen

## **Kalibrierung**

Annäherung einer Lösung an gemessene Werte durch Parameteranpassungen im sinnvollen Bereich

## **Kolmationswiderstand**

Zusatzwiderstand beim Passieren von Wasser durch eine von Ablagerungen weniger durchlässige Gewässersohle

## **Konvergenz**

Annäherung einer numerischen Berechnung an eine exakte Lösung mit abnehmender Schrittweite

## **Leakagefaktor**

Faktor, der die Speisung aus halbdurchlässigen Schichten beschreibt

## **Migration**

Beschreibung des Stofftransports im Boden- und Grundwasserbereich

### **Modell**

allg.: Abbild eines zu untersuchenden Systems, hier: systembeschreibendes, mathematisches Strukturmodell

### **Numerik, numerische Lösung**

Approximation einer Differenzialgleichung die eine Unterteilung des Raumes und ggf. der Zeit in endliche, miteinander gekoppelte Elemente erfordert

### **Numerische Dispersion**

Bei der Simulation des Schadstofftransports durch lineare Approximation von Speicher- und Abbautermen verursachte Verfälschung der hydrodynamischen Dispersion

### **Numerische Oszillation**

Vom numerischen Lösungsschema abhängige Gefahr der Nichtkonvergenz einer numerischen Lösung

### **Parameter**

Kenngröße eines systembeschreibenden Strukturmodells, z.B. der Durchlässigkeitskoeffizient

### **Parametermodell**

Deterministische oder stochastische räumliche Verteilung oder Verteilungsmuster von Parametern bzw. Funktion oder Konstante

### **Parameterermittlung**

Direkte oder indirekte Methode der Bestimmung von Parametern durch Messungen oder Versuche

### **Particle Tracking**

Beschreibung des Stofftransports im Untergrund über Bahnlinien; die Laufzeit von Schadstoffteilchen kann über einen Retardationsfaktor gemindert werden

### **Potenzial, Potenzialwert**

Gemessene oder berechnete Wasserdruckhöhe

### **Porosität**

Hohlraumanteil eines porösen Mediums, z.B. Gesteins

### **Prognose**

Vorhersage eines zukünftigen Systemzustandes

### **Randbedingung (math.)**

Zusammenspiel zwischen der örtlichen Lage von Berandungen eines Strömungsfeldes und den dort herrschenden Bedingungen

### **Random Walk**

Stochastischer Ansatz zur Beschreibung des Stofftransports im Untergrund in Analogie zur Molekularbewegung; Lösungsverfahren für Schadstofftransportprozesse

### **Repräsentatives Elementarvolumen (REV)**

Volumenelement, das groß genug sein muss, dass sein Verhalten beschreibende Eigenschaften als konstant angenommen werden können.

### **Retardation**

Rückhalt, Verzögerung eines Stoffes gegenüber der Wasserbewegung im Untergrund, verursacht vor allem durch hydrodynamische Dispersion und Sorptionsmechanismen

### **Sensitivitätsanalyse**

Untersuchung der Auswirkungen von Parametervariationen auf das Modellergebnis, bei mathematischen Modellen notwendig zum Modellverständnis

### **Simulation, digitale Simulation**

allg.: zielgerichtetes Experimentieren mit einem Modell, hier: Lösung systembeschreibender mathematischer Modelle

### **Simulationsprogramm**

Computerprogramm bzw. -code zur Lösung systembeschreibender mathematischer Modelle

### **Simulationsverfahren**

mathematische Lösung; Vorgehensweise, Erstellung systembeschreibender mathematischer Modelle z.B. mit einem Simulationsprogramm

### **Speicherkoeffizient, spezifischer Speicherkoeffizient**

Relative Änderung des gespeicherten Wasservolumens bei Änderung der Standrohrspiegelhöhe bezogen auf das Gesamtvolumen

### **Speisungsfaktor**

Kennzeichnet die Zusickerung aus benachbarten Schichten, im Falle der Planfiltration siehe Leakagefaktor

### **Stationäre Modellierung**

zeitunabhängiges Verhalten des Modells; z.B. Gleichgewichtszustand, bei dem sich Grundwasserhöhen nicht verändern

### **Stochastik, stochastische Simulation**

Im Gegensatz zur exakten, deterministischen Verteilung gemessener oder berechneter Eingabeparameter wird durch die Erzeugung zufällig verteilter Parameterverteilungsmuster versucht, eine Reihe von möglichen, in bestimmtem Grenzen gültigen Eingabedatensätzen zu erzeugen.

### **Strombahn, Stromlinie**

Kennzeichnung der Richtung von strömenden Wasserteilchen

### **Szenarien**

Variation möglicher Randbedingungen oder auch Parameter

### **Transmissivität, Transmissibilität**

Profildurchlässigkeit

### **ungesättigte Zone**

wasserteilerfüllte bzw. wasserfreie Boden- und Gesteinszone bis zum geschlossenen Kapillarsaum

### **Validierung**

Überprüfung der Gültigkeit eines Lösungsverfahrens

### **Verifizierung**

Überprüfung der Richtigkeit einer Aussage, Hypothese

### **Worst Case**

Parameter- bzw. Randbedingungskombinationen, die im Hinblick auf das zu erwartende Ergebnis den schlimmsten Fall (z.B. einer Schadstoffausbreitung) darstellen

## Anlage 1

### Vorbereitung des Modellprojekts, Grundlagenermittlung

Checkliste zum Kenntnisstand

**-Entwurf-**

- hydrogeologisches/geologisches Kartenwerk

Gutachten

geologische Landesarchive

- andere geologische Informationen

Literatur

Wasserversorgungsbetriebe

forst- und landwirtschaftliche Dienststellen

wasserwirtschaftliche Dienststellen

Träger von Bauvorhaben

- Anzahl der bekannten Aufschlüsse im Untersuchungsraum

.....

davon

..... Baugrunduntersuchungen

..... geologische Erkundungsbohrungen

..... Wasserwerksbohrungen

..... Grundwassermessstellenrundwassermeßstellen

..... Schürfe

- bereits vorliegende Untersuchungen

Sieblinien

Pumpversuche

Boden (-eluat)analysen

Grundwasseranalysen

Fluidzirkulations-/Durchlauf-tests

- Größe des Untersuchungsgebietes (bzw. des geplanten Modellraumes) im km<sup>2</sup>

.....

großräumig (z.B. Wassereinzugsgebiet, Stadt)

kleinräumig (z.B. einzelner Schadensfall, Sanierungsuntersuchung)

• Vorkenntnis zu hydrogeologisch repräsentativen Parametern<sup>1</sup>

	Grundwasserleiter 1	Grundwasserleiter 2	...
<input type="checkbox"/> effektive Porosität	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Durchlässigkeitsbeiwert	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> horizontaler kf-Wert <sup>2</sup>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> vertikaler kf-Wert <sup>2</sup>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Transmissivität	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Speicherkoeffizient	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Speisungsfaktor <sup>3</sup>			
<input type="checkbox"/> relativer $k_f$ -Wert <sup>4</sup>			
<input type="checkbox"/> Kolmation von Oberflächengewässern / Infiltrationswiderstand			

• hydrologische Daten

- aktuelle Grundwasserstände
- Stichtagsmessung vom .....
- historische Grundwasserstandsdaten
- Wasserstände von Oberflächengewässern
- Ganglinien von Oberflächengewässern
- Durchflüsse von Oberflächengewässern
- Niederschlagsdaten
- Grundwasserneubildungsrate<sup>5</sup>
- Zusickerung aus Rohrleitungen/Versorgungsnetzen

• Brunnendaten

Anzahl der bekannten Brunnen im Untersuchungsraum .....

davon Wasserwerksbrunnen .....

davon Einzelwasserversorgungsbrunnen .....

davon Einzelförderraten bekannt .....

Infiltrationsbrunnen .....

• Weitere hydraulisch wirksame Quellen/Senken

- Bergwerksschächte
- Entwässerungsgräben
- Quellschüttungen
- Bewässerungsanlagen

<sup>1</sup> muß bei der Erstellung des geologischen Modells ggf. räumlich differenziert betrachtet werden

<sup>2</sup> bei bekannter Anisotropie

<sup>3</sup> bei Vorhandensein einer halbdurchlässigen Trennschicht, die nicht als separater Grundwasserleiter vereinbart wird

<sup>4</sup> für die ungesättigte Bodenzone als Funktion der Saugspannungs-Sättigungsverteilung

<sup>5</sup> ggf. örtliche und zeitliche Differenzierung

• Vorhandensein von Schadstoffen

- ein Schadstoff
- mehrere Schadstoffe
- wasserlösliche Schadstoffe
- nicht oder schwer wasserlösliche Schadstoffe
- Mehrphasenströmung

• Stoffkennndaten zu Schadstoffen

	Schadstoff 1	Schadstoff 2	...
.....			
<input type="checkbox"/> Dampfdruck	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Löslichkeit im Wasser	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Retardation	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> biol./mikrobiol. Abbau	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Sorption an org. Phase	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> Sorption an mineral. Phase	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> molekulare Diffusion	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/> hydrodynam. Dispersion <sup>6</sup>			

<sup>6</sup> keine stoffspezifische Größe

## Anlage 2

### Fachbegleitung und Durchführung der Modellierung

Checkliste zur Auswahl des geeigneten Simulators

**-Entwurf-**

• Art der Untergrundbedingungen

- gesättigt
- ungesättigt
- gesättigt und ungesättigt

• Grundwasserleitertyp

- Porengrundwasserleiter
- klüftig-poröser Grundwasserleiter
- Kluftgrundwasserleiter
- Karstgrundwasserleiter

• Isotropieverhältnisse

- isotrop
- anisotrop (vertikale Durchlässigkeit  $\neq$  horizontale Durchlässigkeit)
- anisotrop (vertikale Durchlässigkeit  $\neq$  horizontale Durchlässigkeit, verschiedene horizontale Durchlässigkeiten)

• Gesteinseigenschaften

- homogen
- heterogen

• Größe des Untersuchungsgebietes

- großräumig (z.B. Wassereinzugsgebiet, Stadt)
- kleinräumig (z.B. einzelner Schadensfall, Sanierungsuntersuchung)

• Schadstoffbetrachtung

- ein Schadstoff
- mehrere Schadstoffe
- gekoppelte Reaktionen
- biologischer Abbau

• spezielle Anforderungen an den Lösungsalgorithmus des Programms

- mehrere Fluide
- Gastransport
- Hydrogeochemie
- stochastische Simulation

• Verständnis der Modelltheorie

- notwendig
- nicht notwendig

• Referenzen mit gleichem Programm

- viele
- wenige
- keine

• Anforderungen an die Programmdokumentation

- Handbuch
- Testbeispiele
- Referenzfälle
- Hilfefunktion

• weitere spezielle Programmanforderungen

- Übergabe der Daten möglich (z.B. in Datenbank des Auftraggebers)
- Nachrechnen beim Auftraggeber möglich
- Einarbeitung weiterer Daten und deren Visualisierung

• Ausgabe spezieller Berechnungsergebnisse und Eingabeparameter

- Wassermengenbilanzen
- Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse
- Eingabeparameter (oder auch die durch Parameteridentifikation ermittelten und in die Simulation eingegangenen Parameter)
- Modellschnitte
- Wasserstände in Oberflächengewässern
- Füllkurven
- Geschwindigkeitsvektoren
- Stromlinien
- Particle Tracking
- Isochronen
- Isohypsen
- Konzentrationsprofile
- Isokonzentrationslinien

• Anforderungen an die Visualisierung der Ergebnisse (je nach Aufgabenstellung)

- hohe Anforderungen
- geringe Anforderungen
- keine Visualisierung notwendig, ggf. durch weiteres Programm

• Anforderungen an die Verfügbarkeit des Programms

- kommerziell
- frei verfügbar (kostenlos, public domain)
- shareware

## Anhang: Leistungsverzeichnis für das Niedersächsische Modellprojekt „Woxdorf“

(aktualisiert: die aufgelöste Mittelinstanz wurde durch „Bezirksregierung“ ersetzt, der tatsächliche Ablauf wurde implementiert) (anonymisiert: Die Namen von Verbänden / Firmen und Einzelpersonen wurden entfernt)

Kurzfassung der Aufgabenstellung:

Die Wasserefassung Woxdorf fördert aus einem abgedeckten unteren Grundwasserleiter. Im Bereich einer pleistozänen Rinne ist dieser jedoch direkt mit dem oberen Hauptgrundwasserleiter verbunden. 4 prioritär bewertete Altablagerungen stehen 4 Brunnen der Fassung gegenüber. Zu klären sind u.a. folgende Fragen:

- Inwieweit überlagern sich die modelltechnische ermittelten Einzugsgebietsflächen der einzelnen Brunnen / Filter mit den Eintragsflächen der Altablagerungen ?
- Welcher Prozentsatz der Emissionskonzentration wird bei verschiedenen Emissionsszenarien an den Förderbrunnen erreicht ?
- Welche Grundwassermessstellen sind für die optimale Überwachung der Altablagerungen geeignet und wo sind Ergänzungen des Messnetzes erforderlich ?
- Wie stellt sich der zeitliche Verlauf des Kontaminantentransports an den Förderbrunnen dar ?
- Welchen Einfluss haben Unsicherheiten in den Ausgangsdaten (z.B. Lage der Rinne, Transportparameter) auf die Aussagen zu den vorgenannten Punkten ?

Darüber hinaus soll das Modell der ganzheitlichen Betrachtung der Emission auch aus anderen Punktquellen (noch zu erfassende Altstandorte) und ggf. flächenhaften Einträgen dienen.

Zur Einrichtung eines Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportmodells für das Wasserschutzgebiet Woxdorf sind die nachfolgend aufgeführten Leistungen anzubieten. Die Titel „A“ bis „E“ sind als nacheinander ablaufende Phasen des Gesamtprojektes zu verstehen:

### Titel A

#### Vorbereitung der „Modellierung Woxdorf“

Pos.	Leistung des Fachbüros	Unterlagen	
		Informationsquellen	Bereitstellung
1	<b>Aktuelle Bestandsaufnahme</b> zum Wasserschutzgebiet Woxdorf mit Übersichtsplan fertigen	Bestandsunterlagen zu: <ul style="list-style-type: none"> <li>● WSG-Grenzen</li> <li>● Flächennutzungskartierung</li> <li>● Wasserwerksanlagen</li> <li>● Förderbrunnen und -daten</li> <li>● Peilbrunnen</li> <li>● sonstige Brunnen</li> <li>● Altablagerungen/ Gefährdungsabschätzungen</li> <li>● Oberflächengewässer</li> <li>● GW - Isohypsen</li> </ul>	Bezirksregierung  Wasserbeschaffungsverband (WBV)
		Dokumentationen nach Altlastenprogramm, insbesondere zur gezielten Nachermittlung von Altablagerungen.	Bezirksregierung  Landkreis
		Ergänzende hydrogeologische Auswertungen nach Bedarf	Niedersächsisches Landesamt für Bodenfor- schung (NLfB)
		Bohrdatenbank - Retrieval	NLfB

Wasserwerksgutachten  
zur Grundwassererschließung und  
Schutzgebietsausweisung

WBV

## 2 Geologisch-hydrogeo-

**logisches Konzept** als Basis für  
die Modellwahl nach Pos. 3 ent-  
wickeln mit:

wie Pos. 1!

wie Pos. 1!

- Typ-Profilen
- geolog. Schnitten
- hydrostratigraph. Schnitten
- Verbreitungskarten
- Isohypsenkarten
- Ermittlung der Grundwasserneubildung
- Visualisierung und Raumbegreifung der analytischen Daten

Benennung eines direkten Ansprechpartners der Landesarbeitsgruppe Altlasten (LAA), die sich aus Mitarbeitern des NLFB und des Niedersächsischen Landesamtes für Ökologie (NLÖ) zusammensetzt, für spezielle Einzelfragen

## 3 **Modellkonzept** entwickeln und erläutern einschließlich:

- Darstellung der voraussichtlichen äußeren Modellberandung
- Dimensionalität
- Vorstellungen zur stationären/instationären Modelleichung des Strömungsmodells
- Konzeptionelle Aussage zu übrigen inneren und äußeren Randbedingungen
- Modellauswahl (FDM/FEM, stationär/instationär, Transportmodul)
- Vorstellungen zur Kalibrierung des Transportmodells
- Benennung erforderlicher Geländearbeiten zur Modellumsetzung \*)

Benennung direkter Ansprechpartner aus der LAA für spezielle Einzelfragen

### \*) Anmerkung zu Position 3:

Die vorbereitenden Arbeiten zur Umsetzung des Modellkonzeptes sind mit Unterstützung eines regionalgeologisch erfahrenen Fachbüros festzulegen.

---

**Besprechung mit Teilleistungsabnahme**

---

## **Titel B**

### **Durchführung unabdingbarer Geländearbeiten**

#### **Pos.**

- 4 Für die Umsetzung des Modellkonzeptes nach Pos. 3 erforderliche Geländearbeiten ausführen \*\*)

#### \*\*) Anmerkung zu Position 4:

Die erforderlichen Arbeiten sind mit Unterstützung des regionalgeologisch erfahrenen Fachbüros durchzuführen.

## **Titel C**

### **Modellierung**

#### **Pos.**

- 5 Modelleingabe und Kalibrierung  
(Bestimmung von Modellparametern durch Anpassung von Modellergebnissen an Messwerte von Wasserständen und Konzentrationen im Sinne einer Parameteridentifikation).
- 6 Validierung des Modells  
(Prüfung der Verlässlichkeit von Modellaussagen anhand von Messwerten, die nicht der Kalibrierung zu Grunde lagen).

---

### **Besprechung mit Teilleistungsabnahme**

---

- 7 Berechnung der von den Altablagerungen ausgehenden Bahnlinien, der Mischungsverhältnisse und gegebenenfalls eines dichtebedingten Absinkens der Kontaminationsfahne im Deponie-Nahbereich.
- 8 Sensitivitätsanalyse  
(Es soll ermittelt werden, welche Geometrie- bzw. Parameterunsicherheiten hinsichtlich der Ergebnisse der Strömungs- und Transportmodellierung die größten Auswirkungen haben).
- 9 Vorschläge für weitere Geländearbeiten zur Verbesserung der Aussagesicherheit des Modells aus den Ergebnissen nach Pos. 8.

## **Titel D**

### **Verbesserung der Datengrundlage und Aussagekraft des Modells**

#### **Pos.**

- 10 Ergänzende Arbeiten zur Verbesserung der Datengrundlage, wie:
- Bohrungen
  - Kurzpumpversuche
  - Geophysik
  - Pumpversuche
  - Tracertests
  - Isohypsenpläne für versch. Grundwasserleiter
  - Probenahme/Analytik
- 11 Wiederholung der Positionen 5, 6 und 7 mit den verbesserten Geländedaten im Verbund mit der Lan-

desarbeitsgruppe Altlasten

#### **Titel E**

##### **Übergabe der Leistungen**

###### **Pos.**

- 12 Dokumentation des Modells
- 13 Hard- und Software - Übergabe
- 14 Einweisung in die Handhabung des Modells

#### **Titel F**

##### **Bedarfsposition für unvorhersehbaren Mehraufwand**

#### **Titel G**

##### **Angaben zur Projektabwicklung mit Zeitplan**

###### Anmerkung zur behördenseitigen Organisation:

Projekträger ist der Landkreis. Die fachliche Beratung und Betreuung des Projektes erfolgt durch die Landesfachbehörden und für den Landkreis durch die Bezirksregierung mit Möglichkeit, die Landesarbeitsgruppe Altlasten (LAA) gezielt einzuschalten.

Es erfolgt weiterhin die Nennung der Ansprechpartner für fachliche Fragen im Zusammenhang mit der Angebotsbearbeitung inklusive Adressen, Telefon- und Faxnummern.