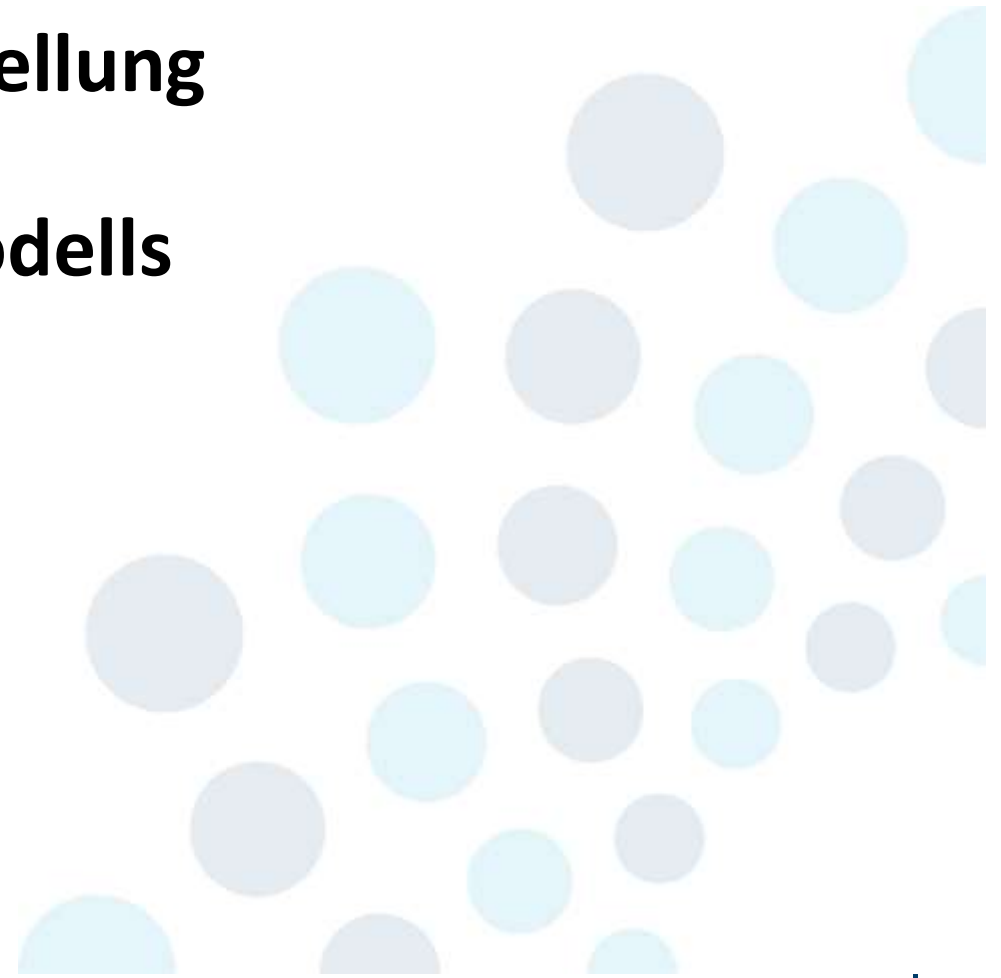


# **Modelldesign: Grundlagen und Erstellung eines konzeptionellen Modells**



## Begriffsklärung

Modelldesign =

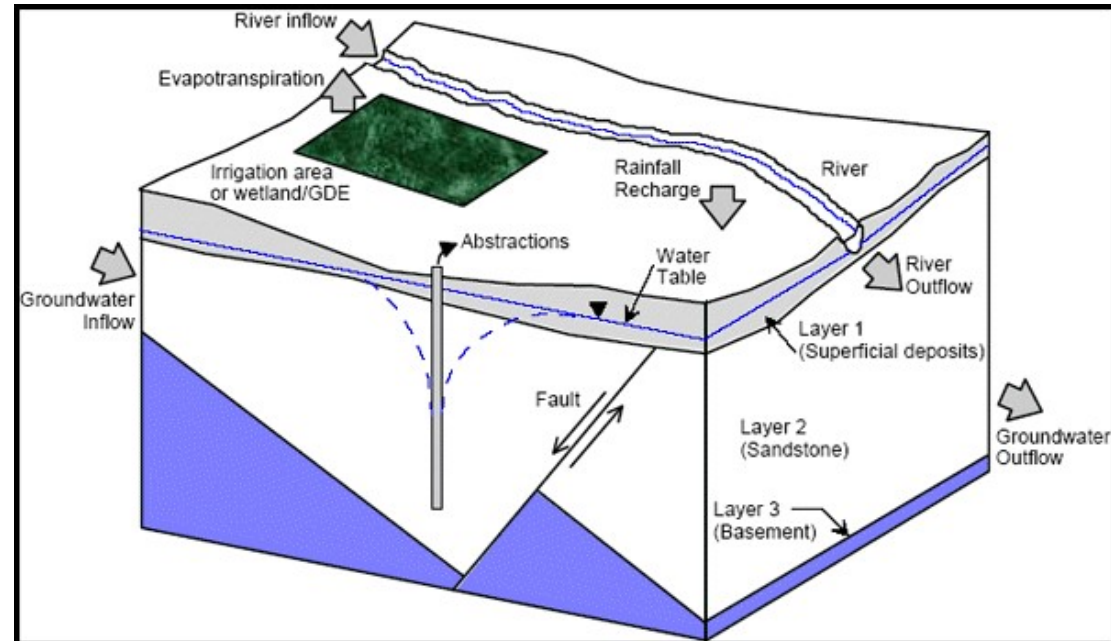
Umsetzung der physikalischen, chemischen und ggf. biologischen Phänomene, die im Untersuchungsgebiet beobachtet wurden, ...

- ... zunächst in ein konzeptionelles Modell ...
- ... und anschließend in ein Rechenmodell (meistens: numerisches Modell).

In beiden Schritten werden Vereinfachungen eingeführt bzgl.

- der beteiligten Prozesse,
- der Parameterwerte und ihrer räumlichen Verteilung,
- der Wechselwirkungen mit anderen Systemen (d. h. außerhalb des Modellgebiets).

# Konzeptionelles Modell



(Middlemis, 2001:  
Groundwater flow  
modelling guideline)

- konzeptionelles Modell = qualitative Darstellung der wesentlichen Systemkomponenten, Prozesse und Einflussfaktoren im Untersuchungsgebiet
- Die Darstellung erfolgt zumeist grafisch, z. B. als Blockbild (s. o.) oder als horizontale bzw. vertikale Schnitte.

# Reynoldszahl

$$\text{Re} = \frac{\rho \cdot v \cdot d}{\mu} \quad [\text{dimensionslos}]$$

$\rho$  : Dichte des Wassers ( $\text{kg m}^{-3}$ )

$\mu$  : Viskosität ( $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ )

$v$  : spezifischer Durchfluß ( $\text{m s}^{-1}$ )

$d$  : repräsentative Länge [mittlerer Porendurchmesser] (m)

Flow laminar wenn  $\text{Re} < 10$  (Porengrundwasserleiter)

Flow laminar wenn  $\text{Re} < 2300$  (Rohrleitungsströmung)

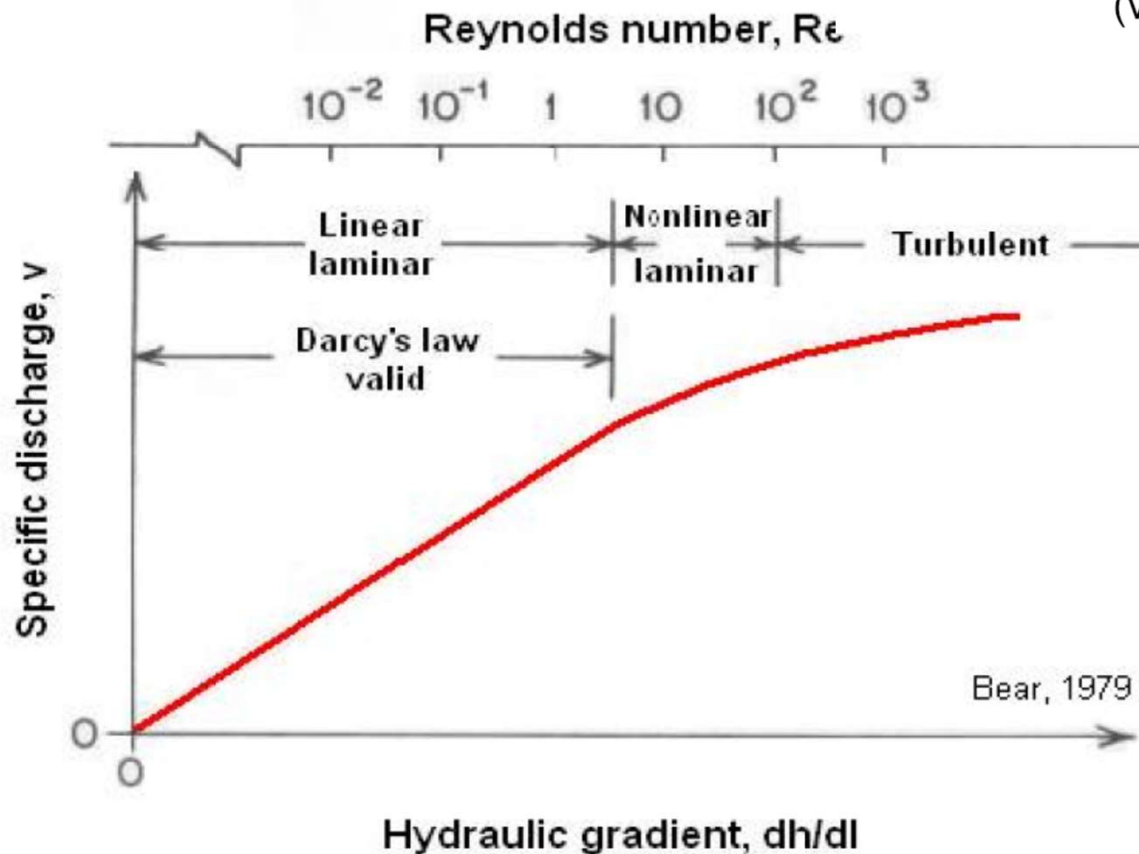
Nicht laminare Strömung:

$$V_f = Kf \left( \frac{\partial H}{\partial L} \right)^m \quad \text{mit } m \neq 1$$

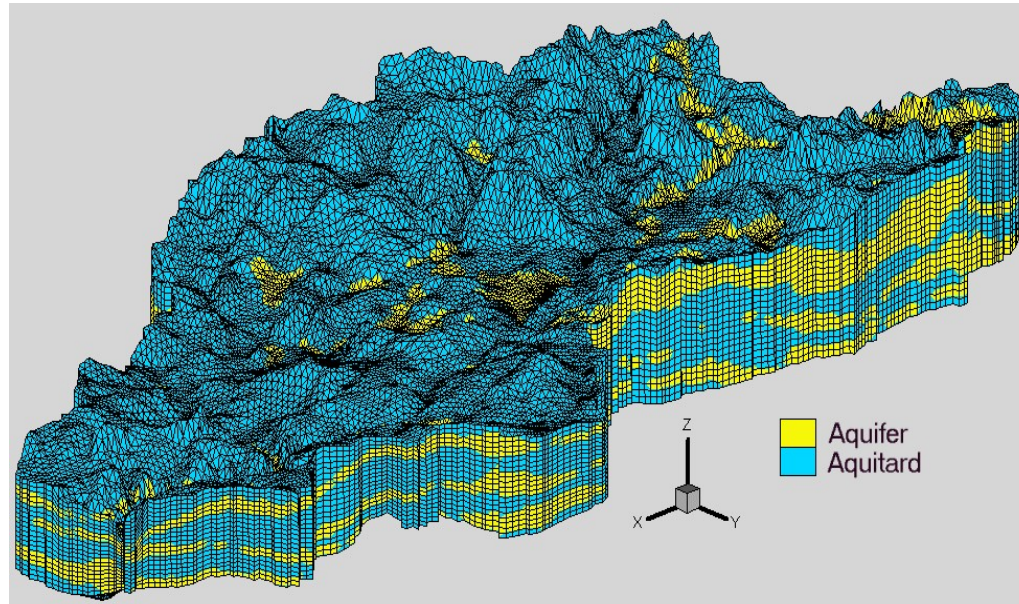
# Validity of Darcy's Law

$dh/dl \propto v$  linear relation  $\Rightarrow$  linear flow

$dh/dl \propto v^2$  nonlinear relation  $\Rightarrow$  turbulent flow  
 ( $v = \sqrt{dh/dl}$ )



## Beispiel für ein Modell ohne analytische Lösung



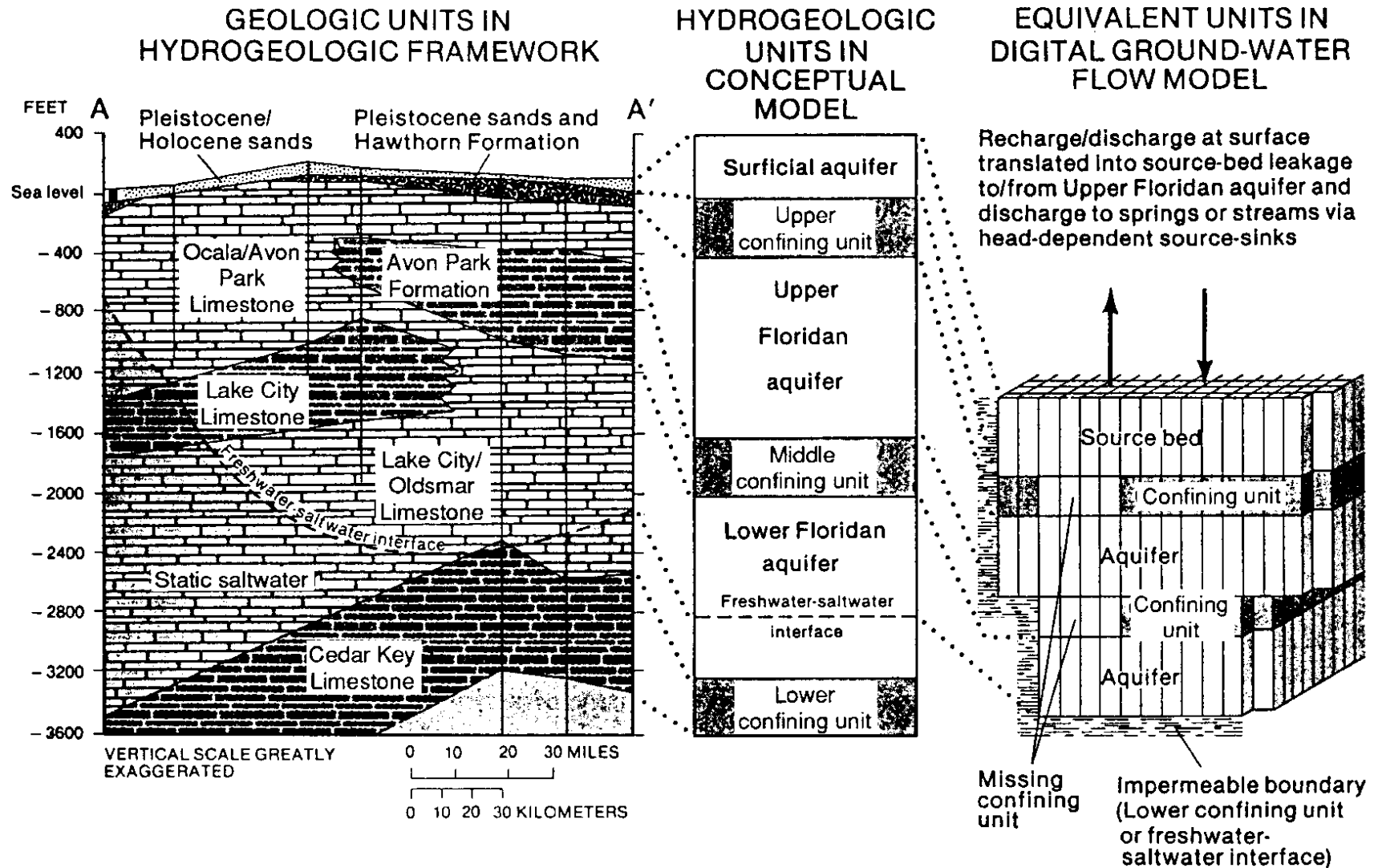
University of Waterloo,  
Dept. of Earth Sciences

Parameterheterogenität und unregelmäßige Gebietsberandung führen zu komplizierteren Formen der Strömungsgleichung und der Randbedingungen

→ analytische Lösung nicht mehr möglich

→ Einsatz numerischer (Näherungs-)Verfahren erforderlich

# Beispiel zum Modelldesign



# Datenanforderungen

- topografische Karten (mit Oberflächengewässern, oberirdischen Wasserscheiden)
- geologische Karten, geologische Profile (vgl. vorhergehendes Beispiel)
- Karten mit Höhenlinien der Aquifersohlen, Aquitardsohlen bzw. -mächtigkeiten
- Karten für Ausdehnung und Mächtigkeit von Sedimenten unter Fließgewässern und Seen
- hydrogeologische Karten (Grundwasserspiegelhöhen, Piezometerhöhen)
- Ganglinien von Potentialhöhen in Beobachtungsbrunnen und von Wasserständen in Fließgewässern
- Zeitreihen für Quellschüttungen
- Karten und Profile der hydraulischen Durchlässigkeit oder der Transmissivität (auch für o. g. Fluss- und Seesedimente)
- Karten und Profile der Speicherkoeffizienten
- räumlich-zeitliche Information über Zu- / Abflussraten bei der Grundwasserneubildung, der Evapotranspiration, der Wechselwirkung zwischen Aquifer und Fließgewässern, der Grundwasserentnahme und der (natürlichen) Grundströmung



**Modelldesign:  
Aufbau eines  
numerischen Modells  
(Finite-Differenzen-Modell)**

# Allgemeine Anforderungen und Arbeitsschritte

Ausgehend vom konzeptionellen Modell sind beim Aufbau des numerischen Modells zu berücksichtigen:

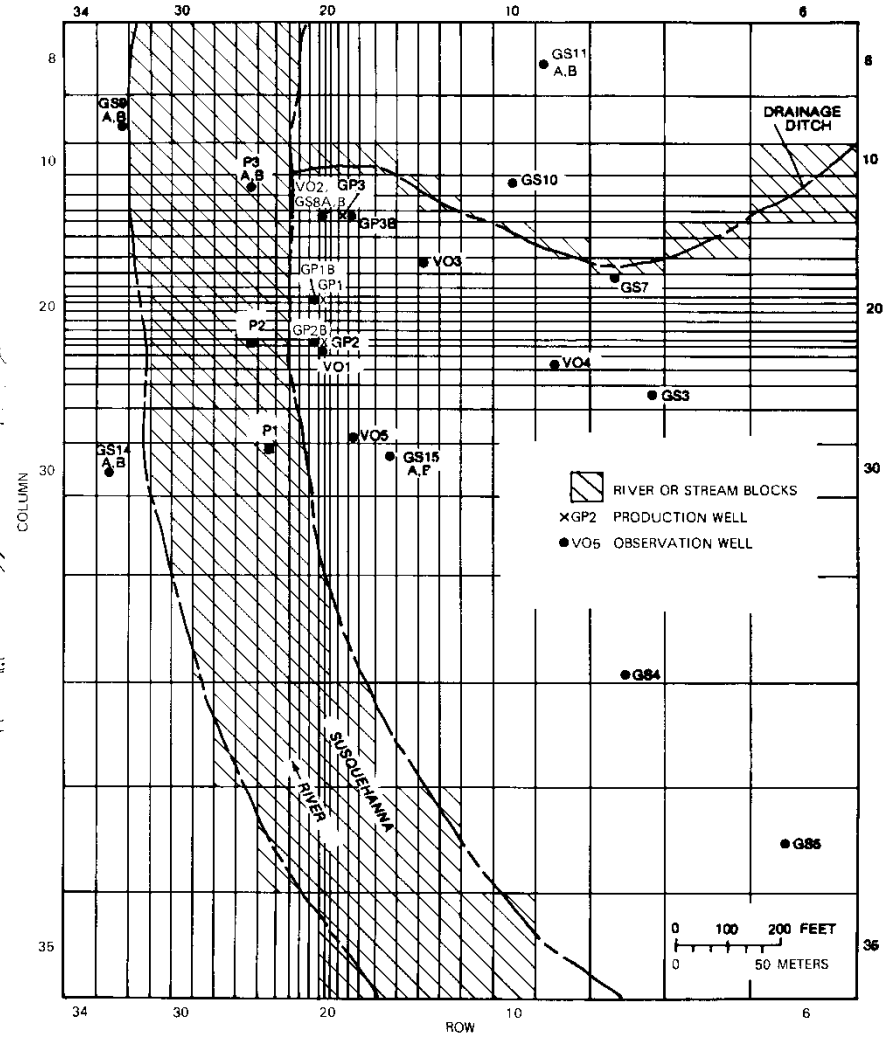
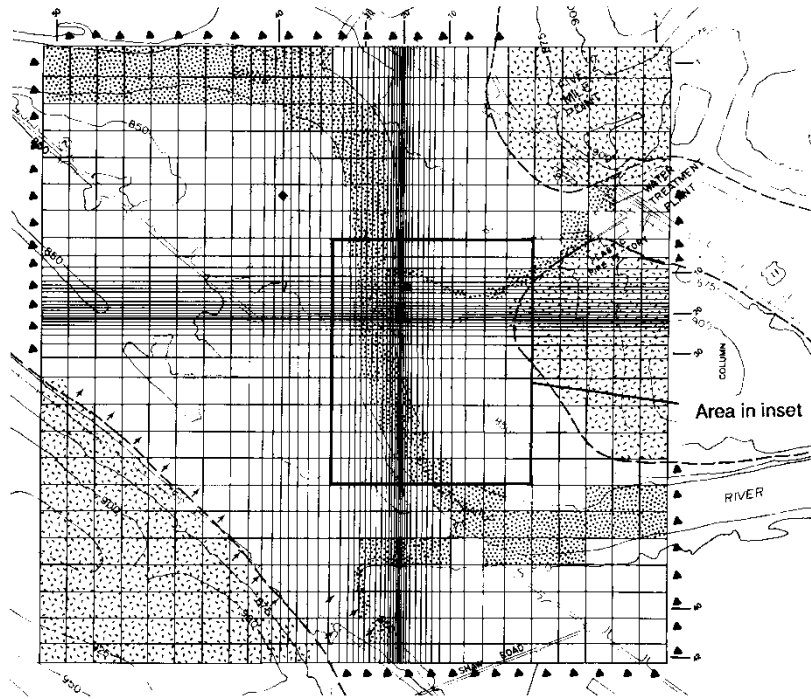
- Dimensionalität (räumliche Ausdehnung)
- Stationarität / Instationarität
- zeitliche und räumliche Auflösung („Gitter“)
- Zonierung
- Randbedingungen

# Allgemeine Anforderungen und Arbeitsschritte

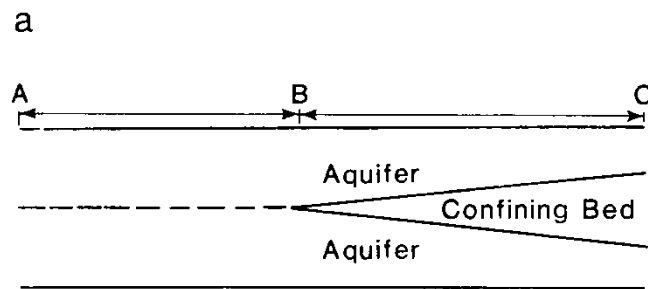
Als allgemeine Arbeitsschritte sind beim Aufbau eines numerischen Modells durchzuführen:

- Gitter und ggf. Zeitdiskretisierung festlegen
- Anfangs- und Randbedingungen festlegen
- Werte für Aquiferparameter und hydrologische Bedingungen (z. B. Grundwasserneubildung) festlegen
- Diese Parameterwerte sind zunächst oft nur Schätzwerte.

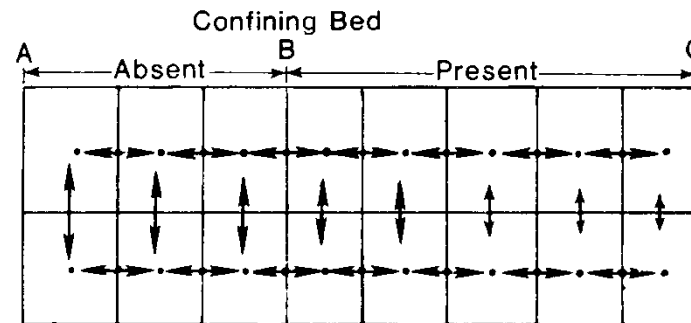
# Gitter mit Verfeinerung



# Repräsentation auskeilender Schichten



Case 1--Confining Bed Pinchout

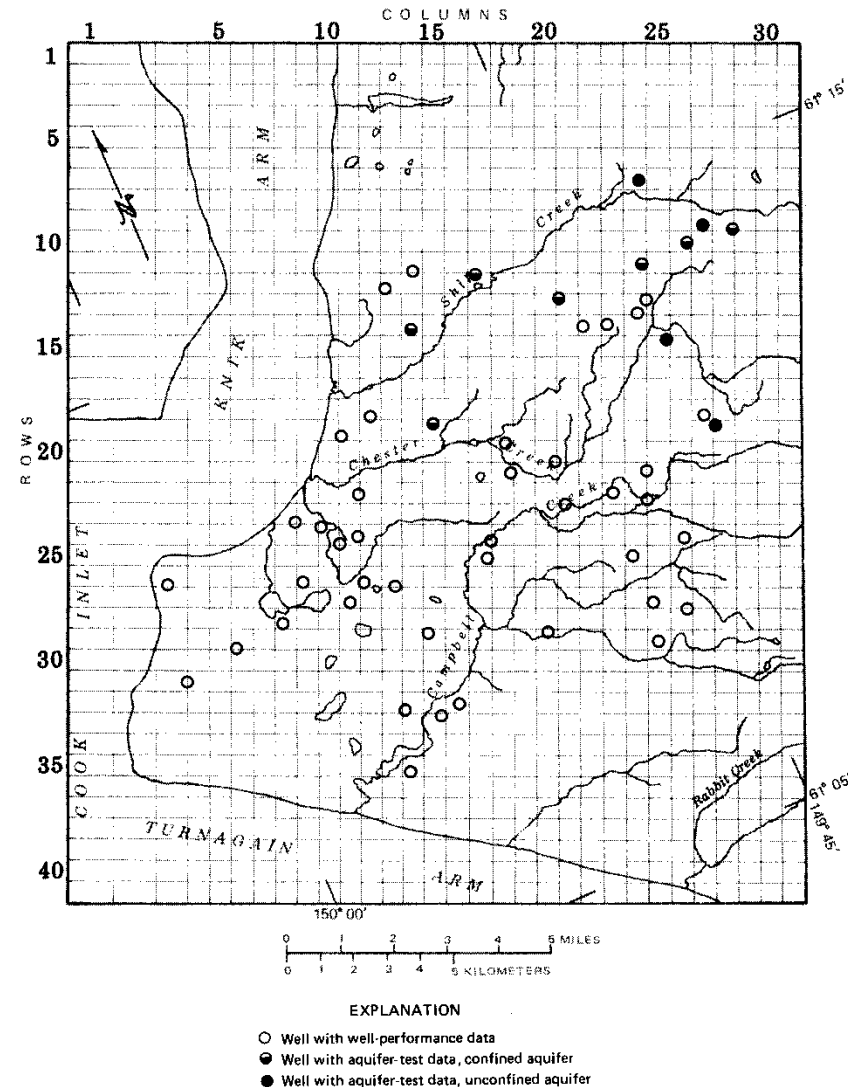


Arrows show vertical and horizontal connection between nodes. Length of arrows represents amount of hydraulic connection.

# Zonierung I

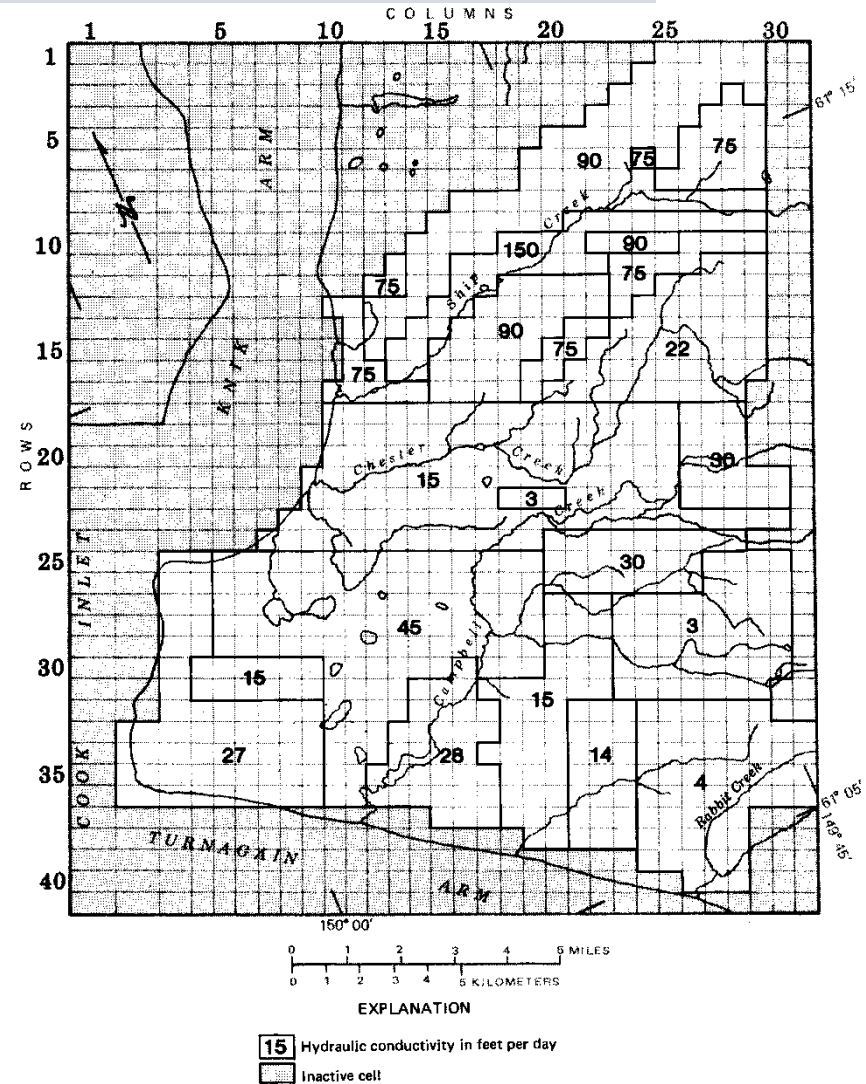
## Überblick über Modellgebiet

- Zwei Grundwasserstockwerke (ungespannt, gespannt)
- Lage von Brunnen, die benutzt wurden, um Eigenschaften der Grundwasserleiter zu bestimmen (z. B. mittels Pumpversuchen)



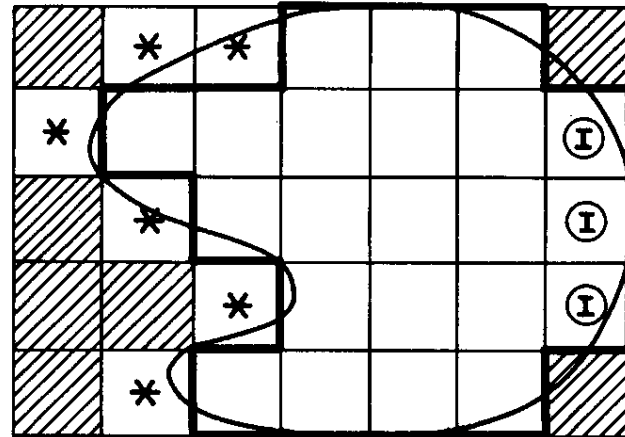
# Zonierung II




- ungespannter Grundwasserleiter
- Zonierung der hydraulischen Durchlässigkeit

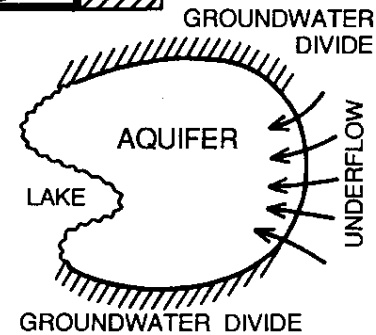


# Randbedingungen I

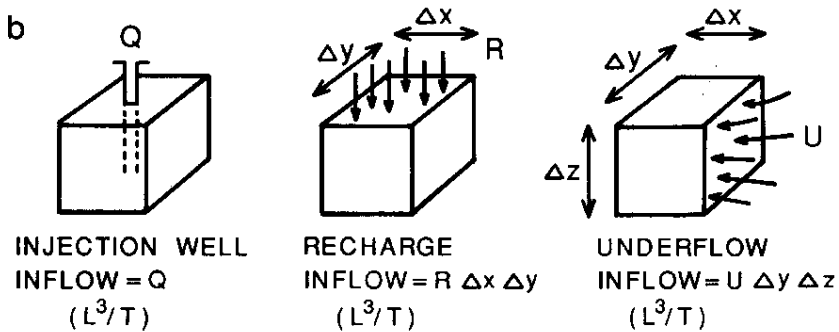
a



-  INACTIVE CELL  
 $T=0$ ;  $IBOUND=0$
-  CONSTANT HEAD CELL  
 $IBOUND < 0$
-  INJECTION WELL  
AT INFLOW BOUNDARY  
 $IBOUND > 0$



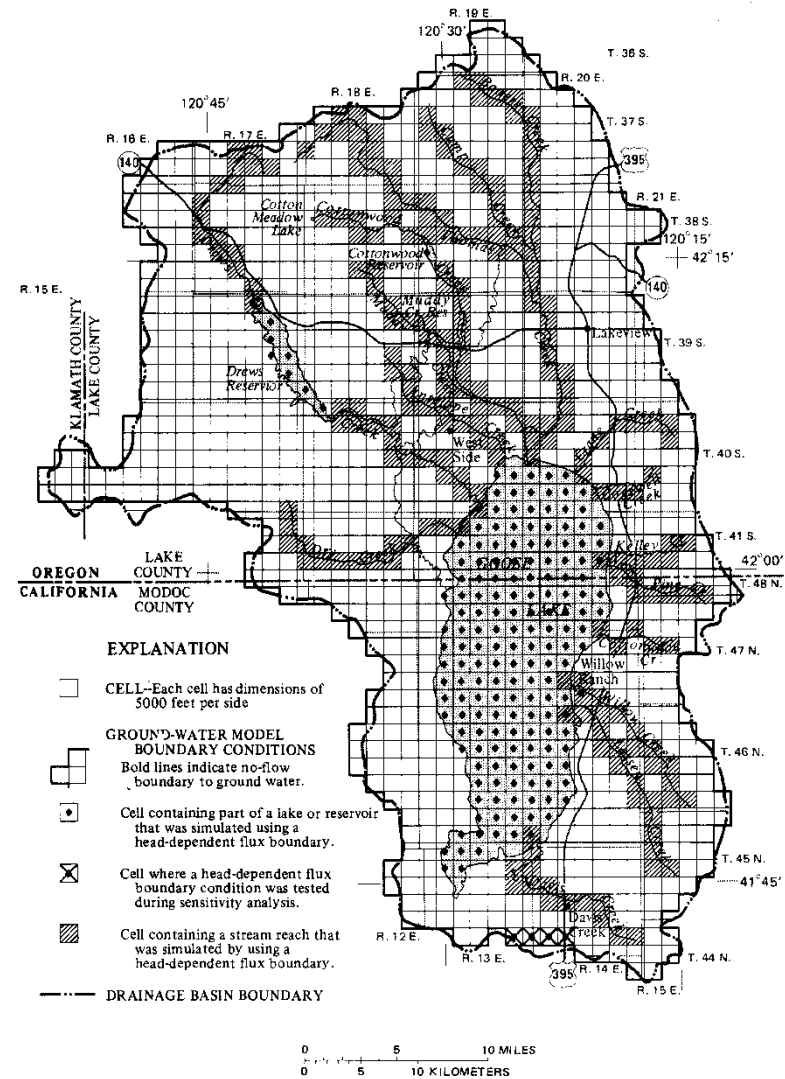
b





# Randbedingungen II

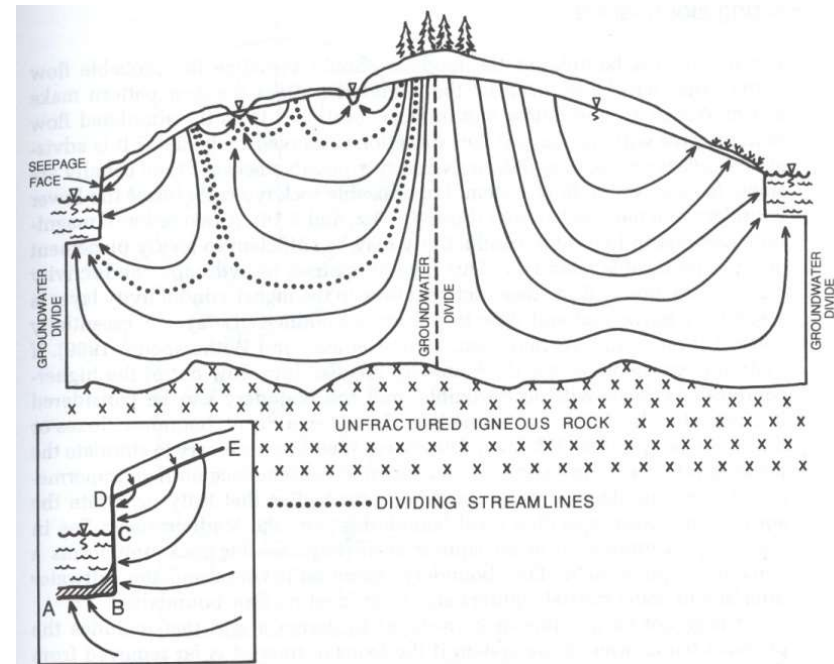
- Grenze Einzugsgebiet
- Fließgewässer
- Seen



# Types of Boundaries

**Boundary conditions** are mathematical statements specifying the dependent variable (head) or the derived of the dependent variable (flux) at the boundary of the model domain.

- Physical boundaries are formed by the physical presence of impermeable bodies.
- Hydraulic boundaries are invisible boundaries that include groundwater divides and streamlines.
- Streamlines are a no-flow boundaries.



## Initial Condition:

- Known head distribution at  $t_0$
- Given for every grid cell

# Types of Boundaries

## First Type BC (Dirichlet Condition)

- prescribes the head value  $h = f(t)$
- special case:  $h = \text{const}$  (“fixed head”)
- special case  $h = 0$   
e.g. water table, seepage face

## Second Type BC (Neumann Conditions)

- specified flow boundary for the derivative of the head (flux) across the boundary
- prescribes the head gradient normal to the boundary  $\delta h / \delta n = f(t)$
- special case:  $\delta h / \delta n = 0$   
-> „no-flow“ boundary
- e.g. groundwater recharge

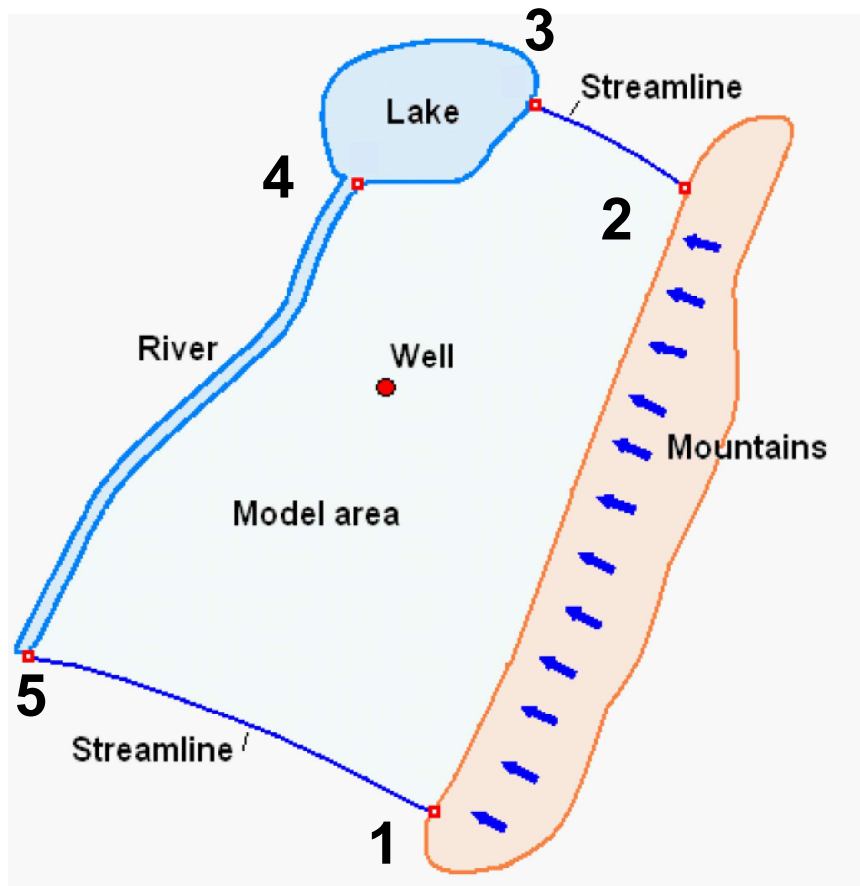
## Third Type BC (Cauchy Condition)

- specifies semi pervious boundaries
- the flux across the boundary is calculated with a given a boundary head value
- mixed boundary condition that relates the flux to the potential gradient across the boundary
- $h + \delta h / \delta l \Rightarrow Q = f(h)$
- e.g. leakage from a river, leaky aquifer

## Inner Boundaries (Neumann Condition)

- Sinks and Sources

# Boundaries in a Flow Model



Prescribed flux?

Zero flux?

Prescribed head?

Leakage:

Boundary 1-2

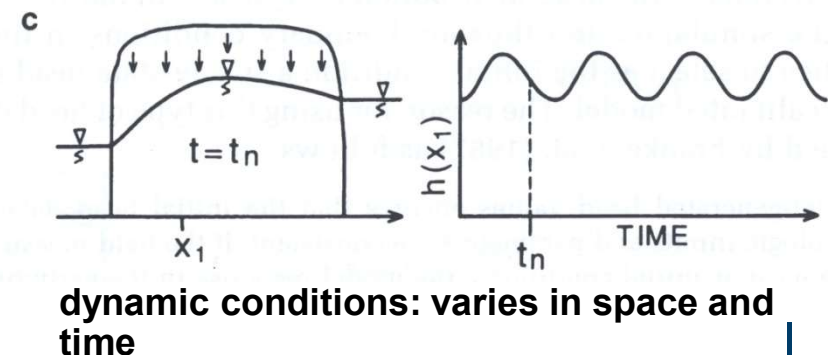
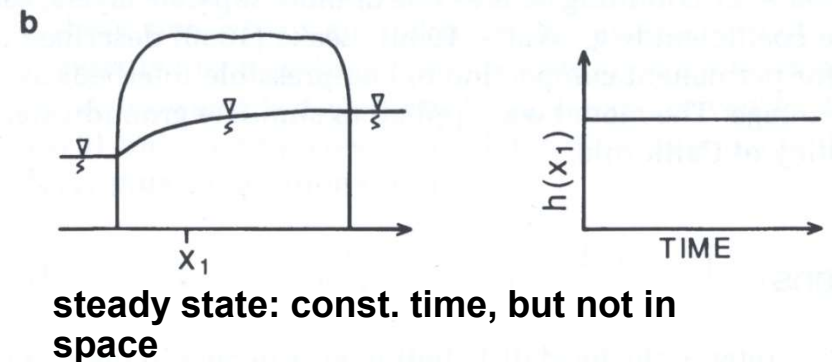
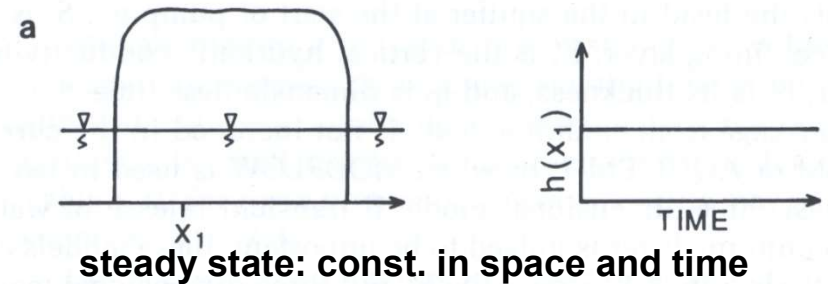
Boundary 2-3 + 5-1

Boundary 3-4

Boundary 4-5?

# Initial Conditions

- Initial conditions give the head distribution at the beginning of the simulation.
- Initial conditions can be generated as steady-state solution of the model.
- The influence of initial conditions on the simulation progress is small, thus after a sufficient simulation time, errors associated with the selected initial conditions are negligible.



# Wechselwirkung zwischen Grundwasserleiter und Fließgewässer

- Randbedingung erster Art (Dirichlet-Randbedingung):  
Vorgabe der Potentialhöhe

+

- Randbedingung zweiter Art (Neumann-Randbedingung):  
Vorgabe des Durchflusses



**Augustin Cauchy**  
(1789 – 1857)

„No-flow-Bedingung“, d. h. kein Durchfluss durch einen undurchlässigen Rand (Bauwerk) oder eine Einzugsgebietsgrenze

# Cauchy Boundary Condition

## Head-Dependent Flow

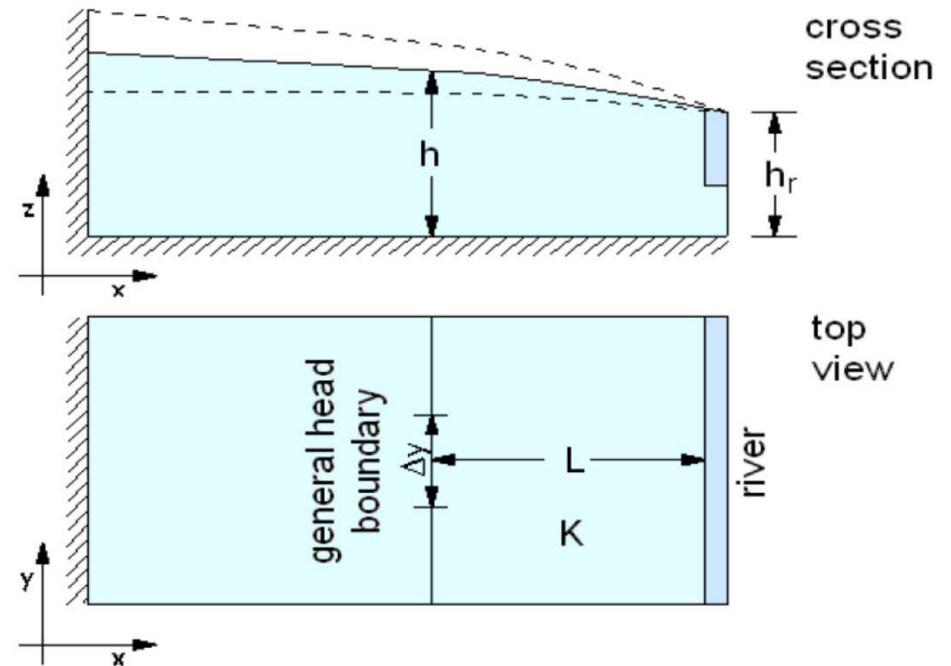
- The flux across the boundary depends on the difference between the user-supplied head on the one side of the boundary and the model calculated head on the other side of the boundary.
- Leakage from a river, springs (drains) and evapotranspiration can be simulated as head-dependent flux.

$$q = -L(h_r - h)$$

$$L = \frac{K}{b}$$

**L** → small: impervious boundary

**L** → large: prescribed head



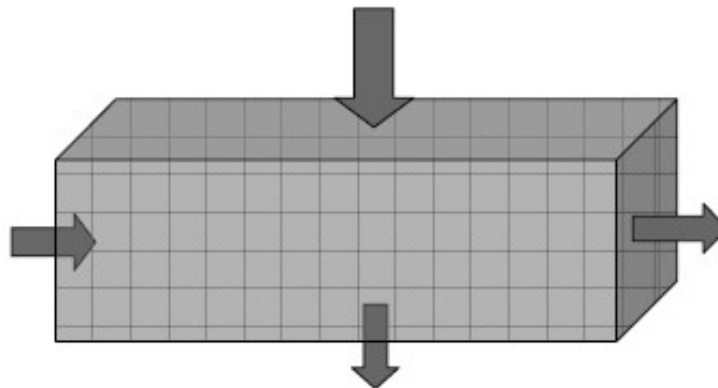
# Setting Boundaries

☞ In steady-state simulations:

to guarantee the uniqueness of the solution at least one point needs a first or third kind boundary.

☞ In transient simulations:

- Initial conditions provide the reference elevation for the head solution.
- Boundaries must be far from the center of the grid so that the changes in the system will not reach the boundaries during the simulation.





## Setting Boundaries

### Good to know ....

#### Specified Head

- Represent an inexhaustible supply of water.
- Groundwater systems may pull water from the boundary or discharge water into the boundary without changing the head of the boundary.
- ☞ In some situations this will result in unrealistic approximation of the system response

## Setting Boundaries

### Good to know ....

#### Specified Flow

- Whenever possible, specified head conditions are defined upstream a specified flow boundary.
- In finite differences codes injection or pumping wells are used to inject or extract water along the boundary to mimic a flux boundary conditions.
- No-flow boundaries represent impermeable boundaries, groundwater divides or streamlines and are automatically simulated when no boundary condition is specified for a boundary of the model domain .

# Transient Boundary Conditions

*Transient simulations:*

- are needed to analyze time-dependent problems,
- begin with steady-state initial conditions,
- produce a set of heads for each time step, whereas steady-state simulations generate only one set of heads.

*Transient simulations are more complicated, because:*

- the storage characteristics of the aquifer must be specified,
- initial conditions must be specified at the beginning of the simulation
- hydrogeologic stresses may propagate to the model boundaries and the boundary conditions become inappropriate
- the time must be discretized as well properly.