



zukunft
SEIT 1909
denken

REGELWERK

WASSER • ABWASSER • ABFALL

■ REGELBLÄTTER

des Österreichischen Wasser- und Abfallwirtschaftsverbandes (ÖWAV)

ÖWAV-Regelblatt 222

Numerische Modellierung von Porengrundwasserleitern

Wien 2024

In Kommission bei:
Austrian Standards plus GmbH
1020 Wien, Heinestraße 38

ÖWAV-Regelwerk

Der ÖWAV erstellt in seinen Gremien für die Wasser-, Abwasser- und Abfallwirtschaft sowie für die damit verbundenen Bereiche des Umweltschutzes allgemeine und spezielle technische Regeln und veröffentlicht diese im Rahmen des ÖWAV-Regelwerks. Dieses gibt den Stand der Technik bestmöglich wieder und entspricht damit insbesondere den technischen Erkenntnissen unter Berücksichtigung der Funktionssicherheit sowie rechtlicher, sicherheitstechnischer, hygienischer, ökologischer und wirtschaftlicher Erfordernisse. Das Regelwerk beschäftigt sich dabei mit Planung, Bau, Betrieb, Wartung und Instandhaltung von Anlagen und Bauteilen sowie mit Maßnahmen des Umweltschutzes. Es dient zudem als fachliche Basis für die Aus- und Weiterbildung.

Hinweis für Benutzer:innen

Das ÖWAV-Regelwerk ist das Ergebnis ehrenamtlicher, technisch-wissenschaftlicher Gemeinschaftsarbeit und richtet sich an die Fachwelt wie Planer:innen, Betreiber:innen, Behörden, Ausrüster:innen, Universitäten, Untersuchungsanstalten sowie ausführende Firmen. Der Inhalt wurde sorgfältig erarbeitet, dennoch übernehmen Autor:innen, sonstige Urheber:innen, Mitwirkende und Herausgeber:innen keine Haftung für die Richtigkeit, Vollständigkeit und Aktualität. Dieses Regelwerk ist eine wichtige, jedoch nicht die einzige Erkenntnisquelle für fachgerechte Lösungen und entbindet nicht vom im Einzelfall anzuwendenden Sorgfaltsmaßstab. Erforderlichenfalls sind weitere Erkenntnisquellen heranzuziehen. Durch die Anwendung des Regelwerks entzieht sich niemand der Verantwortung für eigenes Handeln oder für die richtige Anwendung im konkreten Fall.

ÖWAV-Regelblätter haben das Ziel, Verfahren, Einrichtungen und Betriebsweisen zu beschreiben, die dem Stand der Technik entsprechen. Sie sollen u. a. auch dafür geeignet sein, von den fachlich zuständigen Behörden und Fachdienststellen als technische Vorgaben für Planung, Bau, Betrieb, Wartung und Instandhaltung von Anlagen sowie für die Anforderungen an das Betriebspersonal dieser Anlagen und dessen Ausbildung eingesetzt zu werden.

ÖWAV-Arbeitsbehelfe haben das Ziel, Empfehlungen und Arbeitshilfen zur Lösung technischer, betrieblicher, ökologischer, wirtschaftlicher und rechtlicher Probleme zu geben. Sie können auch Ergänzungen von Regelblättern darstellen sowie in Regelblättern nicht behandelte Verfahren, Einrichtungen und Betriebsweisen beschreiben. Ebenso können Arbeitsbehelfe für die Veröffentlichung grundsätzlicher Aussagen zu bestimmten Themenbereichen herangezogen werden.

Hinweis:

Bei allen Personenbezeichnungen in diesem Regelblatt gilt die gewählte Form für alle Geschlechter.

Impressum

Medieninhaber und Verleger: Österreichischer Wasser- und Abfallwirtschaftsverband, Wien

Hersteller: [druck.at Druck- und Handelsgesellschaft mbH, Leobersdorf](#)

Es wird darauf hingewiesen, dass sämtliche Angaben dieser Publikation trotz sorgfältiger Bearbeitung ohne Gewähr erfolgen und eine Haftung der Autor:innen, Mitwirkenden oder des Verlags ausgeschlossen ist.

Dieses Werk und seine Teile sind urheberrechtlich geschützt. Alle Rechte, insbesondere das Recht der Vervielfältigung, Verbreitung und Übersetzung werden ausdrücklich vorbehalten. Kein Teil dieses Werkes darf in irgendeiner Form (durch Fotokopie, Mikrofilm oder ein anderes Verfahren) ohne vorherige schriftliche Genehmigung des Verlags reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme gespeichert, verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden.

Redaktion, Satz und Layout: Mag. Fritz Randl (ÖWAV)

© 2024 by Österreichischer Wasser- und Abfallwirtschaftsverband.

VORWORT

Mitte des 19. Jahrhunderts gelang es Henry Darcy, anhand von Versuchen die mathematische Grundbeziehung des Fließens von Grundwasser durch poröse Medien zu erkennen und eine dementsprechende Gleichung zu formulieren. Darauf aufbauend stellte Jules Dupuit die Gleichung zur Berechnung des Grundwasserzuflusses zu einem Brunnen auf. Günther Thiem entwickelte daraus die Dupuit-Thiem'sche Brunnenformel, die den Zusammenhang zwischen einer Wasserentnahme aus einem Brunnen, der Durchlässigkeit des Grundwasserleiters und dem Wasserstand in einem benachbarten Brunnen bzw. Messpegel darstellt. Philipp Forchheimer führte Ende des 19. Jahrhunderts das Konzept der Äquipotenzialflächen und ihre Beziehung zu den Stromlinien ein. In der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts stellte Charles von Theis die Gleichung für den nichtstationären Zufluss zu einem Brunnen auf. Charles Edvard Jacob und Hilton Hammond Cooper verfeinerten diese Methode und bestimmten so den Speicherkoeffizienten und die Transmissivität.

Aus den oben genannten Formeln entwickelte sich die mathematische Modellierung der Grundwasserströmung sowie des Stoff- und Wärmetransports, die im Allgemeinen auf der Lösung partieller Differenzialgleichungen basiert. Der Grundwasserstand wird als Funktion von Ort und Zeit bei gegebenen Eigenschaften von Grundwasserleitern, Rand- und Anfangsbedingungen beschrieben. Für einfache Fälle gibt es dazu analytische Lösungen, meistens ist aber eine numerische Lösung auf der Basis von Finite-Differenzen- oder Finite-Elemente-Verfahren erforderlich.

Mittlerweile sind Grundwassermodelle nicht nur allgemein akzeptiert; sie werden inzwischen oftmals eingefordert, unabhängig davon, ob eine ausreichende Datendichte gegeben oder ob die Erstellung eines Grundwassermodells im jeweiligen Fall überhaupt zweckmäßig ist.

Begriffe aus den unterschiedlichen Sprachräumen werden vermischt (z. B. „Prinzipmodell“, „Konzeptmodell“, „hydrogeologisches Modell“) und uneinheitlich angewendet. Im vorliegenden Regelblatt werden einheitliche Begriffe definiert und verwendet. Eine klare, einfache Struktur bringt auch der Nicht-Modelliererin und dem Nicht-Modellierer die Prinzipien sowie die Vor- und Nachteile der Grundwassermodellierung näher.

Für die Erstellung des Regelblatts wurden seitens des ÖWAV Mitarbeitende des Ministeriums, der Ämter der Landesregierungen, der Universitäten, Planende und Anwendende eingeladen. Wie das Verzeichnis der Mitwirkenden zeigt, wurde der Einladung zahlreich Folge geleistet, wofür sowohl den Mitwirkenden selbst als auch den Dienststellen, die diese Mitarbeit ermöglichten, sehr herzlich gedankt sei. Mit der beschriebenen breiten Besetzung an Fachleuten hofft der ÖWAV, größtmöglichen Nutzen sowohl für die Auftraggeber- als auch Auftragnehmerseite erreichen zu können.

ÖSTERREICHISCHER
WASSER- UND ABFALLWIRTSCHAFTSVERBAND

Wien, im **XXX 2024**

An der Erstellung des ÖWAV-Regelblatts 222 haben mitgewirkt:

Leitung:

Mag. Dr. Michael FERSTL, Amt der Steiermärkischen Landesregierung, Graz

Ausschussmitglieder:

Dipl. Bauing. ETH Michael BALLMER, TK CONSULT AG, Zürich

DI Dr. Andrea BICHLER, Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Regionen und Wasserwirtschaft, Wien

Univ.-Prof. Dr. Steffen BIRK, Karl-Franzens-Universität Graz

DI Dr. Heike BRIELMANN, Umweltbundesamt, Wien

DI Dr. Julia DERX, Technische Universität Wien

DI Ingrid FIDI, Amt der Tiroler Landesregierung, Innsbruck

DI Dr. Kurt FRIEDL, Amt der Burgenländischen Landesregierung, Oberwart

Mag. Genia GIULIANI, Geologie & Grundwasser GmbH, Graz

DI Sybille GLÖCKNER, Amt der Tiroler Landesregierung, Innsbruck

Katharina GRÖBNER, MSc, Amt der Tiroler Landesregierung, Innsbruck

DI Sebastian HANDL, Universität für Bodenkultur Wien

Mag. Dr. Giorgio HÖFER-ÖLLINGER, Dr. Giorgio Höfer ZT GmbH, Mattsee

DI Richard KIRNBAUER, DonauConsult Ingenieurbüro GmbH, Wien

Mag. Dr. Gernot KLAMMLER, JR-AquaConSol GmbH, Graz

HR Mag. Dr. Christoph KOLMER, Amt der Oberösterreichischen Landesregierung, Linz

Mag. Dr. Stefan RAKASEDER, Amt der Niederösterreichischen Landesregierung, St. Pölten

MR DI Michael SAMEK, Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Regionen und Wasserwirtschaft, Wien

Dr. Jochen SCHLAMBERGER, vormals Amt der Kärntner Landesregierung, Klagenfurt

DI Christine VOGGENBERGER, Gruppe Wasser Ziviltechnikergesellschaft für Wasserwirtschaft GmbH, Wien

DI Albert ZODERER, Amt der Vorarlberger Landesregierung, Bregenz

Für den ÖWAV:

DI Wolfgang PAAL, MSc, Bereichsleiter Wasserwirtschaft im ÖWAV, Wien

INHALTSVERZEICHNIS

1	EINLEITUNG	5
2	GRUNDWASSERMODELLE	6
2.1	Warum Grundwassermodelle?	6
2.2	Grundsätze bei der Erstellung und Anwendung von Grundwassermodellen.....	6
3	MODELLTYPEN: KLASSIFIKATION UND ANWENDUNGSBEREICHE	7
3.1	Räumliche Dimensionalität	7
3.2	Zeitliches Verhalten	7
3.3	Physikalisch-chemische Optionen	7
3.3.1	Strömungsmodelle	7
3.3.2	Stofftransportmodelle	8
3.3.3	Wärmetransportmodelle	8
3.3.4	Ungesättigte und gesättigte Zone.....	9
3.3.5	Freier und gespannter Grundwasserleiter	9
3.3.6	Grundwasserleitertyp (Poren-, Kluft-, Karstgrundwasserleiter).....	9
3.3.7	Prozessablauf (sequenziell oder rückgekoppelt).....	9
3.4	Lösungsmethode (analytisch/numerisch).....	10
3.4.1	Analytische Modelle	10
3.4.2	Numerische Modelle.....	10
4	PLANUNG DES GRUNDWASSERMODELLS	11
4.1	Modellziele	11
4.2	Kommunikation der Grenzen der Modellanwendung	11
4.3	Eigentum und Weiterverwendung des Modells.....	11
5	DATENGRUNDLAGEN	13
5.1	Hydrologische und wasserwirtschaftliche Daten	13
5.1.1	Grundwasserstände	13
5.1.2	Wasserspiegel und Durchflüsse in Oberflächengewässern.....	13
5.1.3	Interaktion Grundwasser – Oberflächenwasser	14
5.1.4	Grundwasserneubildung aus Niederschlag	15
5.1.5	Grundwasserentnahmen, -rückgaben und Versickerungen	16
5.2	Geologische Daten	16
5.2.1	Untergrundaufbau	16
5.2.2	Hydraulische Kennwerte	16
5.3	Topografie.....	17
5.4	Beobachtungsgrößen und Parameter zum Stoff- und Wärmetransport.....	17
6	HYDROGEOLOGISCHES MODELL	18
6.1	Was ist ein hydrogeologisches Modell?	18
6.2	Grundprinzipien	18
6.3	Daten und Prozesse	18

6.4	Aufbau und Eigenschaften des Modells	19
6.5	Modellgrenzen.....	19
7	AUFBAU DES NUMERISCHEN MODELLS.....	21
7.1	Modellierungssoftware.....	22
7.2	Räumliche Dimensionalität.....	22
7.3	Räumliche Diskretisierung des Modellnetzes	23
7.4	Randbedingungen	24
7.5	Parameterverteilung	25
7.6	Zeitliche Dimensionalität.....	25
7.7	Zeitliche Diskretisierung.....	26
7.8	Anfangsbedingungen	27
8	MODELLKALIBRIERUNG.....	28
8.1	Kalibrierungsparameter.....	28
8.2	Sensitivitätsanalyse	28
8.3	Methodik.....	29
8.3.1	Stationäre und instationäre Kalibrierung.....	29
8.3.2	Startwerte	29
8.3.3	Zielgrößen.....	30
8.3.4	Manuelle und automatisierte Kalibrierung	30
8.3.5	Regionalisierung.....	31
8.4	Modellgüte	32
8.4.1	Gütemaße und Abschlusskriterien für die Kalibrierung	32
8.4.2	Umgang mit Modellabweichungen.....	33
8.4.3	Validierung.....	33
9	PROGNOSEN	34
10	UNSICHERHEITSANALYSE.....	35
10.1	Arten von Unsicherheiten.....	35
10.2	Abschätzung von Unsicherheiten	36
11	DOKUMENTATION UND VISUALISIERUNG.....	37
12	BEGRIFFSDEFINITIONEN	38
13	QUELLENVERZEICHNIS	41

1 EINLEITUNG

Numerische Grundwassermodelle werden als Hilfsmittel für die Berechnung der Grundwasserströmung seit Mitte der 1970er-Jahre eingesetzt. Sie haben sich zu einem wesentlichen Instrument bei einer Vielzahl von hydrogeologischen und wasserwirtschaftlichen Fragestellungen entwickelt, wie z. B. der Planung von neuen und der Optimierung von bereits bestehenden Grundwassergewinnungsanlagen, zur Festlegung von Wasserschutzgebieten und zur bestmöglichen Steuerung von Grundwassersanierungen. Das Anwendungsfeld wurde durch die dreidimensionale Erfassung der Grundwasserströmungen und die Einbeziehung von Stoff- und Wärmetransportvorgängen noch zusätzlich erweitert.

Mittlerweile stehen erprobte Softwarepakete zur Verfügung. Diese sind numerisch ausgereift und können durch ihre Kopplung mit geografischen Informationssystemen und hydrologischen oder hydraulischen Simulationen sehr effizient eingesetzt werden. Anwenderfreundliche Benutzeroberflächen vereinfachen die Einarbeitung und erleichtern dadurch den Einstieg. Moderne Visualisierungstechniken bieten sehr detaillierte und grafisch hochwertige Darstellungsmöglichkeiten, täuschen allerdings manchmal darüber hinweg, dass numerische Grundwassermodelle nur die zugrunde gelegten hydrogeologischen Modellvorstellungen reflektieren können. Insbesondere für Nicht-Modelliererinnen und Nicht-Modellierer ist es daher oftmals schwierig zu beurteilen, ob die Erstellung eines numerischen Grundwassermodells im jeweiligen Fall überhaupt zweckmäßig und sinnvoll ist bzw. den damit verbundenen Aufwand rechtfertigt. Letztendlich bestimmen nur die Richtigkeit der hydrogeologischen Modellvorstellung und der gewählte Modellansatz in Abhängigkeit von Verfügbarkeit und Qualität der Eingangsdaten die Genauigkeit und Prognosefähigkeit der darauf aufbauenden numerischen Modelle.

Ziel dieses Regelblatts ist es daher, eine Orientierung über die wesentlichen Schritte der Modellerstellung zu bieten, eine einheitliche Terminologie zu definieren und für alle Nutzergruppen eine Grundlage für den praktischen Umgang mit numerischen Grundwassermodellen zu schaffen.

Dieses Dokument ist als Hilfestellung für

- Erstellende und Anwendende in der Praxis,
- Auftraggeber bei Ausschreibung, Vergabe, Begleitung und Abnahme sowie
- Behörden und Sachverständige bei der Beurteilung

konzipiert.

In den nachfolgenden Kapiteln werden allgemeine Grundlagen erklärt und die erforderliche Datenbasis definiert. Möglichkeiten und Grenzen zur Abstrahierung geologisch-hydrogeologischer Strukturen werden aufgezeigt.

Das Regelblatt führt in kompakter Form durch die einzelnen Phasen der Modellbearbeitung, gibt praktische Hinweise und Empfehlungen und bestimmt die erforderlichen Standards. Die Darstellung der mathematisch/physikalischen Grundlagen ist auf ein notwendiges Minimum reduziert, auf die Umsetzung in einer bestimmten Programmsoftware wird nicht eingegangen.

Das vorliegende Regelblatt behandelt numerische Grundwassermodelle zur Simulation von mehrdimensionalen Strömungs- sowie Stoff- und Wärmetransportprozessen in der gesättigten Zone von Porengrundwasserkörpern, die sowohl stationär als auch instationär ablaufen können. Die unterschiedlichen modellierten Teilprozesse werden dabei sequenziell abgearbeitet.

2 GRUNDWASSERMODELLE

2.1 Warum Grundwassermodelle?

Für eine Vielzahl von hydrogeologischen Fragestellungen ist es erforderlich,

- den Ist-Zustand eines Grundwassersystems zu verstehen,
- vergangene Entwicklungen zu rekonstruieren oder auch
- Veränderungen und zukünftiges Verhalten dieser Systeme zu prognostizieren.

Zur Beantwortung sind aus mehreren Gründen oftmals Modelle bzw. Modellvorstellungen hilfreich. Einerseits sind Informationen über den Untergrund in der Regel nur an wenigen Punkten verfügbar, weswegen die Rekonstruktion des vollständigen Grundwassersystems zwangsläufig auf Modellvorstellungen beruht. Andererseits sind Parameter wie Grundwasserfließgeschwindigkeit nur indirekt über messbare Größen wie Grundwasserhöhen bestimmbar und dies nur in Kombination mit dem meistens aus Pumpversuchen abgeleiteten Parameter Durchlässigkeitsbeiwert und dem schwer bestimmbar Parameter Porosität (Hohlraumanteil). Zu ermittelnde Größen werden durch Modelle (z. B. mathematische Gleichungen) aus den messbaren Größen abgeleitet. Eine direkte Erprobung im Grundwassersystem ist – auch aufgrund der relativen Langsamkeit von Prozessen im Untergrund – häufig nicht möglich (Hölting und Coldewey 2013; Kinzelbach und Rausch 1995).

Neben physikalischen Modellen (z. B. Sandmodelle), die heute nur mehr eine untergeordnete Rolle spielen, findet eine Vielzahl an analytischen Modellansätzen (z. B. die Brunnenformel nach Theis) ihre Anwendung. Diese klassischen Lösungsansätze beruhen auf stark vereinfachten Geometrien und Annahmen und sind bei komplexen Grundwassersystemen mit heterogenem Untergrund, einander überlagernden In-/Exfiltrationsprozessen bzw. anthropogenen Eingriffen, nicht geeignet oder nur für überschlägige Betrachtungen einsetzbar. Unter solchen Voraussetzungen können belastbare Aussagen in vielen Fällen, wenn überhaupt, nur über numerische Grundwassermodelle gewonnen werden.

2.2 Grundsätze bei der Erstellung und Anwendung von Grundwassermodellen

Durch das breite Anwendungsspektrum und die heute zur Verfügung stehende Rechnerleistung haben sich Grundwassermodelle zu einem Standardwerkzeug etabliert. Wird für eine hydrogeologische Fragestellung die Anwendung eines Grundwassermodells in Betracht gezogen, muss am Beginn der Überlegungen die Frage stehen, welchen Zweck dieses erfüllen soll. Dabei muss klar beantwortet werden können, warum eine Modellierung überhaupt erforderlich ist oder ob auch ein anderer (einfacherer oder schnellerer und somit billigerer) Weg zum gewünschten Ziel führen kann.

Auch muss bewertet werden, ob die zur Verfügung stehenden Daten überhaupt die Erstellung eines prognosefähigen Grundwassermodells mit der geforderten Detailtiefe erlauben. Aussagekraft und mögliche Genauigkeit sind direkt von der Güte und dem Umfang der Datengrundlage abhängig. Stehen als Eingangsdaten beispielweise Standrohrspiegelhöhen im Dezimeterbereich zur Verfügung, so sind Berechnungen zur Grundwasserschwankungsbreite im Zentimeterbereich zwar möglich, täuschen die Detailtiefe jedoch nur vor.

Ebenso ist zu beachten, dass Modelle vielfach auf ungenauen und nicht vollständigen Informationen aufbauen und Vereinfachungen notwendig sind. Modellergebnisse sind daher grundsätzlich mit Unsicherheiten behaftet und geben nicht eine einzige richtige Antwort – sie liefern lediglich eine Bandbreite von möglichen Ergebnissen, die erst auf ihre Plausibilität geprüft werden müssen. Für die Beurteilung von Modellen ist daher eine offene und klare Darstellung dieser Unsicherheiten erforderlich.

3 MODELLTYPEN: KLASSIFIKATION UND ANWENDUNGSBEREICHE

Jedes Modell stellt eine Vereinfachung der Wirklichkeit dar. Es ist daher erforderlich, die wesentlichen Einflussgrößen der ablaufenden Prozesse zu erkennen und zu berücksichtigen und unwesentliche Einflussgrößen zu vernachlässigen. Damit können die Komplexität des Modells und der Aufwand, der mit der Erstellung und dem Einsatz des Modells verbunden ist, optimiert werden.

Zur Bearbeitung von hydrogeologischen Fragestellungen kommt eine Vielzahl von Grundwassermodelltypen in Betracht. Nachfolgend sind die wichtigsten Aspekte, nach denen diese Modelle klassifiziert werden können, aufgelistet (verändert nach Kinzelbach und Rausch 1995):

- räumliche Dimensionalität (eindimensional, zweidimensional, dreidimensional),
- zeitliches Verhalten (stationär/instationär),
- physikalisch-chemische Optionen:
 - Strömungs-/Stofftransport-/Wärmetransportmodelle,
 - ungesättigte oder gesättigte Zone,
 - freier oder gespannter Grundwasserleiter,
 - Grundwasserleitertyp (Poren-, Kluft-, Karstgrundwasserleiter),
 - Prozessablauf (sequenziell oder rückgekoppelt),
- Lösungsmethode (analytisch/numerisch).

Nachfolgend werden alle oben genannten numerischen Modelltypen kurz charakterisiert und mögliche Anwendungsbereiche aufgezeigt. Für weitere Modellansätze wie beispielsweise die stochastische Modellierung oder die Koppelung mit Modellen anderer Fachrichtungen (z. B. Hydromechanik, Gerinnehydraulik) wird auf die entsprechende Fachliteratur verwiesen.

3.1 Räumliche Dimensionalität

Zur Festlegung der räumlichen Dimensionalität eines Modells ist zunächst eine Vorstellung der grundsätzlichen Strömungssituation erforderlich. Eindimensionale Modelle werden z. B. in der ungesättigten Zone oder zur Interpretation von Säulenexperimenten herangezogen. Regionale horizontale Strömungsprozesse bzw. auch vertikale Strömungen (z. B. Dammdurchströmungen) können oft mit zweidimensionalen Modellen simuliert werden. Für kleinräumige Detailbetrachtungen (z. B. die Anströmung eines unvollkommenen Brunnens), bei der Interaktion mehrerer Grundwasserstockwerke sowie in den meisten Fällen von Transportprozessen ist eine dreidimensionale Betrachtung erforderlich.

3.2 Zeitliches Verhalten

Das zeitliche Verhalten betreffend wird zwischen stationären und instationären Modellen unterschieden. Bei einem Grundwassersystem im Gleichgewichtszustand unterliegen die ablaufenden Prozesse keiner zeitlichen Veränderung (z. B. konstante Förderraten). In diesen Fällen ist eine stationäre Modellierung ausreichend. Sind die Prozesse in der Zeit veränderlich (z. B. saisonale Schwankungen, Ausbreitung einer Kontamination), so kann eine instationäre Modellierung mit zeitlich variablen Größen erforderlich sein.

3.3 Physikalisch-chemische Optionen

3.3.1 Strömungsmodelle

Strömungsmodelle berechnen ein Feld von Potenzialhöhen sowie die daraus resultierende Grundwasserströmung, womit die Wasserbilanz ermittelt werden kann. Strömungsmodelle werden beispielsweise erstellt, um einen grundsätzlichen Überblick über einen Grundwasserleiter zu bekommen (Wasserspiegelhöhen, Grundwassermächtigkeit, Fließrichtung etc.) oder um Auswirkungen von (geplanten) Maß-

nahmen (z. B. die Positionierung und Optimierung von Grundwasserentnahmen, Baumaßnahmen im Grundwasserschwankungsbereich, Wasserhaltungen) zu simulieren und bewerten zu können.

3.3.2 Stofftransportmodelle

Stofftransportmodelle berechnen die Ausbreitung von im Grundwasser befindlichen Stoffen (gelöste Substanzen und Partikel). Ein Stofftransportmodell baut immer auf einem Strömungsmodell auf. Dies bedeutet, dass bereits bei der Erstellung des Strömungsmodells darauf Rücksicht genommen werden muss, welche Zielsetzung der Transportmodellierung zugrunde liegt.

Hinsichtlich der entscheidenden Stofftransportmechanismen ist zu unterscheiden, ob es sich um konservative oder nicht-konservative Stoffe handelt.

Konservative Stoffe (z. B. ausgewählte Salze, Farbstoffe und Umweltisotope) unterliegen während des Transports keiner Veränderung durch physikalische, chemische oder biologische Prozesse. Als relevante Ausbreitungsprozesse sind die Advektion und die Dispersion zu berücksichtigen.

Nicht-konservative/reaktive Stoffe (z. B. radioaktive Tracer, gelöster organischer Kohlenstoff, Mikroorganismen, Viren) unterliegen während ihres Transports chemisch-physikalischen und biologischen Reaktionen. Dabei müssen Sorption und Reaktion als zusätzliche relevante Prozesse miteinbezogen werden.

Mithilfe einer Stofftransportmodellierung können Einträge hinsichtlich der ausbreitungsrelevanten Prozesse analysiert und darauf aufbauend z. B. die räumliche Ausbreitung einer Stofffahne prognostiziert werden. Simulationen potenzieller Einträge sind genauso möglich wie die Abschätzung von Stofffrachten und -konzentrationen. Daher eignen sich Stofftransportmodelle besonders für die Planung und Optimierung von Sanierungsmaßnahmen (z. B. Positionierung von Sperrbrunnen) sowie die Risikoabschätzung bei Altlastenbewertungen.

Für die Modellierung von mischbaren Flüssigkeiten mit unterschiedlicher Dichte (z. B. Salz- oder Thermalwässer) oder nicht mischbaren Fluiden (z. B. gemeinsames Strömen von Grundwasser mit Lösungsmitteln oder Erdölprodukten bzw. das gemeinsame Auftreten von Wasser und Dampf in geothermalen Lagerstätten) sind spezielle Modellansätze erforderlich. Darauf basierende Fragestellungen werden im vorliegenden Regelblatt NICHT behandelt. Diesbezüglich wird auf die umfangreiche Literatur verwiesen (z. B. Anderson et al. 2015).

3.3.3 Wärmetransportmodelle

Bei Wärmetransportmodellen müssen zusätzlich zu Advektions- und Dispersionsprozessen die Mechanismen des Wärmeausgleichs zwischen Grundwasser und Korngerüst, die Wärmeleitung an den Flanken und an der Sohle des Temperaturfelds sowie der Wärmeaustausch mit der Atmosphäre berücksichtigt werden. Eine Beeinflussung des Strömungsverhaltens durch Dichteeffekte oder die Änderung der Viskosität muss in die grundsätzlichen Überlegungen einbezogen werden, sollte in der Regel aber vernachlässigbar sein. Als relevante Ausbreitungsprozesse sind Konvektion, Konduktion und Dispersion zu berücksichtigen.

Wärmetransportmodelle kommen vorwiegend bei geothermischen Fragestellungen zum Einsatz. Dabei dienen sie sowohl der Planung (z. B. Optimierung der Positionierung von Ent- und Rückgabebauwerken thermischer Nutzungsanlagen) als auch der Abschätzung einer möglichen Beeinträchtigung fremder Rechte (z. B. Simulation von Temperaturfahnen).

3.3.4 Ungesättigte und gesättigte Zone

Bei der ungesättigten Zone handelt es sich um jenen Bereich des Grundwasserleiters, in dem die Poren nicht vollständig mit Wasser gefüllt sind. Die hydraulische Durchlässigkeit variiert dort je nach Wassergehalt bzw. Saugspannung und ist wesentlich vom Aufbau (Textur und Lagerungsdichte) des Untergrundes abhängig. Neben diesen teilweise schwierig zu bestimmenden Parametern ist auch die Berechnung von Strömungsvorgängen in der ungesättigten Zone mit einem großen Rechenaufwand verbunden, da im Vergleich zur gesättigten Zone komplexere Gleichungen (z. B. Richards-Gleichung) gelöst werden müssen.

Fragestellungen bezüglich der ungesättigten Zone werden im vorliegenden Regelblatt NICHT behandelt, diesbezüglich wird auf die umfangreiche Literatur verwiesen (z. B. Bear & Cheng 2010).

Bei der darunter liegenden gesättigten Zone handelt es sich um jenen Bereich des Grundwasserleiters, in dem die Hohlräume im Untergrund vollständig mit Wasser gefüllt sind. Das gegenständliche Regelblatt beschäftigt sich in erster Linie damit.

3.3.5 Freier und gespannter Grundwasserleiter

Bei der Modellerstellung ist es wichtig zu unterscheiden, ob gespannte und/oder freie (ungespannte) Verhältnisse vorliegen. Zur Beschreibung der Strömungsprozesse in freien Grundwasserleitern wird eine nichtlineare Strömungsgleichung eingesetzt, bei gespannten Grundwasserleitern erfolgt dies über eine lineare Strömungsgleichung. Bei halbgespannten („leaky“) Grundwasserleitern wird der Austausch zwischen benachbarten Grundwasserstockwerken beispielsweise über einen zusätzlichen Leakage-Koeffizienten beschrieben. In den gängigen Softwarepaketen können freie/gespannte/halbgespannte Druckverhältnisse standardmäßig berücksichtigt werden.

3.3.6 Grundwasserleitertyp (Poren-, Kluft-, Karstgrundwasserleiter)

Zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen im Untergrund wird zumeist eine gleichmäßig verteilte, laminare Strömung über den gesamten Querschnitt des Untergrundes angenommen. Diese Annahme gilt allerdings nur für Porengrundwasserleiter mit einem vergleichsweise langsamen und gleichmäßig verteilten Strömungsverhalten, aber in der Regel nicht für Kluft- und Karstgrundwasserleiter, in denen der Wasser- und Stofftransport vorwiegend entlang von Klüften oder Karsthohlräumen stattfindet.

Modellierungen für Kluft- und Karstgrundwasserleiter werden im vorliegenden Regelblatt NICHT behandelt. Diesbezüglich wird auf die umfangreiche Literatur verwiesen (z. B. Goldscheider & Drew 2014).

3.3.7 Prozessablauf (sequenziell oder rückgekoppelt)

Für die allermeisten Anwendungsfelder ist es ausreichend, eine sequenzielle Wirkung der physikalischen Vorgänge anzunehmen. Die Wirkung zwischen den unterschiedlichen modellierten Prozessen erfolgt dabei sequenziell in eine Richtung (z. B. die Eigenschaften des Untergrunds beeinflussen die Strömung des Wassers und die Strömung des Wassers beeinflusst in weiterer Folge den Stoff- oder Wärmetransport). Bei speziellen Anwendungen ist die Berücksichtigung von Wechselwirkungen in beide Richtungen jedoch notwendig (z. B. dichteabhängige Strömung bei Wärmetransport oder Rückkopplungen zwischen ungesättigter und gesättigter Zone wie z. B. durch kapillaren Aufstieg von Grundwasser). In diesen Fällen wird eine direkte Rückkopplung empfohlen, bei der mehrere Modellgleichungen der Teilprozesse innerhalb eines Rechenschritts gelöst werden. Diese direkten Rückkopplungsprozesse sind in gängiger Modellsoftware bereits integriert. Somit ist es z. B. möglich, auch variabel gesättigte Verhältnisse – also direkte Rückkopplungen zwischen ungesättigter und gesättigter Zone – zu simulieren. Dies erfordert jedoch eine dreidimensionale Modellgeometrie, was die praktische Anwendung – vor allem bei regionalen

Modellen – durch den enormen (Rechen-)Aufwand limitieren kann. Alternativ kann man getrennte Modelle für die ungesättigte und die gesättigte Zone erstellen und direkt koppeln, sodass nicht zwingend ein dreidimensionales Modell erforderlich ist. Rückkopplungseffekte werden im vorliegenden Regelblatt NICHT behandelt. Diesbezüglich wird auf die umfangreiche Literatur verwiesen (z. B. SDGG 2010).

3.4 Lösungsmethode (analytisch/numerisch)

Mathematische – also sowohl analytische als auch numerische – Modelle bilden die ablaufenden Prozesse mithilfe von (einer oder mehreren) Gleichungen ab. Die wichtigste Gleichung zur Beschreibung der Grundwasserbewegung ist die allgemeine Strömungsgleichung, eine Differenzialgleichung zweiter Ordnung, welche sowohl mit analytischen als auch numerischen Methoden gelöst werden kann. Zur Lösung der Differenzialgleichungen sind für beide Methoden Anfangs- und Randbedingungen erforderlich, die auf Grundlage des hydrogeologischen Modells festzulegen sind. Daneben gibt es auch Transportgleichungen, die in Stoff- oder Wärmetransportmodellen gelöst werden.

3.4.1 Analytische Modelle

Für einfache Fragestellungen können die notwendigen Gleichungen mit analytischen Methoden gelöst werden. Diese liefern eindeutige (exakte) Ergebnisse und sind meist schnell und mit geringem Aufwand einsetzbar, erfordern allerdings auch große Vereinfachungen (z. B. Homogenität des Untergrundes, konstante Fließbedingungen).

3.4.2 Numerische Modelle

Für komplexere und potenziell realistischere Modellierungen bieten sich numerische Lösungen an. Die Basis dafür ist eine räumliche und zeitliche Zerlegung des Grundwassersystems in homogene Elemente und Intervalle (Diskretisierung). Dabei wird für jedes Element eine Bilanzgleichung aufgestellt und eine Lösung durch schrittweise Annäherung (Iteration) gesucht.

Die dafür gängigsten Verfahren sind die Finite-Elemente (FE)- und Finite-Differenzen (FD)-Methode. Bei FD-Modellen erfolgt die räumliche Diskretisierung mittels eines rechteckigen Rasters, bei FE-Modellen mithilfe von unregelmäßigen Dreiecks- und Vierecksnetzen. Die Datenstruktur von FD-Modellen ist einfacher und numerisch effizienter. Geometrische Unregelmäßigkeiten und lokale Inhomogenitäten können wiederum durch FE-Modelle besser nachgebildet werden.

4 PLANUNG DES GRUNDWASSERMODELLS

Jedes Grundwassermodell bedarf einer umfassenden Vorbereitung, die auf die geologisch-hydrogeologischen Rahmenbedingungen, die zu bewältigende Fragestellung und die gewählte Software abzustimmen ist. Im Planungsprozess wird festgelegt, was erreicht werden soll und was dafür erforderlich ist, bzw. was unter den gegebenen Rahmenbedingungen (z. B. Datenverfügbarkeit, Projektbudget, Zeitplan) erreicht werden kann. Je definierter die Zielvorgabe und je besser die Planung, desto effizienter und konfliktfreier gestaltet sich die nachfolgende Bearbeitung.

4.1 Modellziele

Eine exakte Definition der Modellziele trägt essenziell zu einem optimalen Projektablauf bei und unterstützt alle Beteiligten bei später zu treffenden Entscheidungen. Deswegen ist es bereits zu Projektbeginn erforderlich, unter allen Beteiligten Einigkeit über die Ziele (und Nicht-Ziele) herzustellen. Diese Vorgabe bestimmt die Genauigkeit des Arbeitsprozesses und die mögliche Prognosefähigkeit des Modells. Bei großen und komplexen Projekten, die sich über Jahre erstrecken können, ist daher laufend zu evaluieren, ob das Modell dieser Zielvorgabe nach wie vor entspricht oder ob es angepasst oder abgeändert werden muss.

4.2 Kommunikation der Grenzen der Modellanwendung

An einem Grundwassermodell und seiner Prognosefähigkeit können je nach Fragestellung verschiedenste Personen mit unterschiedlichem Fachwissen interessiert sein (im Wesentlichen Auftraggeber, Planende, Behörden, Interessensvertreter und sonstige Beteiligte). Daher empfiehlt es sich, bereits im Vorfeld die erzielbaren Aussagen und die Aussagekraft des Modells allgemein verständlich festzulegen, damit keine falschen Erwartungen entstehen oder später bei der Umsetzung einer Maßnahme unrealistische Ansprüche an die Genauigkeit der Prognose gestellt werden.

Daher macht es auch Sinn festzulegen, wofür – und aus welchem Grund – ein Modell nicht verwendet werden kann, darf oder soll. Dies ist für eine allfällige Weitergabe oder Weiterverwendung eines Modells für andere – ursprünglich nicht definierte Zwecke – essenziell, da oftmals nur direkt mit dem Modell befasste Personen um dessen Grenzen und Einsatzmöglichkeiten wissen. Eine nachfolgende Verwendung für nicht im Vorfeld definierte Fragestellungen kann vielfach ungenaue und unrealistische Prognosen liefern.

4.3 Eigentum und Weiterverwendung des Modells

Die Erarbeitung eines Grundwassermodells stellt eine geistig-schöpferische Leistung dar, wobei das Urheberrecht bei der Person verbleibt, die das Modell erstellt hat. Die Organisation, bei der diese Person angestellt ist, verfügt als geistige Eigentümerin des Modells über das Werknutzungsrecht. Je nach Vertrag können dieses geistige Eigentum sowie das Werknutzungsrecht von einem Vertragspartner (i. A. Auftragnehmer) auf einen anderen (i. A. Auftraggeber) übergehen.

In welcher Form die Weitergabe des Modells oder seiner Ergebnisse erfolgt, ist bei Vertragsabschluss festzulegen. Gleiches gilt für eine allfällig erwünschte oder vorgesehene spätere Modellpflege. So kann die Übergabe in Form von analogen und digitalen Plänen und Dateien (räumlich/zeitliche Darstellung der Ergebnisse) oder in Form eines lauffähigen numerischen Modells in einem weiterverarbeitbaren Format erfolgen.

Ist vom Auftraggeber eine Weiterverwendung des lauffähigen Modells vorgesehen, so ist unbedingt zu berücksichtigen, dass das bereits vorliegende Modell zu einem bestimmten Zweck erstellt und auf diesen abgestimmt wurde. Eine nicht sachgemäße Handhabung oder eine Weiterverwendung für andere

Zwecke kann zu verfälschten Ergebnissen führen und allenfalls Haftungsfragen aufwerfen. Um dies bestmöglich verhindern zu können, wird die Verfassung eines Modellhandbuchs empfohlen.

Wichtig ist an dieser Stelle auch zu erwähnen, dass bei exakt gleichen Eingangsdaten verschiedene Softwareprodukte voneinander abweichende Ergebnisse bringen können, da die Modellgleichungen eventuell auf unterschiedliche Weise numerisch gelöst werden. Gleiches gilt auch für die Ergebnisse innerhalb eines Softwareprodukts in unterschiedlichen Versionen. Deshalb ist sicherzustellen, dass mit der gewählten Version die ursprünglichen Ergebnisse mit ausreichender Genauigkeit reproduziert werden.

Zur Stellungnahme

5 DATENGRUNDLAGEN

Um ein Grundwassermodell aufbauen zu können, das verlässliche Prognosen abgeben kann, ist die Verfügbarkeit der grundlegenden Daten, die auf Plausibilität und Vollständigkeit zu überprüfen sind, eine wesentliche Voraussetzung. Die Erhebung der Grundlagendaten stellt einen eigenständigen Bearbeitungsschritt dar, der bereits im Vorlauf zur Modellerstellung erfolgen muss. Sollten Datendefizite vorhanden sein, so müssen diese mit zusätzlichen Erhebungen und Untersuchungen behoben werden. Es kann aber auch durchaus vorkommen, dass Datendefizite erst im Zuge der nachfolgenden Bearbeitungsschritte ersichtlich werden.

Ist das Datendefizit so groß, dass ein Datengewinn nur mit einem unverhältnismäßig großen Aufwand (finanziell, zeitlich) erzielt werden kann, bedeutet dies, dass die Fragestellung mit einem Grundwassermodell nicht hinreichend zu beantworten ist. Diese Feststellung sollte im Einvernehmen mit allen Beteiligten (Sachverständige, Planende, Auftraggeber etc.) getroffen werden. In diesem Zusammenhang ist jedoch zu berücksichtigen, dass ein einfaches Modell mit Datendefizit für bestimmte Fragestellungen trotzdem geeignet sein kann (z. B. für Sensitivitätsanalysen).

5.1 Hydrologische und wasserwirtschaftliche Daten

5.1.1 Grundwasserstände

Ganglinien der Grundwasserstände helfen bei dem grundsätzlichen Verständnis des Verhaltens der Grundwasserströmung und werden für die Kalibrierung eines Grundwasserströmungsmodells herangezogen. Es lassen sich etwa Rückschlüsse auf die Strömungsrichtung sowie die Reaktion des Grundwassers auf Niederschlag und auf Wasserstände in Vorflutern ziehen. Für eine Interpretation von Gangliniendaten ist die Kenntnis des mit der Messstelle erschlossenen Grundwasserhorizonts essenziell (z. B. Lage der Filterstrecke).

Zur Ermittlung der lokalen Strömungsrichtung sind mindestens drei Messstellen erforderlich. Um komplexere Strömungsverhältnisse (durch Inhomogenitäten in der Durchlässigkeit des Grundwasserleiters, Randzuflüsse etc.) abbilden zu können, sind deutlich mehr Messstellen erforderlich.

Kontinuierliche Grundwasserstandsdaten können bei den hydrografischen Diensten der Länder, dem Hydrografischen Zentralbüro (HZB) bzw. der viadonau bezogen werden. Daraus aggregierte Grundwasserstandsdaten (Minima, Maxima, Mittelwerte etc.) sind österreichweit über die Internetplattform eHYD (<https://ehyd.gv.at>) für das Messstellennetz der Hydrografischen Dienste verfügbar.

Für Detailbetrachtungen ist das amtliche Messstellennetz jedoch oftmals nicht ausreichend. Mögliche weitere Ansprechpartner bei der Datenerhebung können beispielsweise die Fachdienststellen der Bundesländer, Gemeinden, regionale Wasserversorgungsunternehmen oder Betreiber von Wasserkraftanlagen sein. Neben projektspezifisch errichteten Messstellen zur Datengewinnung können auch an Hausbrunnen oder sonstigen Messstellen zusätzliche Grundwasserstandsdaten erhoben oder Simultanmesskampagnen durchgeführt werden.

5.1.2 Wasserspiegel und Durchflüsse in Oberflächengewässern

Im Zuge der Datenerhebung und der Erstellung des hydrogeologischen Modells ist festzulegen, welche Oberflächengewässer im numerischen Grundwassermodell berücksichtigt werden sollen. Für diese Gewässerabschnitte sind entlang des Gewässerverlaufs Wasserspiegellagen bei verschiedenen Abflüssen (Erstellung von Schlüsselkurven) oder auch Ganglinien der Wasserspiegellagen für eine instationäre Modellierung erforderlich.

Hydraulische Modelle der Oberflächengewässer liegen österreichweit mit den Daten aus den Abflussuntersuchungen und Gefahrenzonenplänen in hoher Qualität für die großen Flüsse bis hin zu kleineren Gewässern vor.

Bei Vorliegen hydraulischer Modelle wird empfohlen, diese zur Ermittlung der Wasserspiegellagen im Oberflächengewässer heranzuziehen.

Als jedenfalls notwendig wird die Verwendung eines hydraulischen Oberflächengewässermodells gesehen, wenn eine Änderung der Fluss-Grundwasser-Interaktion z. B. im Zuge von Baumaßnahmen am Gewässer möglich sein kann.

Auch bei der Erstellung eines numerischen Grundwassermodells zur Beantwortung wasserwirtschaftlicher Fragestellungen (z. B. nutzbares Grundwasserdargebot) in flussnahen Talgrundwasserleitern wird empfohlen, die Wasserspiegellagen der Gewässer auf Basis der Ergebnisse eines hydraulischen Modells des Oberflächengewässers in das Grundwassermodell zu integrieren. Das Grundwasserdargebot wird üblicherweise stark von der Fluss-Grundwasser-Interaktion bestimmt und die Wasserspiegellagen im Oberflächengewässer haben einen großen Einfluss auf die In- bzw. Exfiltrationsverhältnisse – und damit auch auf die Wasserbilanz.

Bei Fehlen von hydraulischen Modellen des Oberflächengewässers wird man mit Wasserspiegellagen an wesentlichen Stützpunkten entlang des Gewässers und linearer Interpolation dazwischen das Auslangen finden müssen. Auch die flächendeckend bei den GIS-Abteilungen der Bundesländer verfügbaren Geländemodelle (Laserscandaten) liefern in Abhängigkeit von der Gewässergröße geeignete Grundlagen zur Entwicklung eines Wasserspiegellängenschnitts (Gefälle, Profilgeometrie).

Alternativ kann auch eine terrestrische Vermessung des Wasserspiegels entlang des Längsverlaufs bei verschiedenen Wasserführungen angedacht werden.

Die Oberflächengewässermodelle aus Gefahrenzonenplanungen und Pegeldata (Wasserstände, Durchflüsse) liegen bei den Fachdienststellen der Bundesländer auf.

5.1.3 Interaktion Grundwasser – Oberflächenwasser

Die Austauschmengen zwischen Grundwasser und Oberflächenwasser hängen von der Durchlässigkeit des Gewässerbetts ab. Der hydraulische Kontakt des Oberflächengewässers mit dem Grundwasserleiter kann z. B. durch Kolmation der Gewässersohle eingeschränkt sein. Die dämpfende Wirkung der Kolmationsschicht wird im Modell durch den Leakage-Koeffizienten (Quotient aus Durchlässigkeit und Dicke der Kolmationsschicht) abgebildet und üblicherweise in der Modellkalibrierung ermittelt.

In der Regel wird auf Basis von gemessenen Wasserspiegeldifferenzen zwischen dem Oberflächenwasser- und dem Grundwasserspiegel in gewässernahen Grundwassermessstellen die Durchlässigkeit der Gewässersohle (bzw. der Leakage-Koeffizient) im Zuge der Modellkalibrierung entsprechend angepasst, sodass die gemessenen Grundwasserstandsganglinien im Modell mit der erforderlichen Genauigkeit wiedergegeben werden.

Die geforderte Dichte der für die Kalibrierung heranzuziehenden gewässernahen Grundwassermessstellen ist je nach Situation projektspezifisch zu beurteilen und festzulegen. Dabei sind die zeitliche und räumliche Variabilität von In- und Exfiltrationsverhältnissen zu berücksichtigen. Beim Wechsel von In- zu Exfiltrationsverhältnissen ist es oft so, dass durch das austretende Grundwasser durch die Gewässersohle die Feinsedimente ausgespült werden und sich dadurch der Leakage-Koeffizient erhöht. Hierzu sind auch Feldbegehungen sinnvoll, um die Eigenschaften des Gewässerbetts zu erfassen und z. B. die räumliche Verteilung der durch Kalibrierung ermittelten Leakage-Koeffizienten zu plausibilisieren.

Dies gilt insbesondere für Rand- und Uferbereiche von Oberflächengewässern, die deutlich unterschiedliche Durchlässigkeiten aufweisen können. So kann vorkommen, dass Flüsse bei Niedrigwasser sehr geringe Mengen über die Sohle und bei Hochwasser überproportional hohe Mengen über den Randbereich abgeben. Darüber hinaus kann die Kolmation auch von den Witterungsbedingungen abhängig sein, sodass nach der Frostperiode bei sonst unveränderten Randbedingungen um ein Vielfaches mehr an Wasser zur Versickerung kommen kann als im Spätherbst.

Für das häufige Beispiel eines Wasserkraftwerks sind Grundwassermessstellen im Bereich des Stauraums und in nicht staubeeinflussten Abschnitten (Unterwasser bzw. flussauf der Stauwurzel) bei der Kalibrierung erforderlich, um die Kolmations- bzw. Dekolmationsvorgänge im Stauraum bei Normal- und Hochwasserführung korrekt abbilden zu können.

In bestimmten Fällen können auch gemessene Austauschwassermengen aus Abflussmessungen bei Trockenwetterabfluss entlang des Gewässerverlaufes herangezogen werden (Differenzmessungen), um den Leakage-Koeffizienten bzw. die Sohldurchlässigkeit zu bestimmen. Diese Daten sind meist projektspezifisch zu erheben, etwa im Rahmen einer oder mehrerer, das gesamte Projektgebiet umfassenden Messkampagne (Stichtagsmessungen).

5.1.4 Grundwasserneubildung aus Niederschlag

Für die Ermittlung der Grundwasserneubildung im Modellgebiet selbst sowie gegebenenfalls auch in den Randeinzugsgebieten zur Bestimmung des Randzuflusses steht eine Vielzahl verschiedener Methoden unterschiedlicher Komplexität zur Verfügung (siehe z. B. Healy 2010). In Abhängigkeit von der Fragestellung und der Bedeutung der Grundwasserneubildung in der Wasser- und gegebenenfalls Stoff- oder Wärmebilanz des hydrogeologischen Systems kommen einfache Abschätzungen mithilfe von Wasserbilanzansätzen oder aufwendigere Methoden bis hin zu prozessbasierten Modellen des Wasser-, Stoff- oder Wärmefflusses in der ungesättigten Zone zur Anwendung. Eine flächendifferenzierte Ermittlung erfordert neben Wetterdaten in der Regel auch Informationen über die Landoberfläche (z. B. Flächennutzung, Bodenart, Hangneigung).

Für Methoden zur Ermittlung der Verdunstung, die als wesentliche Größe in die Berechnung der Grundwasserneubildung eingeht, wird auf die Merkblätter ATV-DVWK-M 504/2002 und DVWK 238/1996 bzw. DWA-M 504-1/2018 und DWA-M 504-2/Entwurf 2023 verwiesen. Auch die im Auftrag von Fachdienststellen der Bundesländer und von anderen Organisationen betriebenen Lysimeterstationen können Daten zur Grundwasserneubildung liefern.

Die zur Berechnung der Verdunstung erforderlichen Klimadaten (Lufttemperatur, Niederschlag, Sonnenscheindauer, Wind etc.) können bei den Hydrografischen Diensten der Bundesländer, der GeoSphere Austria (Bundesanstalt für Geologie, Geophysik, Klimatologie und Meteorologie) oder auch privaten Stationsbetreibern angefragt werden.

Für die Ermittlung der Grundwasserneubildung sind auch Informationen zu den oberen Bodenschichten aus der Digitalen Bodenkarte Österreichs (eBOD) des Bundesforschungs- und Ausbildungszentrums für Wald, Naturgefahren und Landschaft (BFW) hilfreich. Hier sind Bodeninformationen in einem Erfassungsmaßstab von 1:10.000 abrufbar. Auch wenn diese nicht direkt in die Modellierung einfließen, können sie bei der Modellerstellung hilfreich sein, um etwa eine flächige Verteilung der Grundwasserneubildung abschätzen zu können.

In dem vom Institut für Kulturtechnik und Bodenwasserhaushalt und dem BFW entwickelten Modell HydroBod sind für die Bodenparameter Gesamtporenvolumen, nutzbare Feldkapazität und vertikale gesättigte Wasserleitfähigkeit Zahlenwerte vorhanden, die für weite Bereiche Österreichs zum Download bereitstehen.

Die Landnutzung beeinflusst die Verdunstung und hat somit direkte Auswirkung auf die Grundwasserneubildung. Daten zur Landnutzung liegen als Vektordatensatz flächendeckend in Form der Corine-Daten z. B. über die Umweltbundesamt GmbH (www.umweltbundesamt.at/umweltthemen/boden/rp-projekte/rp-corine) mit österreichweit 28 Landbedeckungsklassen vor. Die kleinste berücksichtigte Flächeneinheit ist hier 25 ha.

Detailliertere Landnutzungsinformationen sind in den Daten des Digitalen Katasters des Bundesamts für Eich- und Vermessungswesen enthalten. Hier sind jedem Grundstück eine oder mehrere von 30 verschiedenen Nutzungsarten zugewiesen. Der Datenstand ist zeitlich inhomogen, die Daten werden anlassbezogen bei Änderungen und Aktualisierungen angepasst. Bei bebauten Flächen kann es vorkommen, dass Niederschlagswässer direkt und damit ohne Verdunstungsverluste in den Untergrund verbracht werden. Dies hat einen signifikanten Einfluss auf die dortige Grundwasserneubildung. Auch kann es durch den Anbau verschiedener Kulturen auf landwirtschaftlichen Flächen zu räumlich und zeitlich variablen Grundwasserneubildungsraten kommen. Dies spielt nicht nur für den Wasserhaushalt, sondern auch für den Stofftransport (z. B. Nitrat) eine bedeutende Rolle.

Insbesondere bei großräumigen Grundwassermodellen ist jedenfalls eine Berücksichtigung der Grundwasserneubildung aus Niederschlag erforderlich. Lässt sich im Vorfeld abschätzen, dass die Grundwasserneubildung aus Niederschlag in der Wasserbilanz eine untergeordnete Rolle spielt, kann sie vernachlässigt werden (z. B. bei kleinräumigen Detailmodellen).

5.1.5 Grundwasserentnahmen, -rückgaben und Versickerungen

Bewilligte Grundwasserentnahmen, -rückgaben und Versickerungen sind im Wasserbuch mit den jeweiligen Konsensmengen in unterschiedlicher zeitlicher Auflösung erfasst.

Es ist darauf zu achten, dass deutliche Unterschiede zwischen tatsächlich genutzten und bewilligten Wassermengen bestehen können. Im Idealfall können Realentnahmen bei Anlagenbetreibern erhoben werden. Diese sollten, priorisiert nach ihrem tatsächlichen Einfluss auf das Modellgebiet, in der Modellkalibrierung Verwendung finden.

Sollten keine tatsächlichen Entnahme- und/oder Rückführungsmengen zur Verfügung stehen, müssen jedenfalls realistische Annahmen getroffen werden.

5.2 Geologische Daten

5.2.1 Untergrundaufbau

Der geologische Untergrundaufbau wird neben Kartierungsarbeiten üblicherweise aus Bohrungen ermittelt, die die wesentliche Datengrundlage für das Untergrundmodell darstellen. Ergänzende Informationen können aus geophysikalischen Messungen (Geoelektrik, Geoseismik, Georadar etc.) erhalten werden. Informationen zum Stauerrelief, zu Störungen oder anderen relevanten Strukturen können auch aus geologischen Karten ermittelt werden und müssen in die Bearbeitungen einfließen.

In einigen Bundesländern werden Bohrlochdatenbanken geführt. Sehr umfassende Datenbestände zur Geologie sind auch bei der GeoSphere Austria abfragbar.

5.2.2 Hydraulische Kennwerte

Die Bestimmung der hydraulischen Leitfähigkeit (Durchlässigkeitsbeiwert/kf-Wert) und des Speicherkoeffizienten (für instationäre Modelle) erfolgt mittels hydraulischer Tests (z. B. Pump- und Auffüllversuche). Diese können durch empirische Abschätzungen anhand von Korngrößenanalysen oder Literaturdaten ergänzt werden.

Bei der Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität wird man in den meisten Fällen auf Literaturdaten bzw. Berechnungsansätze, die den Porenanteil aus anderen Parametern (meist dem Durchlässigkeitsbeiwert) berechnen, zurückgreifen müssen. Die Festlegung des durchflusswirksamen Porenanteils bestimmt die Abstandsgeschwindigkeit und ist bei Transportmodellierungen erforderlich.

5.3 Topografie

Topografiedaten liegen seit Durchführung der Laserscanbefliegungen der Bundesländer in hoher Qualität vor. Derzeit sind diese flächendeckend in einer Auflösung von einem Meter bei den GIS-Abteilungen der Bundesländer verfügbar und können teilweise frei heruntergeladen oder angefordert werden.

5.4 Beobachtungsgrößen und Parameter zum Stoff- und Wärmetransport

Für die Kalibrierung von Stoff- und Wärmetransportmodellen werden Daten über Stoffkonzentrationen und Temperaturen benötigt. Beim Stofftransport wird zwischen konservativen (nicht-reaktiven) und reaktiven Stoffen unterschieden.

Österreichweite Datensätze zu ausgewählten Beobachtungsgrößen gemäß Gewässerzustandsüberwachungs- bzw. Wasserkreislauberhebungsverordnung liegen für die ausgewiesenen Grundwasserkörper bzw. an den entsprechenden Messstellen vor und können in der H₂O-Fachdatenbank bzw. über die Internetplattform eHYD (<https://ehyd.gv.at>) online abgefragt werden.

Für alle anderen Parameter ist man in der Regel auf Literaturdaten angewiesen.

Für Parameter zu Wärmeleitfähigkeiten und spezifischer Wärmekapazität wird auf das ÖWAV-Regelblatt 207 „Thermische Nutzung des Grundwassers und Untergrunds – Heizen und Kühlen“ verwiesen. Hier sind Rechenwerte für verschiedene Gesteinsarten angeführt, die bei Fehlen von lokalen Detailinformationen herangezogen werden können.

Auch Daten aus Thermal-Response-Tests (bei der Errichtung von Erdwärmefontänen) eignen sich für die Ermittlung der Wärmeleitfähigkeit.

Eine Abhandlung zur Dispersion in Grundwasserleitern mit Angaben zu Dispersivitäten liefern etwa Gelhar et al. (1992).

Für die Transportmodellierung nicht-konservativer Stoffe ist zu berücksichtigen, dass viele Wasserinhaltsstoffe eine Sorption an der Oberfläche der Matrix des Grundwasserleiters erfahren. Während die physikalische Bindung der im Wasser gelösten Stoffe oft reversibel ist, ist die chemische Bindung an die Gesteinsmatrix meist irreversibel. Zwischen der sorbierten und der gelösten Schadstoffkonzentration stellt sich nach längerer Zeit ein Gleichgewicht ein. Der funktionale Zusammenhang zwischen den Konzentrationen bei gleicher Temperatur wird als Sorptionsisotherme bezeichnet, die sowohl einen linearen Verlauf (Henry-Isotherme) als auch einen nicht-linearen Verlauf (Freundlich- und Langmuir-Isotherme) beschreiben kann.

Durch chemische und biochemische Reaktionen kommt es zum Abbau und zur Produktion von Stoffen im Grundwasser. Die Abbau- und Produktionsraten im Grundwasser können durch geeignete Ansatzfunktionen erfasst werden.

Bei radioaktiven Stoffen sind die sehr genau bekannten Halbwertszeiten von Bedeutung. Die Halbwertszeit ist jene Zeit, in der sich die Konzentration des Stoffs halbiert.

6 HYDROGEOLOGISCHES MODELL

6.1 Was ist ein hydrogeologisches Modell?

Das hydrogeologische Modell setzt sich mit der Frage auseinander, wie ein Grundwassersystem grundsätzlich funktioniert. Es ist die Basis eines jeden numerischen Grundwassermodells und beschreibt die hydrogeologische Situation des betrachteten Modellgebiets. Das hydrogeologische Modell dient der Definition von Randbedingungen, der Geometrie und der Parametrisierung des Modellraums. Es ist eine in sich schlüssige Beschreibung und Darstellung der vorliegenden hydrogeologischen Strukturen und Prozesse (DVGW 2016). Dafür müssen alle maßgeblichen und prozesssteuernden hydrogeologischen, hydrologischen, pedologischen und meteorologischen Einflussgrößen erörtert und verstanden werden. Deren jeweilige Auswirkungen auf das betrachtete System sind auf ihre Relevanz zu bewerten. Dabei ist die Abklärung spezifischer, regionaler Besonderheiten unerlässlich, um das für die zu klärende Fragestellung am besten zutreffende hydrogeologische Modell zu konzeptionieren. Werden dabei falsche Annahmen und Entscheidungen getroffen, so übertragen sich diese auf die gewählten Modellparameter und stellen somit strukturelle Probleme für das numerische Grundwassermodell dar, welche in der Modellkalibrierung nicht korrigiert werden können. Aus diesem Grund ist eine korrekte Definition des hydrogeologischen Modells bei der Erstellung eines numerischen Grundwassermodells wesentlich und trägt entscheidend zur Aussage- und Prognosefähigkeit bei.

Die Entwicklung eines hydrogeologischen Modells ist ein iterativer Prozess mit Rückkopplungen, bei dem auch erst in späteren Arbeitsschritten neu gewonnene Erkenntnisse bzw. neu verfügbare Daten zu berücksichtigen sind. Der Konzeptionsprozess ist nie vollständig abgeschlossen und wird erst dann als angemessen betrachtet, wenn das Projekt zufriedenstellende und überprüfbare Ergebnisse für die vorliegende Fragestellung liefert.

6.2 Grundprinzipien

Ein hydrogeologisches Modell ist stets eine Vereinfachung eines von Natur aus komplexen Grundwassersystems. Es gilt somit einen Kompromiss zwischen den real vorherrschenden Prozessen und den vereinfachten Modellannahmen zu finden, welcher es erlaubt, das wesentliche Verhalten des Systems unter der Berücksichtigung der zu klärenden Fragestellung im Modell abzubilden. Sowohl eine zu starke als auch eine zu geringe Vereinfachung des Grundwassersystems sind zu vermeiden. Der Detaillierungsgrad des hydrogeologischen Modells ist in Abhängigkeit vom Modellierungsziel, der Verfügbarkeit von Daten, der Kenntnis des Grundwassersystems und dessen Komplexität zu wählen. Diese Annahmen sind kritisch zu hinterfragen und die getroffenen Vereinfachungen zu begründen und zu dokumentieren.

Die Erstellung des hydrogeologischen Modells basiert auf jenen Informationen, die über das betrachtete System in seinem aktuellen Zustand unter Berücksichtigung historischer Entwicklungen bekannt sind. Auf jeden Fall müssen die wesentlichen Prozesse für jenen Modellzeitraum, der für die Klärung der Fragestellung erforderlich ist, mit einfließen. Für Prognosemodelle müssen auch die entsprechenden Daten- und Planungsgrundlagen (z. B. Klimawandelszenarien, Auskiesung einer Nassbaggerung oder die Erhöhung von Brunnenentnahmen) im hydrogeologischen Modell berücksichtigt werden, da sich diese Entwicklungen auf die Länge des Modellzeitraums und die Ausdehnung des Modellgebiets auswirken.

6.3 Daten und Prozesse

Das hydrogeologische Modell ist auf Basis der Grundlegendaten und deren fachlicher Interpretation zu erstellen. Dabei sind die Qualität und die Vertrauenswürdigkeit der Daten von entscheidender Bedeutung, was eine vorangestellte Datenprüfung und -evaluierung unerlässlich macht. Darüber hinaus wird durch das Erörtern von kausalen Zusammenhängen zwischen verschiedenen Datensätzen das hydrogeologische Prozessverständnis gestärkt. So kann z. B. durch den Vergleich von Oberflächen- und Grundwasserspiegelganglinien festgestellt werden, ob und welche Art von hydraulischen Interaktionen es gibt.

In einigen Fällen können fehlende Informationen hinsichtlich des Untergrundaufbaus oder des Einflusses von Schlüsselprozessen (z. B. Wechselwirkungen mit Oberflächengewässern) dazu führen, dass verschiedene hydrogeologische Modelle über numerische Modellansätze auf Plausibilität überprüft werden müssen (Enemark et al. 2019).

Aus dem hydrogeologischen Modell können die Arten der Randbedingungen für das numerische Modell abgeleitet werden. Diese können entweder durch die Vorgabe von Potenzialen (Piezometerhöhen, Stoffkonzentrationen, Temperaturen) oder von Wasser-, Stoff- bzw. Wärmeflüssen oder Kombinationen daraus definiert werden.

6.4 Aufbau und Eigenschaften des Modells

Auf Basis des dreidimensionalen geologischen Aufbaus werden hydrogeologische Einheiten mit ähnlichen Materialeigenschaften definiert. Bei der Erstellung eines numerischen Modells spiegeln die Modellschichten in der Regel diese hydrogeologischen Einheiten wider. Besonderes Augenmerk ist auf folgende Aspekte zu legen:

- stratigrafische, strukturelle und geomorphologische Besonderheiten (z. B. Störungen, Terrassenkanten),
- Lage und Mächtigkeit der Grundwasserleiter und -stauer,
- freies oder gespanntes Grundwasser.

Die folgenden Materialeigenschaften steuern den Wasserfluss und die -speicherung im Untergrund:

- gesättigte hydraulische Leitfähigkeit,
- effektive (durchflusswirksame) Porosität,
- Speicherkoeffizient,
- Leakage-Koeffizient.

Für die Transportmodellierung von gelösten oder partikulären Stoffen sind je nach Anwendungsfall noch weitere Parameter wie z. B. Dispersivitäten, Sorptionseigenschaften und Zerfallskonstanten erforderlich. Für ein Wärmetransportmodell benötigt man noch die Wärmeleitfähigkeit und die spezifische Wärmekapazität. In diesem Zusammenhang muss unbedingt berücksichtigt werden, dass die Materialeigenschaften von hydrogeologischen Einheiten räumlich variieren können und im Detail meist nicht bekannt sind.

6.5 Modellgrenzen

Bei der Festlegung der Modellgrenzen ist zu gewährleisten, dass alle wesentlichen Prozesse abgebildet sind, die das Grundwassersystem im betrachteten Gebiet beeinflussen. Die Ausdehnung des hydrogeologischen Modells orientiert sich vorwiegend an natürlichen Grenzen der Topografie (z. B. Geländeoberkante, Terrassenkanten, Oberflächengewässer) und der geologischen Einheiten und sollte jedenfalls den Bereich des späteren numerischen Modells umfassen.

Der obere Modellrand definiert sich durch die Lage des Grundwasserspiegels bzw. einer nahezu undurchlässigen Schicht, je nachdem, ob freies oder gespanntes Grundwasser vorliegt. Dafür ist es erforderlich, die vertikalen Wasser-, Stoff- bzw. Wärmeflüsse vorzugeben. Können Grundwasserneubildung aus infiltrierenden Niederschlägen und kapillarer Wasseraufstieg ausgeschlossen werden, so finden am oberen Modellrand keine Wasser- und daran gekoppelten Stoff- und Wärmeflüsse statt. In der Regel ist jedoch davon auszugehen, dass Niederschläge (bzw. Bewässerungsgaben) infiltrieren und zu nach unten gerichteten Sickerwasser-, Stoff- und Wärmeflüssen im Boden führen. Für den Fall, dass die ungesättigte Zone in einem Wärmetransportmodell berücksichtigt wird, ist auch der thermische, atmosphärische Einfluss (Oberflächentemperatur) ein häufig nicht zu vernachlässigender Faktor. Nach oben gerichtete Wasser-, Stoff- und Wärmeflüsse (z. B. durch kapillaren Aufstieg) sind neben den generellen Bodeneigen-

schaften auch von den Wasserentzügen durch Pflanzen (Transpiration) bzw. von der Bodenverdunstung (Evaporation) abhängig und müssen bei der Festlegung der Randbedingung berücksichtigt werden. Des Weiteren ist es auch erforderlich, etwaige punktuelle und lineare Einträge in das (z. B. Infiltration aus Oberflächengewässern) bzw. Entnahmen aus dem Grundwassersystem zu berücksichtigen.

Der untere Modellrand wird in der Regel durch eine geologische Schicht abgebildet, an welcher durch die grundwasserstauenden Eigenschaften die Wasser- und Stoffflüsse gegenüber dem darüber liegenden Grundwasserleiter vernachlässigbar klein sind. Weist das betrachtete hydrogeologische System keinen (durchgängigen) Grundwasserstauer auf, so müssen auch an diesem Rand die Zu- und Abflüsse von Wasser und gelösten Stoffen entsprechend vorgegeben werden. Für die Wärmetransportmodellierung ist der Wärmefluss für die Tiefenlage des Grundwasserstauers vorzugeben.

Zur Stellungnahme

7 AUFBAU DES NUMERISCHEN MODELLS

Bei der Überführung des hydrogeologischen Modells in eine numerische, quantitative Grundstruktur werden unter Bedachtnahme auf den Modellzweck natürliche Gegebenheiten, die – per se – nie vollständig bekannt sein können, in ein vereinfachendes, mathematisches Gebilde übertragen.

Bei diesem Vorgang müssen viele sich gegenseitig beeinflussende bzw. miteinander verschränkte Aspekte bedacht und entschieden werden, wobei aufgrund der iterativen Natur des Vorhabens meist mehrere Durchführungsschleifen erforderlich sind. Nicht nur deshalb ist eine nachvollziehbare Dokumentation der einzelnen Arbeitsschritte unabdingbar.

Für das Design und die konkrete Modellerstellung müssen die nachfolgenden Punkte unter Berücksichtigung gegenseitiger Wechselwirkungen und Abhängigkeiten geklärt und definiert werden (Abb. 1):

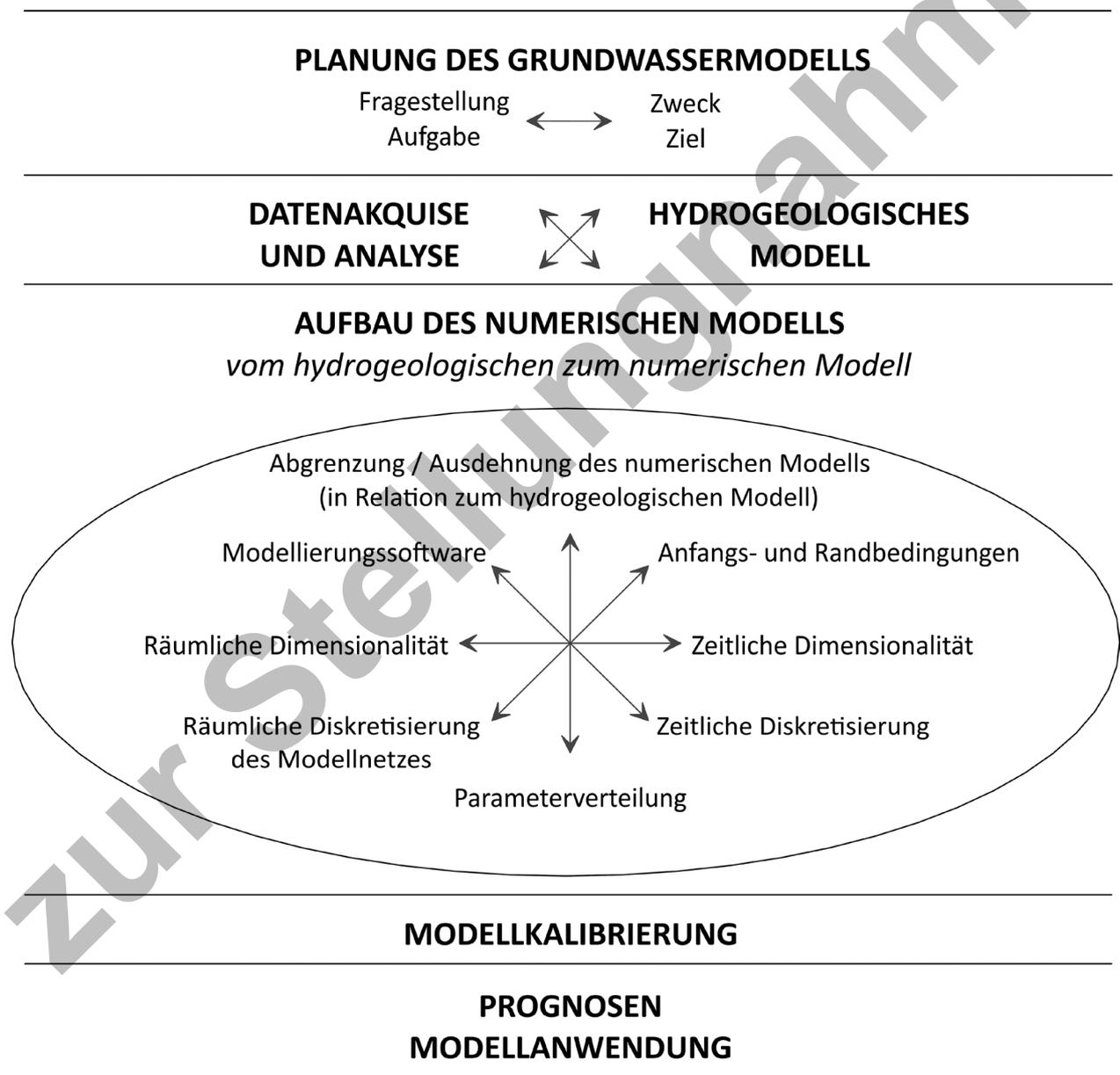


Abb. 1 Wechselwirkungen und Abhängigkeiten

7.1 Modellierungssoftware

Verschiedene Softwareanwendungen ermöglichen die Umwandlung hydrogeologischer Modelle in numerische Modelle. Sie verfügen meist über eine grafische Benutzeroberfläche, die es Benutzenden erleichtert, diese numerischen Modelle zu erstellen, zu bearbeiten und zu analysieren.

Für die Verarbeitung und den Austausch von Modellierungsdaten stehen verschiedene Dateiformate (z. B. *.dat, *.sql, *.dxf, *.shp) zur Verfügung, weswegen es zweckmäßig ist, bereits bei der Auftragsvergabe die vom Auftraggeber gewünschten Dateiformate festzulegen. Diese sollten auf eine möglichst hohe versionsübergreifende Kompatibilität („backward and forward compatibility“) ausgelegt sein. Generell sollte die Datenstruktur in möglichst einfacher Form vorliegen (z. B. x/y/z), sodass eine Weitergabe zwischen unterschiedlichen Programmen und Bearbeitenden – auch auf lange Sicht – ohne Interpretationsspielraum bzw. Informationsverlust möglich ist. Darüber hinaus ist abzuklären, ob bei eventuell absehbaren Modellerweiterungen und/oder -verfeinerungen die gewählte Software weiterverwendet werden kann.

Bei der Wahl der Modellierungssoftware gilt es, sich für ein bestimmtes numerisches Verfahren zu entscheiden. Bei den gängigsten kommerziellen Softwareanwendungen handelt es sich um sogenannte Netzverfahren, bei denen meist entweder die Finite-Elemente-Methode (FEM) oder die Finite-Differenzen-Methode (FDM) verwendet wird. Beide Verfahren basieren im Wesentlichen auf der Lösung bzw. Annäherung partieller Differenzialgleichungen zur Ermittlung der Strömung und des Stoff- und Wärmetransports in einem in finite (endlich dimensionale) Elemente bzw. Volumen untergliederten (diskretisierten) Modellraum. Methodische Unterschiede der beiden Verfahren, mathematische Formeln und Zusammenhänge können z. B. in Anderson et al. (2015) nachgelesen werden.

Der bzw. die Erstellende des numerischen Modells kann in der Regel die Algorithmen der Modellierungssoftware nur bis zu einem gewissen Grad nachvollziehen. Um beurteilen zu können, ob die vorgegebene Fragestellung mit dem gewählten Softwarepaket schlüssig beantwortet werden kann, muss die erstellende Person jedoch mit den Grundprinzipien der mathematischen Ansätze und numerischen Verfahren vertraut sein.

7.2 Räumliche Dimensionalität

Die Frage, welche räumliche Dimensionalität (zweidimensional oder dreidimensional) für das numerische Grundwassermodell heranzuziehen ist, wird in der Regel bereits durch das hydrogeologische Modell (z. B. Stockwerksgliederung der Grundwasserleiter, Mächtigkeit des Grundwasserleiters) und die Fragestellung festgelegt.

Im einfachsten Fall kann das numerische Grundwassermodell auf eine einzelne Modellschicht (zweidimensionales Modell) reduziert werden. Dies ist beispielsweise dann der Fall, wenn die Mächtigkeit des Grundwasserleiters gegenüber der horizontalen Erstreckung gering und die Vertikalströmung im Vergleich zur Horizontalströmung vernachlässigbar klein ist (horizontal zweidimensional). Für manche Fragestellungen ist eine zweidimensionale vertikale Betrachtungsweise zweckmäßig (z. B. Dammdurchströmung).

Die Festlegung der räumlichen Dimensionalität des Modells ist jedenfalls schlüssig zu begründen. In Tab. 1 werden, abhängig von der Art des Modells (Strömungs-, Stofftransport- und Wärmetransportmodell), mögliche Entscheidungskriterien zur Wahl der Modelldimensionalität angeführt.

Tab. 1 Kriterien zur Wahl der Modelldimensionalität (verändert nach LANUV 2010)

Modellart	SIMULATION	
	2D	3D
Strömungsmodell		
Einfacher Untergundaufbau: Grundwasserleiter, Grundwasserstauer (keine Stockwerksgliederung)	X	
Geringe Mächtigkeit des Grundwasserleiters im Vergleich zur horizontalen Ausdehnung	X	
Stockwerksgliederung des Untergrunds (mehrere Grundwasserleiter)		X
Fragestellung, bei der dreidimensionale Fließvorgänge berücksichtigt werden müssen (z. B. Brunnenfeld mit vollkommenen und unvollkommenen Brunnen, unterschiedliche Grundwasserentnahmehöhen)		X
Stofftransportmodell		
Geringe Mächtigkeit des Grundwasserleiters im Vergleich zur horizontalen Ausdehnung	X	
Vertikale Verteilung eines Stoffs ist ein vernachlässigbarer Faktor (komplette Durchmischung eines Stoffs in der Vertikalen)	X	
Vertikale Verteilung eines Stoffs ist ein zu berücksichtigender Faktor		X
Wärmetransportmodell		
Geringe Mächtigkeit des Grundwasserleiters im Vergleich zur horizontalen Ausdehnung	X	
Vertikale Ausdehnung der Temperaturfahne ist ein vernachlässigbarer Faktor	X	
Vertikale Ausdehnung der Temperaturfahne ist ein zu berücksichtigender Faktor		X

7.3 Räumliche Diskretisierung des Modellnetzes

Numerische Grundwassermodelle können in unterschiedlichen räumlichen Ausdehnungen und Auflösungen erstellt werden. Dementsprechend ist es nicht möglich, eine eindeutige Regel für die erforderliche Netzauflösung zu definieren. Diese Festlegung muss im Einzelfall aus der konkreten Fragestellung, den örtlichen Gegebenheiten und auch der Güte und Dichte der vorhandenen Datenbasis abgeleitet und begründet werden.

Das Modellnetz sollte sich an vorgegebenen Punkt- und Linienstrukturen orientieren, die die äußeren und inneren Randbedingungen (Oberflächengewässer, Entnahmebrunnen etc.) repräsentieren oder für die Modellkalibrierung verwendet werden (z. B. Grundwassermessstellen). Vorausschauend kann bei der Netzerstellung bereits eine nachträglich notwendige Verdichtung miteingeplant werden.

Bei dreidimensionalen Modellen muss auch die Auflösung in der Vertikalen berücksichtigt werden. Einer hydrogeologischen Einheit ist mindestens eine Modellschicht (Layer) zuzuordnen, allerdings ist zumeist eine zusätzliche Diskretisierung aus numerischen oder geometrischen Gründen erforderlich.

Grundsätzlich ist eine feinere Netzgeometrie z. B. in folgenden Fällen oder Modellbereichen sinnvoll und erforderlich:

- bei steilem oder unregelmäßigem Grundwassergefälle (z. B. Terrassenkanten, Absenktrichter),
- bei sehr heterogener Geometrie eines Grundwasserleiters,
- wenn irreguläre oder kleinräumige Geometrien (z. B. mäandrierendes Oberflächengewässer, Bauwerke) im Modell berücksichtigt werden sollen.

Letztlich stellt ein zu einer konkreten Problemstellung angemessen hoch aufgelöstes Modellnetz immer einen Kompromiss zwischen der notwendigen und verfügbaren Datendichte und der Handhabbarkeit des erstellten Modells (Bearbeitungsaufwand, Dateigröße, Rechenlaufzeit etc.) dar.

Eine gute Netzgeometrie ist in Finite-Elemente-Modellen z. B. unter folgenden Voraussetzungen gegeben:

- Das Netz besteht aus möglichst gleichseitigen Modellelementen.
- Sehr stumpfe bzw. sehr spitze Winkel der Modellelemente werden vermieden.
- Das Delaunay-Kriterium wird erfüllt.

Bei Transportmodellen kann die Qualität der Netzdiskretisierung z. B. mittels der Péclet-Zahl evaluiert werden.

Allgemein kann die Einhaltung des Péclet- und Courant-Kriteriums bei Transportmodellen als ein Maß zur Vermeidung von numerischen Dispersionsprozessen bzw. als Maß der numerischen Stabilität eines Modells herangezogen werden.

7.4 Randbedingungen

Strömungs- und Transportgleichungen sind partielle Differenzialgleichungen, deren Lösung die Vorgabe von Randbedingungen und – im Fall von instationären Modellen – Anfangsbedingungen erfordert. Die Randbedingungen bestimmen den Wasser-, Stoff- oder Wärmefluss in das Modellgebiet hinein bzw. hinaus. Dieser kann an den Modellrändern (äußere Randbedingungen), aber auch im Innern des Modellgebiets erfolgen (innere Randbedingungen).

Im Allgemeinen können drei Arten von Randbedingungen unterschieden werden:

- Randbedingungen der ersten Art (Dirichlet-Bedingungen) schreiben den Wert der abhängigen Variable am Rand vor, im Falle eines Strömungsmodells das hydraulische Potenzial (z. B. gemessene Wasserstände), bei Transportmodellen die Konzentration bzw. die Temperatur.
- Randbedingungen der zweiten Art (Neumann-Bedingungen) entsprechen der Vorgabe des Wasser- bzw. Stoff- oder Wärmeflusses senkrecht zum Rand (z. B. Zufluss aus angrenzendem Festgestein, Brunnenentnahme).
- Randbedingungen der dritten Art (Robin- oder Cauchy-Bedingungen) kombinieren ein vorgegebenes Potenzial (Dirichlet-Bedingungen) mit einem vorgegebenen Gradienten (Neumann-Bedingungen) (z. B. wasserstandsabhängige Infiltration aus Oberflächengewässern bei eingeschränkter hydraulischer Anbindung an das Grundwasser).

Stationäre Modelle erfordern zumindest an einem Punkt die Definition einer Randbedingung der ersten oder dritten Art. Es wird empfohlen, Randbedingungen der ersten Art an seitlichen Rändern und im Zustrom zu vermeiden. Sollten diese dennoch verwendet werden, so ist dies fundiert zu begründen (LANUV 2010). Bei Vorgabe des hydraulischen Potenzials bzw. der Konzentration oder Temperatur stellen sich im Modell Wasser- bzw. Stoff- oder Wärmeflüsse ein, die erforderlich sind, um die vorgegebenen Potenzialhöhen zu halten.

Oberflächengewässer stellen oftmals geeignete äußere Modellgrenzen dar oder werden als innere Randbedingung berücksichtigt, wenn ihre Wechselwirkung mit dem Grundwasser von Bedeutung ist. Sofern sie hydraulisch gut an den Grundwasserleiter angebunden sind, können sie als Randbedingung der ersten Art im Modell berücksichtigt werden. Im Falle von zweidimensionalen Modellen ist zu bedenken, dass die Randbedingung über die gesamte Grundwassermächtigkeit wirksam ist. Das Oberflächengewässer wirkt als Wasserscheide und wird nicht unterströmt. Ist die hydraulische Anbindung an das Grundwasser z. B. infolge Kolmation des Flussbetts eingeschränkt, wird das Oberflächengewässer als Randbedingung der dritten Art im Modell berücksichtigt. Die Kolmationsschicht fungiert dabei als hydraulischer Widerstand, der die Wirkung des Potenzials des Oberflächengewässers dämpft, und geht in diesem Typ der Randbedingung als Leakage-Koeffizient ein. Ebenso kann mit einer Randbedingung der dritten Art der Einfluss eines weit entfernten Festpotenzials (z. B. Oberflächengewässer) modelliert werden, das aufgrund der großen Entfernung nur gedämpft im betrachteten Modellgebiet wirkt.

An naturräumlichen Begrenzungen, etwa dem Festgesteinsrand eines Porengrundwasserleiters, kann der Wasser- bzw. Stoff- oder Wärmefluss mittels Randbedingung der zweiten Art vorgegeben werden. Dies erfordert eine Berechnung/Abschätzung des Randzuflusses aus dem an den Modellrand angrenzenden Gebiet (z. B. Berechnung des diffusen Zuflusses mithilfe einer Niederschlag-Abfluss-Modellierung; siehe auch ÖWAV 2019). Ein Sonderfall dieser Randbedingung ist ein undurchlässiger Rand. Dieser kann auch entlang einer Stromlinie festgelegt werden, sofern gewährleistet ist, dass die Stromlinie unter den zu simulierenden Bedingungen ortsfest ist und sich gegebenenfalls modellierte Änderungen nicht bis zum Modellrand auswirken. Grundsätzlich sollten jedoch hydrogeologisch eindeutig begründete, naturräumliche Randbedingungen gegenüber hydraulisch definierten Rändern wie Stromlinien bevorzugt werden.

Auch die Grundwasserneubildung aus dem Niederschlag wird mittels Randbedingung der zweiten Art als nach unten gerichteter Wasserfluss an der Grundwasseroberfläche berücksichtigt.

Innerhalb des Modellgebiets gelegene Quellen und Senken, an denen die Wasser- bzw. Stoff- oder Wärme Flüsse bekannt sind, etwa punktuelle Grundwasseranreicherungen oder -entnahmen, werden ebenfalls als Randbedingung der zweiten Art im Modell implementiert. In dreidimensionalen Modellen ist dabei die Tiefenlage der Filterstrecke des Entnahme- oder Anreicherungsbauwerkes zu berücksichtigen.

7.5 Parameterverteilung

Meist zeigen einige oder alle Parameter, die die Grundwasserströmung bzw. den Stoff- oder Wärmetransport steuern, innerhalb des Modellgebiets eine räumliche Variabilität, die beim Modellaufbau berücksichtigt werden muss. Die räumliche Parameterverteilung muss daher abgeschätzt und auf das Modellnetz übertragen werden. Dabei muss bedacht werden, dass Materialeigenschaften in der Regel maßstabsabhängig sind. Daher können beispielsweise im Labor ermittelte Werte der hydraulischen Leitfähigkeiten oder Dispersivitäten nicht unmittelbar in einem großskaligen Grundwassermodell verwendet werden, sondern müssen auf den Maßstab der Elemente hochskaliert werden.

Mit Labor- oder Feldmethoden ermittelte Parameterwerte liegen in der Regel nicht flächendeckend, sondern nur punktuell vor, müssen im numerischen Modell aber für jedes Element definiert werden. Dies erfolgt meist durch Zonierung, also der Ausweisung von Teilbereichen mit jeweils konstantem Parameterwert, und/oder Interpolation, bei der für jedes Element ein Parameterwert abgeschätzt wird. Dabei ist auf Basis geologischer Kenntnisse (Sedimentationsgeschichte/-prozesse etc.) die Plausibilität der erhaltenen Parameterverteilung zu prüfen. Da die Ermittlung der räumlichen Parameterverteilung oftmals mit großen Unsicherheiten behaftet ist, werden in der Regel einige Modellparameter im Zuge der Kalibrierung des Modells angepasst.

7.6 Zeitliche Dimensionalität

Die Festlegung der zeitlichen Dimensionalität des Modells ist stark von der standortspezifischen Situation sowie der zu lösenden Fragestellung abhängig. Es ist schlüssig zu begründen, ob ein stationäres Modell ausreicht oder ein instationäres Modell erforderlich ist. Grundsätzlich muss – sowohl für die instationäre als auch für die stationäre Modellierung – gewährleistet sein, dass die für die zu klärende Fragestellung erforderliche Datengrundlage verfügbar ist. Z. B. sind für instationäre Strömungsmodelle repräsentative Anfangsbedingungen, Grundwasserganglinien in für die gegenständliche Fragestellung ausreichender zeitlicher Auflösung und Beobachtungsdauer sowie Speicherkoeffizienten erforderlich.

Bei stationären Modellen sind die hydraulischen Potenziale bzw. Konzentrationen oder Temperaturen und damit auch die Wasser- bzw. Stoff- oder Wärme Flüsse zeitlich konstant. In der Natur sind stationäre Verhältnisse in der Regel nicht gegeben. Trotzdem können für gewisse Fragestellungen unter geeigneten Gegebenheiten stationäre Verhältnisse angenommen werden.

Nach LANUV (2010) ist eine stationäre Strömungsmodellierung beispielsweise zulässig, wenn

- die Grundwasserstände im Vergleich zur Grundwassermächtigkeit nur eine geringe zeitliche Schwankungsbreite aufweisen,
- die Grundwasserstandsganglinien keinen Trend aufweisen,
- nur geringfügige zeitliche Änderungen der Grundwasserfließrichtung vorliegen,
- Grundwasserentnahmemengen nur geringe zeitliche Schwankungen aufweisen und
- eine instationäre Interaktion zwischen Oberflächengewässern und dem Grundwasser für die Fragestellung nicht relevant ist.

Eine instationäre Modellierung ist jedenfalls erforderlich, wenn zeitabhängige Phänomene (z. B. raumzeitliche Ausbreitung einer Hochwasserwelle aus der Vorflut in den Porengrundwasserleiter, Optimierung der Pumpraten in einem Brunnenfeld, Auswirkung einer zeitlich variablen Grundwasserneubildung) nachgebildet werden sollen oder wenn wesentliche Modellparameter einer zeitlichen Variabilität unterworfen sind (z. B. Dichte- bzw. Viskositätsänderungen bei Temperaturschwankungen, Leakage-Koeffizienten in Abhängigkeit vom Wasserstand).

Haben vorliegende instationäre Verhältnisse jedoch keinen Einfluss auf die zu klärende Fragestellung (z. B.: Um wieviel ändert sich der langjährige mittlere Grundwasserspiegel, wenn sich die langjährige mittlere Grundwasserneubildung aus infiltrierenden Niederschlägen halbiert?), so kann auch ein stationärer Modellansatz zielführend sein.

Ein weiterer Aspekt bei der Entscheidungsfindung und Definition der zeitlichen Dimensionalität – und in Folge auch für die Zeitschrittlänge einer eventuellen instationären Modellierung – sind die vorliegenden Eigenschaften des Grundwasserleiters sowie die Randbedingungen. Ihr Einfluss und ihre Wechselwirkungen sind bei der Wahl des raumzeitlichen Maßstabs des instationären Modells kritisch in Betracht zu ziehen und mitzuberücksichtigen. Diesbezüglich wird z. B. auf Haitjema (1995, 2006) bzw. Anderson et al. (2015, cum lit.) verwiesen.

Naturgemäß erfordern Fragestellungen zu Transportmodellen in der Regel eine zeitabhängige Betrachtung, sodass in der Praxis nahezu ausschließlich instationäre Transportmodelle zum Einsatz kommen. Es ist jedoch darauf hinzuweisen, dass instationäre Stoff- bzw. Wärmetransportmodelle durchaus auf stationären Strömungsmodellen aufgebaut werden können.

7.7 Zeitliche Diskretisierung

Bei instationären Modellen ist die zeitliche Diskretisierung in Abhängigkeit von Fragestellung und Prozessdynamik sowie der betrachteten zeitlichen und räumlichen Skala festzulegen und zu begründen. Im Hinblick auf eine möglichst genaue Lösung der Modellgleichung sind kleine Zeitschritte wünschenswert. Dem gegenüber steht der damit verbundene höhere Rechenaufwand. Das Courant-Kriterium kann – insbesondere bei Transportmodellen – herangezogen werden, um die richtige Zeitschrittlänge zu wählen und damit numerische Stabilität des Modells zu gewährleisten.

Folgende Kriterien sollten bei der Festlegung der zeitlichen Diskretisierung beachtet werden (vgl. Barnett et al., 2012):

- Innerhalb eines Modellzeitschritts sind die Randbedingungen konstant. Die Zeitschrittlänge muss daher zumindest so gewählt werden, dass die zeitlichen Änderungen der Randbedingungen im Hinblick auf die Fragestellung ausreichend genau repräsentiert werden können.
- Um rasche Änderungen von Grundwasserständen bzw. Konzentrationen oder Temperaturen ausreichend aufzulösen, kann es erforderlich sein, die ursprünglich gewählten Zeitschritte weiter zu unterteilen. Änderungen der Randbedingungen (beispielsweise der Beginn einer Wasserentnah-

me an einem Brunnen) wirken sich anfänglich am stärksten und mit zunehmender Zeit geringer aus, weshalb die Verwendung von variablen Zeitschrittlängen vorteilhaft sein kann.

- Die gewählte zeitliche Diskretisierung bestimmt, für welche Zeitpunkte bzw. in welchen Zeitintervallen Modellergebnisse berechnet werden. Sie muss daher auch auf die für die Fragestellung gewünschte zeitliche Auflösung und die vorhandenen Beobachtungsdaten abgestimmt werden.

7.8 Anfangsbedingungen

Numerische Modelle benötigen Startwerte als Anfangsbedingung für die Lösung der Modellgleichung. Für stationäre Modelle gibt es keine besonderen Anforderungen an die Startwerte. Wenn die gewählten Anfangsbedingungen nahe am Ergebnis liegen, wird die Lösung der Modellgleichung(en) schneller erreicht, aber sie haben keinen Einfluss auf das Modellergebnis.

Bei instationären Modellen hingegen stellen die Anfangsbedingungen die Grundwasserstände bzw. die Konzentrationen oder Temperaturen zu Beginn des Simulationszeitraums dar und beeinflussen die Modellergebnisse. Fehlerhafte Annahmen in den Anfangsbedingungen wirken sich auf die Ergebnisse der nachfolgenden Zeitschritte aus oder führen im Extremfall zu einem instabilen Modell.

Im Allgemeinen nimmt der Einfluss der Anfangsbedingung mit zunehmender Zeit ab. Es ist daher empfehlenswert, den Simulationszeitraum so zu wählen, dass der für die Fragestellung relevante Zeitraum einen ausreichenden zeitlichen Abstand zum Simulationsbeginn aufweist (vgl. LANUV 2010: „numerische Einschwingphase“). Darüber hinaus ist es gängige Praxis, die Ergebnisse einer stationären Simulation als Anfangsbedingung zu wählen. Auch wenn zu diesem Zeitpunkt im realen System keine stationären Bedingungen vorliegen, gewährleistet diese Vorgehensweise, dass die angenommenen Grundwasserstände bzw. Konzentrationen oder Temperaturen konsistent mit den Randbedingungen sind.

8 MODELLKALIBRIERUNG

Die Modellkalibrierung ist ein wesentlicher Arbeitsschritt in der Grundwassermodellierung. In der Regel sind einige Modellparameter unbekannt oder nicht flächendeckend verfügbar (z. B. Durchlässigkeitsbeiwerte oder Leakage-Koeffizient) und müssen für das Grundwassermodell kalibriert werden. Das Ziel der Modellkalibrierung ist daher, durch Ergänzung und Anpassung der unbekanntesten Modellparameter eine möglichst gute Übereinstimmung der simulierten Ergebnisse mit Messwerten zu erreichen (bei Strömungsmodellen üblicherweise die Grundwasserhöhen).

8.1 Kalibrierungsparameter

Bei der Kalibrierung werden Modellparameter (z. B. Materialeigenschaften) innerhalb eines realistischen Wertebereichs angepasst bzw. optimiert. Diese Parameter werden als Kalibrierungsparameter bezeichnet. Die folgende Auflistung gibt einen Überblick der in der Regel wichtigsten bzw. sensitivsten Kalibrierungsparameter, die für die Modellkalibrierung von Grundwasserströmungsmodellen angepasst werden:

- hydraulische Leitfähigkeit und Transmissivität,
- Leakage-Koeffizient für Infiltration und Exfiltration (Gewässer, Drainagen),
- Speicherkoeffizient.

Bei Stoff- und Wärmetransportmodellen sind z. B. auch die effektive (durchflusswirksame) Porosität, die longitudinale und die transversale Dispersivität, die Wärmeleitfähigkeit oder Sorptionsparameter als mögliche Kalibrierungsparameter zu nennen. In Abhängigkeit vom Anwendungsfall können auch Randzuflüsse sowie Stoff- oder Wärmequellen in die Kalibrierung mit einbezogen werden. Ist im geplanten Modellvorhaben noch keine Kenntnis zu sensitiven Modellparametern vorhanden, so wird die Durchführung einer Sensitivitätsanalyse empfohlen.

8.2 Sensitivitätsanalyse

Die Sensitivitätsanalyse gibt Aufschluss darüber, welche Parameter das Modellergebnis wesentlich beeinflussen und für die Modellkalibrierung sinnvollerweise herangezogen werden können. Dabei werden gezielt Parameter in einer plausiblen Bandbreite variiert und die Auswirkung dieser Parametervariation auf die Modellergebnisse untersucht. Führt eine geringe Änderung eines Parameters zu großen Änderungen der Ergebnisse, so gilt dieser als sensitiv.

Die Erkenntnisse aus der Sensitivitätsanalyse sind daher wesentlich für die Kalibrierung, da nur sensitive Parameter im Zuge der Modellkalibrierung zuverlässig bestimmt werden können. Nicht sensitive Parameter, die nur einen geringen oder keinen Einfluss auf das Ergebnis haben, können durch Kalibrierung nicht sinnvoll ermittelt werden.

Die bei der Modellierung gewählten Randbedingungen können sich ebenfalls sensitiv auf die Ergebnisse auswirken. Durch die Variation der Randbedingungen, z. B. der oft mit Unsicherheit behafteten Randzuflüsse, kann deren Sensitivität quantifiziert werden.

Falls Modellparameter identifiziert werden, deren Werte unzureichend bekannt sind, die aber einen großen Einfluss auf das Modellierungsergebnis ausüben, ist es sinnvoll, durch die Erhebung von zusätzlichen Informationen die Unsicherheit dieser Parameter zu reduzieren, um die Modellgüte zu verbessern. Dagegen ist ein übermäßiger Aufwand zur Verbesserung der Datenlage von nicht sensitiven Parametern nicht zielführend und deshalb zu vermeiden (Bear and Cheng 2010).

Ebenso ist zu prüfen, ob die Auswirkungen der Variation eines Parameters durch die Variation eines anderen Parameters kompensiert werden. So können sich z. B. die gleichzeitige Änderung der Transmissivität und der Grundwasserneubildung in ihrer Wirkung aufheben, sodass es in Summe zu keiner Änderung

des Grundwasserspiegels kommt. In diesem Fall ist die Lösung nicht eindeutig und daher in Bezug auf die Prognosefähigkeit des Modells zu überprüfen. Durch die Berücksichtigung zusätzlicher Informationen, idealerweise Messungen der interessierenden Zielgrößen, die mit anderen, unabhängigen Methoden ermittelt wurden (z. B. Zuflüsse auf Basis hydrochemischer oder isotopenhydrologischer Untersuchungen), können Mehrdeutigkeiten reduziert werden.

Die in der Praxis eingesetzte Kalibrierungssoftware ermittelt automatisch Sensitivitäten der kalibrierten Parameter (üblicherweise hydraulische Leitfähigkeit, Leakage- und Speicher-Koeffizient), die für die Bewertung der Kalibrierung herangezogen werden können. Die Ergebnisse werden zumeist in Form einer Sensitivitätsmatrix dargestellt. Diese zeigt auf, wie stark sich eine Änderung eines Parameters auf die Ergebnisse (z. B. Grundwasserstände, Bilanzmengen) auswirkt.

8.3 Methodik

8.3.1 Stationäre und instationäre Kalibrierung

Im Sinne der zeitlichen Dimensionalität kann die Modellkalibrierung sowohl stationär als auch instationär erfolgen.

Eine stationäre Kalibrierung ist sinnvoll:

- Wenn im Zuge des Planungsprozesses festgelegt wurde, dass ein stationäres Grundwassermodell für die Beantwortung der Fragestellung als ausreichend angesehen wird.
- Als Basis für die instationäre Kalibrierung.

Eine instationäre Kalibrierung ist sinnvoll:

- Wenn im Zuge des Planungsprozesses festgelegt wurde, dass ein instationäres Grundwassermodell für die Beantwortung der Fragestellung eingesetzt werden soll.
- Bei der Kalibrierung des Speicherkoeffizienten (z. B. die modellhafte Nachbildung von Pump- und/oder Versickerungsversuchen).
- Bei der Kalibrierung der Dispersivität (z. B. Markierungsversuch).
- Bei der Abbildung von Grundwasserspiegel-, Konzentrations- bzw. Temperaturschwankungen.

Die instationäre Kalibrierung erfolgt im Regelfall auf Basis einer stationären Kalibrierung. Dabei wird nach durchgeführter stationärer Kalibrierung eine instationäre Berechnung ausgeführt. Sind die instationären Ergebnisse nicht zufriedenstellend, wird die stationäre Kalibrierung oder eine instationäre Kalibrierung mit geänderten Kalibrierungsparametern bzw. Randbedingungen erneut durchgeführt. Aus diesem iterativen Vorgehen resultiert schlussendlich ein kalibriertes instationäres Modell. Auch eine zeitliche Variabilität der Parameterwerte (z. B. ein im zeitlichen Verlauf sich verändernder Leakage-Koeffizient) ist bei der Kalibrierung zu berücksichtigen.

8.3.2 Startwerte

Zu Beginn der Modellkalibrierung müssen Startwerte der Kalibrierungsparameter festgelegt werden. Diese basieren – sofern vorhanden – auf aus Versuchen ermittelten Werten, z. B.:

- hydraulische Leitfähigkeiten oder Transmissivitäten aus Pumpversuchen,
- Leakage-Koeffizienten (Gewässer, Drainagen) für In- oder Exfiltration aus Feldversuchen,
- effektive (durchflusswirksame) Porositäten aus Laborversuchen,
- Speicherkoeffizienten aus Pumpversuchen.

Darüber hinaus können auch Literatur- oder hydrogeologische Erfahrungswerte für die Festlegung von Startwerten herangezogen werden.

8.3.3 Zielgrößen

Bei der Modellkalibrierung werden die Kalibrierungsparameter so lange adaptiert, bis die Simulationsergebnisse in einem für die Fragestellung ausreichenden Maß mit einer oder mehreren Zielgrößen übereinstimmen. Die Zielgrößen sollen dabei gut bekannte Beobachtungsgrößen sein, die in der Regel direkt gemessen werden können, wie z. B.:

- Grundwasserspiegel bzw. -potenzial,
- In- und Exfiltrationsmengen (z. B. aus Abflussmessungen in Oberflächengewässern oder Drainagen),
- Abstandsgeschwindigkeiten (z. B. aus Markierungsversuchen),
- Stoffkonzentrationen bei Stofftransportmodellen,
- Temperaturen bei Wärmetransportmodellen.

Liegen für gewisse Zielgrößen keine Messwerte vor, so können auch hydrogeologisch abgeschätzte Werte für die Kalibrierung herangezogen werden.

Da die erforderlichen hydrogeologischen Informationen zumeist unvollständig sind, kann eine exakte Übereinstimmung von gemessenen und berechneten Werten nicht erwartet werden. Das erforderliche Maß der Übereinstimmung ist in Anbetracht der geplanten Verwendung des Grundwassermodells, der Modellziele und des Maßstabs des Grundwassermodells festzulegen.

8.3.4 Manuelle und automatisierte Kalibrierung

Das bei der Kalibrierung anzusetzende Vorgehen ist abhängig

- von der räumlichen Heterogenität der Kalibrierungsparameter,
- von den zur Verfügung stehenden Beobachtungspunkten, -größen und -werten,
- von der geplanten Verwendung des Grundwassermodells,
- von den Modellzielen und
- vom Maßstab des Grundwassermodells.

So ist bei einer geringen räumlichen Heterogenität der Kalibrierungsparameter bzw. bei einer geringen Anzahl an Beobachtungspunkten eines kleinräumigen Grundwassermodells üblicherweise eine manuelle Kalibrierung ausreichend. Auch für größere Modellgebiete ist eine manuelle Kalibrierung oft zielführend, erfordert jedoch eine gute Kenntnis der hydrogeologischen Prozesse und Zusammenhänge sowie Erfahrung der Modellierenden.

Eine automatisierte Kalibrierung sollte bei Grundwassermodellen mit mehreren, sich gegenseitig beeinflussenden Kalibrierungsparametern in Betracht gezogen werden. Eine Gewichtung der Zielgrößen sollte in Anlehnung an die Zuverlässigkeit der Daten erfolgen und muss gegebenenfalls während der Kalibrierung angepasst werden. Die automatisierte Kalibrierung darf dabei jedoch nicht als Ersatz für fehlendes hydrogeologisches Wissen über die wesentlichen Prozesse und Zusammenhänge im Modellgebiet angesehen werden.

Es ist sicherzustellen, dass die hydrogeologischen Prozesse im Modell entsprechend abgebildet sind, sodass das Modell nicht nur die Beobachtungswerte nachbildet, sondern auch prognosefähig ist. Definiert man z. B. unplausible Minimal- und Maximalwerte der Kalibrierungsparameter und/oder werden zu viele Parameter gleichzeitig automatisiert kalibriert, besteht die Gefahr, dass die Simulationsergebnisse zwar mit den Beobachtungswerten gut übereinstimmen, diese Übereinstimmung jedoch auf unplausiblen

Werten der Kalibrierungsparameter und einer falschen Prozessabbildung beruht („the model is right for the wrong reason“).

Die in der Praxis eingesetzte Kalibrierungssoftware liefert auch Korrelationsmatrizen und Sensitivitäten der kalibrierten Parameter, die für die Interpretation der Kalibrierung sowie für die Bewertung der Kalibrierungsqualität herangezogen werden können.

8.3.5 Regionalisierung

Bei der Modellierung genügt es in den meisten Fällen nicht, einen über das gesamte Modellgebiet konstanten Modellparameter (z. B. hydraulische Leitfähigkeit, Leakage-Koeffizient) zu verwenden. Das Modell muss in der Lage sein, Heterogenitäten abbilden zu können. Es ist zielführend, das Grundwassermodell dafür entweder in Bereiche (z. B. Zonen für Durchlässigkeitsbeiwerte bzw. Abschnitte für Leakage-Koeffizienten) aufzuteilen und die Parameter für diese zu kalibrieren (siehe Abb. 2) oder die Kalibrierung mit Stützstellen und räumlicher Interpolation durchzuführen (siehe Abb. 3). Mittels dieser Interpolationsmethode können scharfe Übergänge von z. B. der hydraulischen Leitfähigkeit innerhalb einer geologischen Einheit vermieden werden.

Bei der Kalibrierung ist es auch von wesentlicher Bedeutung, dass die Anzahl der Bereiche bzw. Stützstellen in Übereinstimmung mit der Anzahl der Beobachtungspunkte gebracht wird, um eine Überparametrisierung („Overfitting“) zu vermeiden. Dies würde eine Genauigkeit vorgeben, die aufgrund der Datenlage nicht erzielbar ist. Als „Faustregel“ sollte die Anzahl der Bereiche bzw. Stützstellen die Anzahl der Beobachtungen (z. B. Messstellen) nicht übersteigen. Weitere Informationen zum Thema Modellkalibrierung sind in Anderson et al. (2015) und Barnett et al. (2012) angeführt.

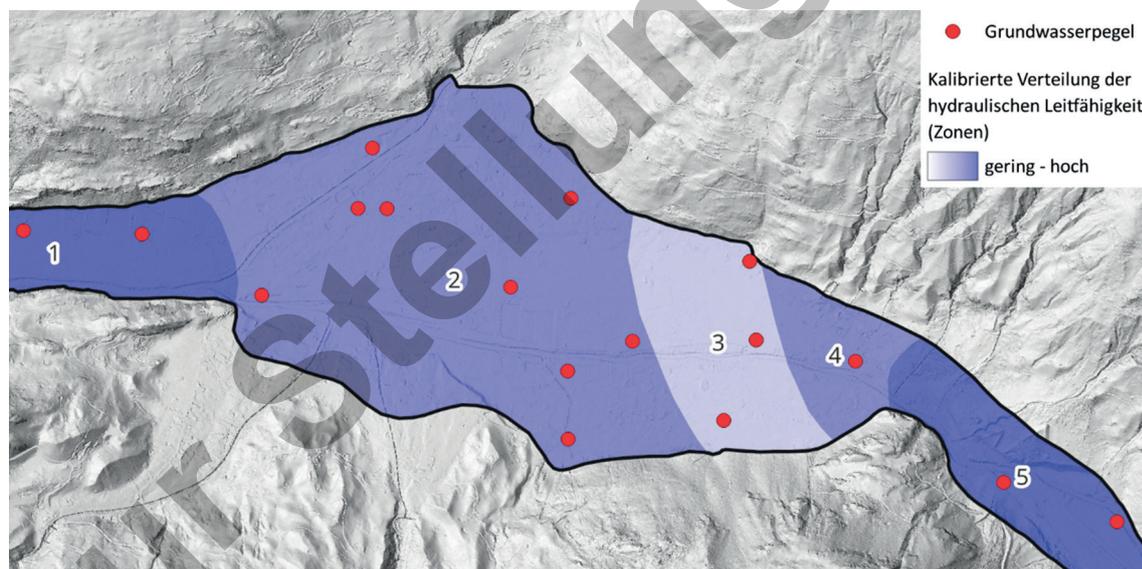


Abbildung 2 Beispiel einer Kalibrierung der hydraulischen Leitfähigkeit mittels Zonenunterteilung

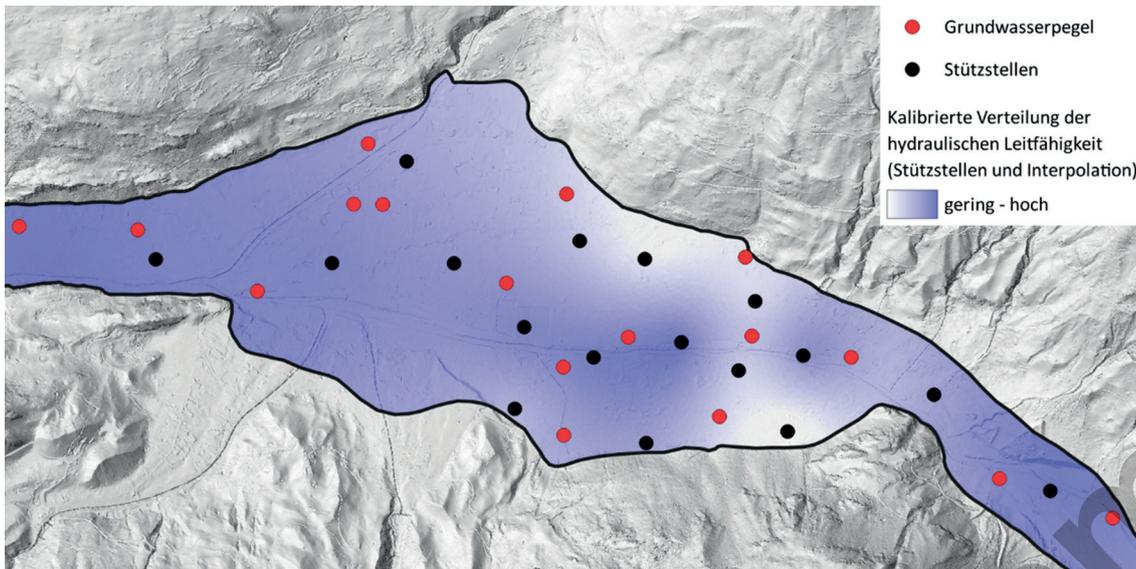


Abbildung 3 Beispiel einer Kalibrierung der hydraulischen Leitfähigkeit mittels Stützstellen und Interpolation. Die Stützstellen können auch identisch mit den Lagen der Grundwasserpegel sein

8.4 Modellgüte

8.4.1 Gütemaße und Abschlusskriterien für die Kalibrierung

Gütemaße erlauben den Vergleich von beobachteten bzw. aus dem hydrogeologischen Modell erwartbaren Größen und den simulierten Modellergebnissen (z. B. Grundwasserspiegellagen). Als Abschlusskriterium wird ein Schwellenwert für ein bestimmtes Gütemaß festgelegt.

Gütemaße können beispielsweise sein:

- Mittlere absolute Abweichung bzw. Standardabweichung der Grundwasserstände, In- und Exfiltrationsmengen, Konzentrationen oder Temperaturen.
- Relative Abweichung zum Erwartungswert der In- und Exfiltrationsmengen, Konzentrationen oder Fließgeschwindigkeiten.
- Visuelle Übereinstimmung von beobachteten und simulierten Zeitreihen der Zielgrößen (Dynamik wird abgebildet).

Weiterführende Informationen sowie die mathematische Beschreibung geeigneter statistischer Kennwerte sind in Barnett et al. (2012), Anderson et al. (2015) sowie in den Unterlagen des Arbeitskreises Kalibration und Prognosefähigkeit von GW-Modellen der FH-DGG (seit 2014) angeführt.

Die Festlegung genereller Abschlusskriterien (Schwellenwerte) für die Kalibrierung, die für alle Anwendungsfälle pauschal gelten, ist nicht möglich. Diese sind vom Modelltyp, der räumlichen und zeitlichen Dimensionalität, der Zuverlässigkeit der Messungen von Beobachtungsgrößen sowie der geplanten Verwendung des Grundwassermodells, den Modellzielen und dem Maßstab des Grundwassermodells abhängig und stets individuell zu bewerten. In jedem Fall sollten die ermittelten Abweichungen in Relation zur Schwankungsbreite der Beobachtungswerte gesetzt und bewertet werden.

Wichtig für die Beurteilung der Modellgüte ist das transparente Aufzeigen der Ergebnisse sowie der Fehler und Unsicherheiten der Kalibrierung. Bei Strömungsmodellen werden in der Regel die gemessenen den berechneten Grundwasserhöhen gegenübergestellt, z. B. in Form von Streudiagrammen und Grundwassergleichenplänen oder bei instationären Modellen durch Ganglinien; empfehlenswert ist auch eine Visualisierung der räumlichen Verteilung der Durchlässigkeitsbeiwerte und der Leakage-Koeffizienten.

8.4.2 Umgang mit Modellabweichungen

Wird die gewünschte Modellgüte und somit eine hinreichende Übereinstimmung zwischen den Beobachtungswerten und den Modellergebnissen nicht erreicht, kann dies verschiedene Ursachen haben. Einerseits können Beobachtungswerte fehlerhaft sein (z. B. ungenaue Ablesung, falsche Einmessung), die erst bei der Kalibrierung identifiziert werden. Andererseits ist das Kalibrierungsergebnis stets unter Einbeziehung des hydrogeologischen Modells kritisch zu bewerten. Dabei ist zu überprüfen, ob die wesentlichen Prozesse oder Einflussfaktoren im Modellkonzept berücksichtigt wurden. Gegebenenfalls ist das hydrogeologische Modell (inkl. Randbedingungen, Lage des Grundwasserstauers) zu überarbeiten bzw. sind weitere Felduntersuchungen durchzuführen. Ein plausibler Wertebereich und eine nachvollziehbare räumliche Verteilung der Kalibrierungsparameter sind erforderlich. Auch ist eine Überprüfung der Wasserbilanz – insbesondere bei der Verwendung von Festpotenzialen an den Modellrändern – unabdingbar.

8.4.3 Validierung

Die Validierung ist ein Instrument für das Aufzeigen der Qualität des kalibrierten Modells und der Belastbarkeit der damit getroffenen Aussagen durch einen Vergleich mit Daten, die in der Kalibrierung nicht verwendet wurden. Eine Beurteilung der Eignung des Modells anhand solcher unabhängigen Daten ist anzustreben, da streng genommen nur ein validiertes Modell für Prognosen geeignet ist. Je nach Datenverfügbarkeit ist dies nicht immer durchführbar. Auch halten z. B. Barnett et al. (2012) es für sinnvoller, alle verfügbaren Beobachtungsdaten für die Kalibrierung zu verwenden. Das Ziel sollte laut Beven and Young (2013) vielmehr darin liegen, die Eignung des Modells für den gegebenen Anwendungsfall zu beurteilen.

Insbesondere bei instationären Modellen kann von einer Validierung abgesehen werden, wenn der Kalibrierzeitraum ausreichend lang ist und eine Vielzahl von unterschiedlichen hydrologischen Bedingungen (Grundwasserhoch- und -tiefstände) abdeckt.

9 PROGNOSEN

In vielen Fällen wird ein Grundwassermodell erstellt, um eine Ausgangssituation nachzubilden und darauf aufbauend Prognosen abzugeben. Mithilfe von Prognosen können zukünftig zu erwartende Zustände des Grundwassersystems und/oder Handlungsalternativen untersucht werden. Auf Basis des kalibrierten Modells können so beispielsweise Auswirkungen von Eingriffen (z. B. Einbauten, zusätzliche Entnahmen) oder geänderten Randbedingungen (z. B. verminderte Grundwasserneubildung, erhöhte Oberflächentemperatur) simuliert werden. Wesentlich ist dabei, dass der Modellraum des kalibrierten Modells ausreichend groß ist, sodass die Reichweite der simulierten Änderungen innerhalb der Modellgrenzen liegt und diese das Ergebnis nicht beeinflussen.

Hinsichtlich der Zeitkomponente ist zu entscheiden, ob für die Prognose eine stationäre oder eine instationäre Simulation notwendig ist. Für letzteren Fall ist ein Modell erforderlich, das auch instationär kalibriert wurde. Dabei ist nach Möglichkeit darauf zu achten, dass der Kalibrierungszeitraum repräsentativ für die zu prognostizierenden Bedingungen ist und die relevanten Systemzustände (z. B. Hoch-/Niedrigwasserphasen) möglichst vollständig umfasst. Werden instationäre Modelle für Langzeitprognosen verwendet (z. B. nachhaltige Bewirtschaftung eines Grundwasserkörpers), so muss das Modell ausreichend lange betrieben werden, bis der neue Gleichgewichtszustand erreicht ist. Dies kann durch einen stationären Rechenlauf überprüft werden. Generell ist ein Prognosezeitraum zu wählen, der in einem angemessenen Verhältnis zum Kalibrierungszeitraum steht. Es wird empfohlen, die Länge des Prognosezeitraums auf maximal das Fünffache des Kalibrierungszeitraums zu begrenzen (Barnett et al. 2012).

zur Stellungnahme

10 UNSICHERHEITSANALYSE

Grundwassermodelle stellen eine Vereinfachung der Wirklichkeit dar und sind daher mit Unsicherheiten behaftet.

Unsicherheitsanalysen sind beispielsweise in der Finanzbranche, bei Klimamodellierungen oder Risikobewertungen ein erprobtes und gängiges Mittel. Sie spielen eine entscheidende Rolle bei der Bereitstellung zuverlässiger Ergebnisse sowie der Unterstützung des Entscheidungsprozesses und helfen, Fehlinterpretationen und Missverständnisse zu vermeiden. Sie sind eng mit der Sensitivitätsanalyse verwoben.

Da eine umfangreiche Unsicherheitsanalyse in der Grundwassermodellierung bisher jedoch fast ausschließlich im wissenschaftlichen Bereich angewendet wurde, wird sie erst an dieser Stelle des Regelblatts behandelt.

Die Unsicherheitsanalyse greift im Wesentlichen auf Statistiken und Wahrscheinlichkeiten zurück. Es handelt sich dabei um keinen einmaligen, sondern um einen iterativen Prozess, der in verschiedenen Stadien einer Modellierung durchgeführt werden sollte, von der Erstellung des Modells bis zur Interpretation der Ergebnisse und Prognosen. Dies liegt daran, dass Unsicherheiten aus verschiedenen Quellen entstehen und sich über die einzelnen Bearbeitungsschritte ausbreiten können.

Die Unsicherheitsanalyse beinhaltet die Identifizierung und Quantifizierung dieser Unsicherheiten, wobei jede Unsicherheitsquelle durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung gekennzeichnet sein sollte, die den Grad der Unsicherheit widerspiegelt.

Die heutzutage eingesetzte Hard- bzw. Software stellt meist keinen limitierenden Faktor mehr dar, um eine Vielzahl an möglichen Parameterkombinationen zu erzeugen und so die Unsicherheit des Modells zu bemessen. Grundsätzlich gilt: Je weitreichender der Einfluss eines Ergebnisses (bzw. der Entscheidung, die darauf beruhend getroffen wird), desto umfangreicher sollte auch die Unsicherheitsanalyse sein.

10.1 Arten von Unsicherheiten

Je nach Fachbereich werden unterschiedliche Unsicherheiten erkannt bzw. beschrieben (z. B. Barnett et al. 2012; BfR 2014; EFSA 2018). Bei der Grundwassermodellierung bietet sich die Unterscheidung folgender Unsicherheiten an:

Modellunsicherheit: Die Modellunsicherheit entsteht aus den Vereinfachungen und Annahmen im Modell und bei der Grundwassermodellierung aus dem Versuch, Vorgänge in der Natur mathematisch zu reproduzieren. In vielen Fällen sind Modelle daher simplifizierte Darstellungen komplexer physikalischer Systeme und die Genauigkeit hängt davon ab, wie gut diese Vereinfachungen die wesentlichen Merkmale des Systems erfassen.

Messunsicherheit: Die Messunsicherheit resultiert einerseits aus der Ungenauigkeit der eingesetzten Instrumente zur Messung der Eingangsvariablen (z. B. Messtoleranz einer Drucksonde, Rundung) oder aus Anwendungsfehlern bei der Bedienung dieser Instrumente (z. B. mangelhafte bzw. keine Kalibrierung oder Ablesefehler).

Parameterunsicherheit: Die Parameterunsicherheit leitet sich aus einem mangelnden Wissen über die tatsächlichen Werte der in einem Modell verwendeten Parameter ab. Eingangsdaten sind in der Grundwassermodellierung nie vollständig, da durch Erhebungen immer nur punktuelle Werte für die maßgebenden Modellparameter vorliegen. So können etwa bei der Untergrunderkundung nicht detektierte kleinräumige Änderungen in der Durchlässigkeitsverteilung (z. B. in einen Kiesgrundwasserleiter eingelagerte Tonlinsen) einen signifikanten Einfluss auf den Stofftransport haben. Auch muss in diesem Zusammenhang auf den Unterschied zwischen „harten“ und „weichen“ Parametern hingewiesen werden.

Hydraulische Leitfähigkeiten, die aus Ergebnissen von Pumpversuchen oder Markierungsversuchen ermittelt wurden, sind belastbarer (hart) als jene, die auf Grundlage von Bohransprachen oder aus Siebana-lysen abgeleitet wurden (weich) und decken darüber hinaus einen größeren Untersuchungsbereich ab.

Szenariounsicherheit: Die Szenariounsicherheit ergibt sich aus einem mangelnden Wissen über die zukünftigen Bedingungen, die die Ergebnisse der Grundwassermodellierung beeinflussen können. Dazu gehören beispielsweise die Unkenntnis der zukünftigen hydraulischen und hydrologischen Situation im Modellraum (z. B. Entwicklung der Grundwasserentnahmen, der Maßnahmen an Fließgewässern, der landwirtschaftlichen Nutzung) oder die Auswirkungen des Klimawandels, der insbesondere bei regionalen und langfristigen Prognosemodellen von Relevanz ist.

10.2 Abschätzung von Unsicherheiten

Eine praxistaugliche Methode der Unsicherheitsanalyse stellt die Szenariomodellierung dar. Dabei werden mehrere (aber in der Regel weniger als zwanzig) Sets an plausiblen Parametern und Randbedingungen festgelegt und die Vorhersagen durch Ausführen des Modells berechnet. Z. B. können für die Vorhersage von Wasserständen in einem Grundwasserleiter unterschiedliche Kombinationen von Randbedingungen (in Trocken- und Feuchtperioden) mit mehreren plausiblen Entnahmeraten zu Sets kombiniert werden. Mit dieser Methode erhält man eine Gruppe an Werten, welche den plausiblen Rahmen für das Ergebnis beschreiben.

Eine spezielle Variante der Szenariomodellierung ist die Worst-case-Technik. Sie wird für Entscheidungen auf der sicheren Seite eingesetzt. Hier werden jene Parameterwerte ausgewählt, die für die jeweilige Fragestellung die ungünstigsten Ergebnisse liefern. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die ungünstigste Parameterkombination in der Realität nicht immer möglich ist bzw. bestimmte Randbedingungen nicht gleichzeitig auftreten können (Kinzelbach und Rausch 1995). Auch wenn eine konservative Schätzung erforderlich ist, sollten bei der Betrachtung des Worst-case-Szenarios nur realistische Annahmen getroffen werden.

Bei der Analyse sollte berücksichtigt werden, dass bei Aussagen über absolute Größen mehr Unsicherheit besteht als bei Aussagen über die Differenz zwischen zwei Modellergebnissen (z. B. Differenzen des Grundwasserspiegels). Eine Möglichkeit Unsicherheiten zu reduzieren, ist daher die Betrachtung relativer Entwicklungen, z. B. durch eine Variantenstudie unterschiedlicher Handlungsoptionen oder dem Vergleich einer Prognose mit einem Referenzszenario. In diesem Fall unterliegen alle Rechenläufe/Varianten den gleichen Limitierungen und der Einfluss der Unsicherheiten relativiert sich daher (LANUV 2010).

Das Ergebnis komplexerer Unsicherheitsanalysen (z. B. lineare Unsicherheitsanalyse, Monte-Carlo-Methode) ermöglicht die Angabe von statistischen Kenngrößen (z. B. Standardabweichung, Konfidenzintervall) in Bezug auf das Modellierungsergebnis.

11 DOKUMENTATION UND VISUALISIERUNG

Um den Entstehungsprozess eines Grundwassermodells nachvollziehen und auf Plausibilität prüfen zu können, ist eine entsprechende Dokumentation der Datengrundlagen bzw. Eingangsparameter sowie der einzelnen Arbeitsschritte vonnöten. Darüber hinaus ist es unabdingbar, allfällige Schwächen des Modells und damit verbundene Unsicherheiten in der Prognosefähigkeit bzw. der Sicherheit der Simulationsergebnisse klar aufzuzeigen.

Wesentliche Eckpunkte des hydrogeologischen Modells wie beispielsweise regionale Geologie, Landnutzung und Bodenarten, Untergrunderkundungen, Ganglinien von Messgrößen, wasserwirtschaftliche Versuche sowie Grundwassernutzungen sind darzulegen und mit den meteorologischen Rahmenbedingungen zu verknüpfen. Festgelegte Modellgrenzen und Randbedingungsansätze sind zu begründen.

Unter Nennung der verwendeten Software ist zu beschreiben, wie die Überführung der hydrogeologischen Modellvorstellungen in ein numerisches Grundwassermodell durchgeführt wurde. Dies betrifft insbesondere die Gründe für die gewählte zeitliche und räumliche Diskretisierung (sowohl für das Strömungs- als auch das Transportmodell), Anfangs- und Randbedingungen und Kalibrierungsparameter. Die Methodik und die Vorgehensweise bei der Kalibrierung sowie das gewählte Gütemaß sind darzulegen.

Die Qualität des Grundwassermodells ist anhand der Kalibrierungsergebnisse bzw. der -auswertung zu belegen. Auffälligkeiten (inkl. möglicher Begründung) wie abweichende Kalibrierungsergebnisse an Messstellen oder inaktiv gesetzte Modellbereiche sind explizit zu nennen.

Die dem Auftraggeber zu übergebenden Daten wie der technische Bericht samt Planbeilagen sowie die Modell- und Ergebnisdateien sind im Vorfeld der Beauftragung zu präzisieren und vertraglich festzulegen.

In der Regel wird der technische Bericht samt Planbeilagen analog (in vereinbarter Ausfertigungsanzahl) und digital (in gebräuchlichen Formaten wie *.docx, *.pdf oder *.jpg auf Datenträger) übergeben. Dies betrifft insbesondere die oben angeführte Dokumentation zur Grundwassermodellerstellung sowie die Darstellung der Geologie, der Bodenarten, der Durchlässigkeit der einzelnen Lockergesteinspakete und des Reliefs des Grundwasserstauers sowie die gewünschten Simulationen zu Grundwasserspiegellagen (z. B. Isolinien zu HGW, MGW, NGW), Grundwassermächtigkeit, Flurabstand, Temperatur- und Stoffkonzentrationsverteilung etc.

Digital können die Ergebnisdateien (in Formaten wie *.dwg, *.dxf oder als Shape-, Raster- oder XYZ-File) und der Datensatz des Grundwasserströmungs- und/oder -transportmodells, z. B. das lauffähige numerische Modell (in Formaten wie *.fem, *.dac, *.amd) übergeben werden. Ergänzende Dateien wie das digitale Höhenmodell, Abgrenzungen zu Einzugsgebieten, Grundwasserkörpern, Schutz- und Schongebieten sowie Darstellungen von Flussachsen, Querprofilen, Messstellen und Wasserrechten können ebenfalls zur Verfügung gestellt werden.

12 BEGRIFFSDEFINITIONEN

Advektion/advektiver Transport

Unter Advektion versteht man den Stofftransport mit der Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers.

Ansatzfunktion

Ansatzfunktionen dienen dazu, komplexe Phänomene in Modellen mathematisch zu vereinfachen und numerische Berechnungen (z. B. zur Vorhersage des Stofftransports im Grundwasser) durchführbar zu machen. Sie können basierend auf physikalischen Prinzipien, empirischen Beobachtungen oder theoretischen Überlegungen entwickelt werden.

Beobachtungsgrößen

Als Beobachtungsgrößen werden gemessene Zustandsgrößen (z. B. Grundwasserstand, Stoffkonzentration, Temperatur) bezeichnet.

Beobachtungswerte

Bei Beobachtungswerten handelt es sich um gemessene Werte einer Beobachtungsgröße.

Courant-Kriterium

Das Courant-Kriterium ist das Verhältnis zwischen der Schrittweite des advektiven Transports und der Netzweite. Bei einer expliziten zeitlichen Diskretisierung muss dieses Verhältnis immer < 1 sein, d. h., beim advektiven Transportschritt darf keine Zelle übersprungen werden. Die Nichteinhaltung dieses Kriteriums führt zur Instabilität der numerischen Berechnung.

Delaunay-Kriterium (Umkreisbedingung)

Mit dem Verfahren der Delaunay-Triangulierung werden Punkte so zu Dreiecken vernetzt, dass innerhalb des Kreises, auf dem die drei Dreieckspunkte liegen (Umkreis des Dreiecks), keine anderen Punkte enthalten sind.

Diskretisierung

Als Diskretisierung bezeichnet man die Aufteilung von kontinuierlicher Information in endlich viele (diskrete) Daten. Dabei werden in der Regel Raum und Zeit in endlich viele Teile zerlegt. Je nach Art der Gleichung werden unterschiedliche Diskretisierungsansätze gewählt, bei partiellen Differenzialgleichungen etwa Finite-Elemente- (FE), Finite-Differenzen- (FD) oder Finite-Volumen-Methoden (FV).

Dispersion

Unter Dispersion versteht man den Prozess der mechanischen Vermischung, der in porösen Medien als Folge der unterschiedlichen relativen Bewegung des Fluids durch die Poren entsteht. Die hydrodynamische Dispersion berücksichtigt zusätzlich den Einfluss der Diffusion, die in vielen Fällen allerdings vernachlässigt werden kann.

Dispersivität

Die Dispersivität ist ein geometrisches Maß für die Heterogenität des Grundwasserleiters, die den Prozess der Dispersion bestimmt.

Grundwasser

- Grundwasser ist unterirdisches Wasser, das die unterirdischen Hohlräume (Poren, Klüfte u. dgl.) zusammenhängend ausfüllt, unter gleichem oder größerem Druck steht, als er in der Atmosphäre herrscht und dessen Bewegung durch Schwerkraft und Reibungskräfte bestimmt wird.
- Ungespanntes (freies) Grundwasser: Als ungespanntes (freies) Grundwasser wird jenes Grundwasser bezeichnet, dessen Grundwasseroberfläche und Grundwasserdruckfläche identisch sind.
- Gespanntes Grundwasser: Als gespanntes Grundwasser wird jenes Grundwasser bezeichnet, dessen Grundwasserdruckfläche über der Grundwasseroberfläche liegt

- Artesisch gespanntes Grundwasser: Als artesisch gespanntes Grundwasser wird gespanntes Grundwasser bezeichnet, dessen Grundwasserdruckfläche über der Geländeoberfläche liegt.

Grundwasserkörper

Bei einem Grundwasserkörper handelt es sich um ein hydrologisch abgegrenztes Grundwasservolumen in einem oder mehreren Grundwasserleitern.

Grundwasserleiter (Aquifer)

Ein Grundwasserleiter ist ein gut durchlässiger Boden- oder Gesteinskörper, in dessen Hohlräumen Grundwasser fließen oder stehen kann (unabhängig von Nutzungen).

Hydraulische Leitfähigkeit

Die hydraulische Leitfähigkeit beschreibt die Durchlässigkeit des durchströmten Untergrunds (auch Durchlässigkeitsbeiwert, kf-Wert, genannt).

Kalibrierung

- Manuelle Kalibrierung: Bei der manuellen Kalibrierung handelt es sich um die Anpassung von Simulationsergebnissen an Werte von Zielgrößen (z. B. Grundwasserstand) durch manuelle Veränderung von Parameterwerten.
- Automatische Kalibrierung: Bei der automatischen Kalibrierung handelt es sich um die Anpassung von Simulationsergebnissen an Werte von Zielgrößen (z. B. Grundwasserstand) durch automatische Veränderung von Parameterwerten mithilfe von Optimierungsalgorithmen.
- Stationäre Kalibrierung: Bei der stationären Kalibrierung handelt es sich um die Anpassung von Simulationsergebnissen an zeitlich konstante Werte von Zielgrößen an einer bestimmten Lage (z. B. Stichtagsmessung bei mittleren Grundwasserspiegelverhältnissen) durch Veränderung von Parameterwerten.
- Instationäre Kalibrierung: Bei der instationären Kalibrierung handelt es sich um die Anpassung von Simulationsergebnissen an zeitlich variable Werte von Zielgrößen (z. B. Ganglinie des Grundwasserspiegels) durch Veränderung von Parameterwerten.

Kalibrierungsparameter

Unter Kalibrierungsparameter versteht man jene Modellparameter, welche im Zuge der Modellkalibrierung optimiert werden (z. B. hydraulische Leitfähigkeit, Leakage-Koeffizient).

Konduktion

Bei der Konduktion oder Wärmeleitung wird kinetische Energie zwischen benachbarten Atomen oder Molekülen ohne Materialtransport übertragen. Diese Art der Wärmeübertragung ist ein irreversibler Prozess und transportiert die Wärme im statistischen Mittel vom höheren Energieniveau (mit höherer Temperatur) auf das niedrigere Niveau (mit niedrigerer Temperatur).

Konvektion

Bei der Konvektion oder Wärmeströmung wird Wärme von einem strömenden Fluid als innere Energie oder Enthalpie mitgeführt.

Konservative Stoffe

Konservative (nicht-reaktive) Stoffe unterliegen keinen physikalischen, chemischen oder biologischen Veränderungen.

Péclet-Zahl

Die Péclet-Zahl beschreibt bei Stofftransportmodellen das Verhältnis des Advektionsanteils zum Dispersionsanteil in Bezug auf eine charakteristische Länge. Eine optimale räumliche Diskretisierung ergibt sich bei einer Péclet-Zahl ≤ 2 .

Porosität/Hohlraumanteil

Die Porosität bzw. der Hohlraumanteil wird als Quotient aus dem Volumen aller Hohlräume eines Boden- oder Gesteinskörpers und dessen Gesamtvolumen angegeben. Der Hohlraumanteil in Böden oder Lockergesteinen wird als Porenanteil bezeichnet.

Porosität/Hohlraumanteil (effektiv/durchflusswirksam)

Bei der effektiven/durchflusswirksamen Porosität bzw. dem effektiven/durchflusswirksamen Hohlraumanteil handelt es sich um jenen Hohlraumanteil, bei dem nur die vom Grundwasser durchfließbaren Hohlräume berücksichtigt sind.

Potenziallinie; Äquipotenziallinie

Linie, die die Punkte gleichen Potentials verbindet. In einem Grundwasserleiter schneiden sich Potenzial- und Stromlinien im rechten Winkel. Punkte einer Potenziallinie haben die gleiche Standrohrspiegelhöhe.

Reaktion

Umwandlung chemischer Elemente oder Verbindungen in andere Verbindungen oder Elemente mit neuer Zusammensetzung und anderen Eigenschaften.

Reaktive Stoffe

Reaktive (nicht-konservative) Stoffe unterliegen physikalischen, chemischen oder biologischen Veränderungen. Zu den reaktiven Stofftransportprozessen gehören Sorption, mikrobieller Abbau, radioaktiver Zerfall oder geochemische Reaktionen.

Sorption

Als Sorption werden Vorgänge bezeichnet, die die An- oder Einlagerung von Stoffen aus der flüssigen Phase an oder in die Matrix eines Grundwasserleiters beschreiben.

Speicherkoeffizient

Der Speicherkoeffizient ist das Produkt des spezifischen Speicherkoeffizienten mit der Grundwassermächtigkeit. Er ist dimensionslos und wird pro Meter wassererfüllter Mächtigkeit angegeben. Im freien Grundwasser entspricht der Speicherkoeffizient der speichernutzbaren Porosität.

Spezifischer Speicherkoeffizient

Der spezifische Speicherkoeffizient wird als Änderung des gespeicherten Wasservolumens je Volumseinheit des Grundwasserleiters bei einer Änderung der Druckhöhe um einen Meter definiert. Im gespannten Grundwasser ist der spezifische Speicherkoeffizient von der Kompressibilität des Korngerüsts und des Fluids abhängig und somit um mehrere Größenordnungen geringer als im freien Grundwasser.

Stromlinie; Grundwasserstromlinie

Stromlinien stehen immer senkrecht auf die Äquipotenzialflächen eines Grundwasserleiters bzw. verlaufen immer senkrecht zu den Äquipotenziallinien (Grundwassergleichen). Sie bilden somit den Fließweg des Grundwassers ab.

Stützstellen

Als Stützstellen werden an bestimmten Standorten gemessene oder angenommene Parameterwerte (z. B. Durchlässigkeitsbeiwerte) bezeichnet, auf denen die räumliche Interpolation basiert. Diese Parameterwerte können im Zuge der Modellkalibrierung optimiert werden.

Zielgrößen

Zielgrößen sind beobachtete oder hydrogeologisch abgeschätzte Zustandsgrößen (z. B. Grundwasserstand, Stoffkonzentration, Temperatur etc.), die bei der Modellkalibrierung berücksichtigt werden.

13 QUELLENVERZEICHNIS

- ANDERSON, M. P., WOESSNER, W. W. & HUNT, R. J. (2015): Applied Groundwater Monitoring - Simulation of Flow and Advective Transport, Second Edition; Elsevier, Amsterdam
- BARNETT, B., TOWNLEY, L. R., POST, V., EVANS, R. E., HUNT, R. J., PEETERS, L., RICHARDSON, S., WERNER, A. D., KNAPTON, A. & BORONKAY, A. (2012): Australian groundwater modelling guidelines; Waterlines report, National Water Commission, Canberra
- BEAR, J., BELJIN, M. S. & ROSS, R. R. (1993): Fundamentals of Ground-Water Modeling; U.S. Environmental Protection Agency – Ground Water Issue, Washington
- BEAR, J. & CHENG, A. H. D. (2010): Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport; Springer Dordrecht
- BEVEN, K. & YOUNG, P. (2013): A guide to good practice in modeling semantics for authors and referees. Water Resources Research 49 (8), <http://dx.doi.org/10.1002/wrcr.20393>
- BfR – Bundesamt für Risikobewertung (2014): Leitfaden zur Unsicherheitsanalyse in der Expositionsschätzung; BfR-Wissenschaft 03/2014, Berlin
- BLACK, D., WALLBRINK, P., JORDAN, P., WATERS, D., CARROLL, C., BLACKMORE, J. (2011): Guidelines for water management modelling - Towards best-practice model application; eWater Cooperative Research Centre, Bruce
- BLAU, R. V., MUCHENBERGER, F., TRÜEB, E., WERNER, A. & WÜRSTEN, M. (1993): Quantitative Erkundung von Lockergesteins-Grundwasserleitern am Beispiel Emmental; Handbuch, Schweizerischer Verein des Gas- und Wasserfaches (SVGW), Bern
- BÖRKE, P., SCHOLTKA, M. & STOEPKER, K. (2000): Qualitätssicherung bei der Simulation von Strömungs- und Schadstofftransportprozessen in der Altlastenbehandlung; Wasser und Abfall, Fachzeitschrift des Bundes der Ingenieure für Wasserwirtschaft, Abfallwirtschaft und Kulturbau e. V. (BWK) 10/2000, Springer Verlag
- BUNDSCHUH, J. & ARRIAGA, M. C. S. (2010): Introduction to the Numerical Modeling of Groundwater and Geothermal Systems; Multiphysics Modeling, Volume 2, Taylor & Francis Group, Boca Raton
- BUNDSCHUH, J. & ZILBERBRAND, M. (2012): Modeling of Groundwater, Vadose and Geothermal Systems; Multiphysics Modeling, Volume 5, Taylor & Francis Group, Boca Raton
- DVGW - Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e. V. (2016): Aufbau und Anwendung numerischer Grundwassermodelle in Wassergewinnungsgebieten; Technische Regel W 107 (A) – Arbeitsblatt, Bonn
- ATV-DVWK-M 504 – Verdunstung in Bezug zu Landnutzung, Bewuchs und Boden – September 2002 und das DVWK-Merkblatt 238/1996
- DWA-M 504-1 - Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen - Teil 1: Grundlagen, experimentelle Bestimmung der Landverdunstung, Gewässerverdunstung - Juli 2018
- Entwurf DWA-M 504-2 - Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen - Teil 2: Berechnungsverfahren der Landverdunstung - [Entwurf April 2023](#)
- ENEMARK, T., PEETERS, L. J. M., MALLANTS, D. & BATELAAN, O. (2019). Hydrogeological conceptual model building and testing: A review; Journal of Hydrology, Volume 569, Elsevier, Amsterdam
- EFSA – European Food Safety Authority (2018): Guidance on Uncertainty Analysis in Scientific Assessments; EFSA Journal, Volume 16, Issue 1, January 2018
- FH-DGG - Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Geologischen Gesellschaft (2002): Hydrogeologische Modelle - Ein Leitfaden mit Fallbeispielen; Hydrogeologische Beiträge der Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Geologischen Gesellschaft, Heft 24, Hannover
- FH-DGG - Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Geologischen Gesellschaft (seit 2014): KalPro GW-Modelle, Arbeitskreis Kalibration und Prognosefähigkeit von GW-Modellen

- FÜRST, J. (1996): Grundwassermodellierung in und mit GIS; Proceedings-Reihe der Informatik, 9, Klagenfurt
- GELHAR, L. W., WELTY, C. & REHFELDT, K. R. (1992): A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers; *Water Resources Research* 28 (7)
- GOLDSCHIEDER, N., & DREW, D. (Eds.) (2014): *Methods in Karst Hydrogeology*; IAH: International Contributions to Hydrogeology, 26, Crc Press
- HAITJEMA, H. M. (2015): *The Cost of Modeling*; *Groundwater*, Volume 53, Issue 2, National Ground Water Association, Westerville
- HEALY, R. W. und SCANLON, B. R. (2010). *Estimating groundwater recharge*; Cambridge University Press, Cambridge.
- HILLINGER, R. (2020): Anforderungen zur Prüftätigkeit numerischer Berechnungen; SACHVERSTÄNDIGE, Heft 1/2020, Linde
- HOLZBECHER, E. (1996): *Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie*; Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York
- HÖLTING, B. & COLDEWEY, W. (2013): *Hydrogeologie – Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie*; 8. Auflage; Springer-Verlag Berlin Heidelberg
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995): *Grundwassermodellierung – Eine Einführung mit Übungen*; Gebrüder Borntraeger, Berlin - Stuttgart
- KÖNIG, L. F. & WEISS, J. L. (ed.): *Groundwater: Modeling, Management and Contamination*; Nova Science Publishers, New York
- KONIKOW, L. F. & BREDEHOEFT, J. D. (1992): *Ground-water models cannot be validated*; *Advances in Water Resources* 15, Elsevier
- KRESIC, N. (2007): *Hydrogeology and Groundwater Modeling, Second Edition*; CRC Press, Boca Raton
- KUMAR, C. P. (2003): *Basic guidelines for groundwater modelling studies*; *ISH Journal of Hydraulic Engineering* Volume 9, 2003 - Issue 2, The Indian Society of Hydraulics, Pune
- KUMAR, C. P. (2012): *Groundwater Modelling Software – Capabilities and Limitations*; *Journal of Environmental Science (IOSR-JESTFT), Toxicology and Food Technology*, Volume 1, Issue 2 (Sep-Oct. 2012), International Organization of Scientific Research, Gurugram
- KUMAR, C. P. (2019): *An Overview of Commonly Used Groundwater Modelling Software*; *International Journal of Advanced Research in Science, Engineering and Technology*, Vol. 6, Issue 1, January 2019
- LANDESAMT FÜR NATUR, UMWELT UND VERBRAUCHERSCHUTZ NORDRHEIN-WESTFALEN – LANUV (2010): *Hinweise zur Erstellung und Beurteilung von Grundwassermodellen im Altlastenbereich*, LANUV Arbeitsblatt 12, Recklinghausen
- MERKEL, B. J. & PLANER-FRIEDRICH, B. (2002): *Praxisorientierter Leitfaden zur numerischen Modellierung von Beschaffenheit, Kontamination und Sanierung aquatischer Systeme*; Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg
- MIDDLEMIS, H. & PEETERS, L. J. M. (2018): *Uncertainty analysis – Guidance for groundwater modelling within a risk management framework*; *Information Guidelines - explanatory note*, Independent Expert Scientific Committee on Coal Seam Gas and Large Coal Mining Development through the Department of the Environment and Energy, Commonwealth of Australia, Canberra
- ÖWAV (2009): *Thermische Nutzung des Grundwassers und des Untergrunds – Heizen und Kühlen*; ÖWAV-Regelblatt 207, Wien
- ÖWAV (2019): *Niederschlag-Abfluss-Modellierung*, ÖWAV-Regelblatt 220, Wien
- RASSAM, D. W., JOLLY, I. & PICKETT, T. (2012): *Guidlines for modelling groundwater-surface water interactions in eWater Source – Towards best-practice model application*; eWater Cooperative Research Centre, Bruce

- RIEGGER, J. (2019): Praxisbezogene Bewertung der Güte und Prognosefähigkeit von Grundwasser-Modellen; Arbeitskreis "Kalibration und Prognosefähigkeit von Grundwasser-Modellen" der FH-DGGV, Hannover
- RUF, W., PERONA, P., MOLNAR, P. & BURLANDO, P. (2006): Kopplung eines hydrodynamischen Strömungsmodells und eines Grundwassermodells. In: Technische Universität Dresden, Institut für Wasserbau und technische Hydromechanik (Hg.): Strömungssimulation im Wasserbau (Flow Simulation in Hydraulic Engineering). Dresdner Wasserbauliche Mitteilungen 32. Dresden: Technische Universität Dresden, Institut für Wasserbau und technische Hydromechanik
- SAUTER, M., KOVÁS, A., GEYER, T., TEUTSCH, G. (2006): Modellierung der Hydraulik von Karstgrundwasserleitern – Eine Übersicht; Grundwasser – Zeitschrift der Fachsektion Hydrogeologie, Heft 3
- SCHWARTZ, F. W., LIU, G., AGGARWAL, P. & SCHWARTZ, C. M. (2017): Naïve Simplicity: The Overlooked Piece of the Complexity-Simplicity Paradigm, Groundwater, Volume 55, Issue 5, National Ground Water Association, Westerville
- SDGG - Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften (1999): Hydrogeologische Modelle - Ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros und Fachbehörden in der Grundwasserwirtschaft, Schriftenreihe der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften, Heft 10, Hannover
- SDGG - Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften (2010): Hydrogeologische Modelle: Bedeutung des Hydrogeologischen a priori – Wissens; Schriftenreihe der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften, Heft 70, Stuttgart
- SVGW - Fachverband für Wasser, Gas und Wärme (2022): AQUA & GAS Nr. 7+8; Verlag des SVGW, Zürich
- THEIS, H. J. (2005): Quantifizierung der Prognoseunsicherheiten bei der praktischen Anwendung numerischer Grundwassermodelle; unveröffentlichte Dissertation, Universität Kaiserslautern

zur Stellungnahme