

Thema der Dissertation

Entwicklung und Anwendung eines Softwaresystems zur Simulation des Wasserhaushalts und Stofftransports in variabel gesättigten Böden

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Blankenburg, René

geboren am: 13.06.1977 in: Sömmerda

Gutachter:

Herr Prof. Dr. habil. Rudolf Liedl

Technische Universität Dresden

Herr Prof. Dr.-Ing. habil. Peter-Wolfgang Gräber

Technische Universität Dresden

Herr Univ. Doz. Dr. Johann Fank

JR-AquaConSol GmbH, Graz

Dresden, 17.09.2019

Danksagung

Bedanken möchte ich mich vor allem bei Herrn Prof. Gräber für seine Unterstützung, wertvollen Hinweise, Motivation und Geduld beim Entstehen dieser Arbeit.

Robert Pinzinger danke ich für das Lektorat der Arbeit sowie seinem Blick für mathematische Details.

Meiner Familie danke ich für ihr Verständnis und ebenfalls ihre Unterstützung, ohne die diese Arbeit nicht fertig gestellt werden konnte.

Gewidmet meinen Eltern und Moritz!

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	II
Tabellenverzeichnis	V
Abkürzungsverzeichnis	VI
Symbolverzeichnis	VII
1 Einleitung.....	1
2 Wasserhaushaltsberechnung in variabel gesättigten porösen Medien	4
2.1 Zugrundeliegende Gleichung	4
2.2 Numerische Lösung	7
3 Transport- und Umsetzungsprozesse	13
3.1 Erhaltungsgleichung	13
3.2 Transportprozesse	14
3.3 Umsetzungsprozesse	17
3.4 Basisgleichung für den Stofftransport in PCSiWaPro	22
3.5 Numerische Lösung	23
4 Entwicklung des Programms PCSiWaPro	26
4.1 Softwarearchitektur	26
4.2 Datenbankkonzept	27
4.3 Benutzeroberfläche für das Preprocessing	32
4.4 Ergebnisvisualisierung und Postprocessing	40
4.5 Parallelisierung des Rechenkerns	45
4.6 Dual-Porosität nach DURNER	51
4.7 Strömungsrandbedingung als zeitvariable Polygonfunktion	54
4.8 Berücksichtigung von Unsicherheiten in den Eingangsdaten	55
5 Anwendungsbeispiele	71
5.1 Deichdurchströmung	71
5.2 Modellgestützte Sickerwasserprognose mit unscharfen Eingangsdaten	78
5.3 Test der Parallelisierung am synthetischen Beispiel	80
5.4 Zusammenfassung Anwendungsbeispiele	84
6 Zusammenfassung und Ausblick	86
7 Literaturverzeichnis	90
8 Anhang	100

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Saugspannungs-Sättigungs-Kurve entsprechend Gleichung (2), beispielhaft für einen Sand, aus (Kemmesies, 1995).	6
Abbildung 2: Grafische Darstellung für einen beispielhaften Verlauf der Isothermen.....	20
Abbildung 3: Softwaredesign zur Datenbankverwaltung (Projektdatenbank). In dem Punkt „Materialparameter“ sind bodenhydraulische und stoffabhängige Parameter zusammengefasst.	29
Abbildung 4: Datenbankschema mit den Relationen der Tabellen in der Projektdatenbank (Auszug).....	30
Abbildung 5: Datenbankschema mit den Tabellen und Beziehungen der Systemdatenbank	31
Abbildung 6: Schema der Ausgabedatenbank	32
Abbildung 7: Datenhierarchie und Gruppierung	34
Abbildung 8: Dialogfenster zur Definition der Modelloptionen	35
Abbildung 9: Definition der hydraulischen Parameter.....	36
Abbildung 10: Protokoll der Eingabe- und Ergebnisdaten eines Modells.....	40
Abbildung 11: Darstellung der Online-Grafik für ein Strömungsmodell anhand der Druckhöhenverteilung in einem Dammkörper. Die weiße, runde Fläche am rechten Rand des Damms repräsentiert den Querschnitt einer Drainage zur Abführung überschüssigen Wassers. Siehe auch Abschnitt 5.1.....	42
Abbildung 12: Darstellung der Online-Grafik mit Strömungs- und Stofftransport (oberer Bereich, verzerrt) sowie Anzeige der Durchbruchskurve (unterer Bereich) ...	43
Abbildung 13: Anzeige des internen Viewers mit Beispielmodell. Dargestellter Sachverhalt analog zu Abbildung 11.....	44
Abbildung 14: Darstellung der Druckhöhenverteilung in einem Erddamm. Sachverhalt analog Abbildung 11.	45
Abbildung 15: Vergrößerte Darstellung aus Abbildung 14, zusätzlich ist jedoch die Geschwindigkeit an den Knoten der Finiten Elemente als Vektorkomponente eingeblendet	45
Abbildung 16: Erreichbarer Speedup nach AMDAHL für 2-16 CPUs.....	46
Abbildung 17: Fork-Join-Prinzip der Parallelisierung mit OpenMP, aus (Meyer, Martin; Sallwey, Jana; Blankenburg, René; Gräber, Peter-Wolfgang, 2012).....	48

Abbildung 18: Schema eines durch Gebietszerlegung aufgeteilten Modellgebiets mit farblicher Zuordnung zu den einzelnen Prozessen. Intern werden die direkten Nachbarknoten an den Rändern ebenfalls einbezogen.	49
Abbildung 19: Gegenüberstellung gefitteter Kurven der Retentionsfunktion nach DURNER und VAN GENUCHTEN, inkl. Messwerte. Die Saugspannung (Abszisse) ist logarithmisch eingeteilt. Messwerte aus (van Genuchten, 1980) für Beit-Netofa-Ton.....	52
Abbildung 20: Vergleich gefitteter Kurven der relativen Permeabilität nach DURNER und VAN GENUCHTEN, inkl. Messwerte. Messwerte aus (van Genuchten, 1980) für Beit-Netofa-Ton. Abszisse in logarithmischer Teilung.	52
Abbildung 21: Schematische Darstellung der Zielstellung des Vorhabens (Blankenburg, et al., 2010).....	57
Abbildung 22: Dreiecksförmige Zugehörigkeitsfunktion für die ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit	59
Abbildung 23: Beispiel einer trapezförmigen Zugehörigkeitsfunktion für die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit.....	60
Abbildung 24: Berechnete Grenzen für die Druckhöhe	62
Abbildung 25: Zugehörigkeitsfunktion für K_s mit alpha-Schnitten.....	63
Abbildung 26: Berechnete Grenzen für die Druckhöhe mit unterschiedlichen Zugehörigkeitswerten.....	65
Abbildung 27: Ablauf des Steuerprogramms zur Berechnung der Schwankungsbreiten mit Hilfe von NLPQLP	68
Abbildung 28: Aufbau des physikalischen Experiments, aus (Aigner, 2004). Zu Größenangaben siehe Abschnitt 5.1.2.....	72
Abbildung 29: Quantisierter Modelldeich, Abbildung ist verzerrt.....	73
Abbildung 30: Hydraulische Eigenschaften des Modelldeichs, dargestellt anhand der Retentionsfunktion (links) sowie der relativen Permeabilität (rechts).....	74
Abbildung 31: Volumenströme über die Randbedingungen. Zu erkennen ist der quasistationäre Zustand nach ca. 60 Minuten.....	76
Abbildung 32: Verteilung des Wassergehalts nach 10 Minuten Einstau. Blaue Bereiche repräsentieren eine hohe Wassersättigung. Die Wirkung der Dichtwand ist deutlich erkennbar.	76
Abbildung 33: Verteilung des Wassergehalts nach 60 Minuten bei maximalem Einstau. Die Sickerlinie erreicht nahezu die luftseitige Böschung.	77

Abbildung 34: Durchbruchkurven als Ergebnis der Sickerwasserprognose	80
Abbildung 35: hydraulische Eigenschaften des im Beispiel verwendeten Bodens, dargestellt anhand der Retentionsfunktion (links) und der relativen Permeabilität (rechts).....	82
Abbildung 36: Lage und Art der Randbedingungen im Testmodell (links) sowie die Verteilung der Druckhöhe nach 2 Tagen Simulationszeit (rechts)	83
Abbildung 37: Darstellung der absoluten Simulationszeit (links) sowie des erreichten Speed Up (rechts) in Abhängigkeit von der Anzahl verwendeter CPU-Kerne	84
Abbildung 38: Dialogfeld zur Beschreibung der Standort- oder Projektinformationen.....	111
Abbildung 39: Dialogfeld zur Definition der Speicherzeitpunkte	112
Abbildung 40: Dialogfeld zur Steuerung der numerischen Lösung	113
Abbildung 41: Dialogfeld Materialparameter zur Definition der Stofftransportparameter..	114
Abbildung 42: Dialogfeld Materialparameter zur Definition der Parameter für den Pflanzenwurzelterm	115

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Verfügbare Isothermen und Parameterangaben.....	19
Tabelle 2: Parameterwerte zur Berechnung der Funktionsgraphen aus Abbildung 2	20
Tabelle 3: Übersicht der möglichen Schemata zur Lösung von Gleichung (55).....	25
Tabelle 4: Durch RETC berechnete Bodenparameter sowie deren Konfidenzintervalle für Dual-Porosität-Modell nach DURNER.....	53
Tabelle 5: Die mit RETC berechneten Bodenparameter sowie deren Konfidenzintervalle für das VAN GENUCHTEN-Modell	53
Tabelle 6: Gegenüberstellung von klassischer Betrachtungsweise und Fuzzy-Systeme, nach (Pühl, 2000)	58
Tabelle 7: Eingabedaten für Berechnungsbeispiel	62
Tabelle 8: Rückgabewerte des Optimierers NLPQLP.....	67
Tabelle 9: Bodenparameter des Modelldeichs	73
Tabelle 10: Randbedingungen und deren Bedeutung für die Deichsimulation	75
Tabelle 11: Zusammenfassung der berücksichtigten Unsicherheiten in den Modellparametern.....	79
Tabelle 12: Charakterisierung der Modelle des synthetischen Beispiels	81
Tabelle 13: hydraulische Parameter des im Beispiel verwendeten Bodens.....	81

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
SQL	„Structured Query Language“: standardisierte Abfragesprache für relationale Datenbanksysteme
PCG	Preconditioned conjugated gradients; iteratives Verfahren zur Lösung von Gleichungssystemen
LU	Lower-Upper decomposition; Zerlegung der aus der Quantisierung entstehenden Koeffizientenmatrix in obere bzw. untere Dreiecksmatrix zur Lösung eines Gleichungssystems
CRS	Compressed Row storage; Format zur optimierten Speicherung der Koeffizientenmatrix
GUI	Graphical User Interface; grafische Benutzeroberfläche
.NET	Klassenbibliothek und Laufzeitumgebung der Firma Microsoft
DWD	Deutscher Wetterdienst
MVVM	Model-View-ViewModel; Entwicklungsmodell für Software
MVP	Model-View-Presenter; Entwicklungsmodell für Software
LINQ	Language Integrated Query; Datenabfragemodell im Quelltext
JET	Datenbanktreiber für Windows-Systeme
DIN	Deutsches Institut für Normung; Deutsche Industrienorm
GMSH	Open-Source Netzgenerator und Visualisierungswerkzeug (Pre- und Postprocessing)
RB	Randbedingung
RB-Art	Randbedingungsart
GPU	Graphics Processing Unit; Grafikprozessor
GPGPU	General Purpose Graphics Processing Unit; Verwendung des Grafikprozessors für allgemeine, nicht grafikbezogene Berechnungen
OpenMP	Open Multi Processing; Parallelisierungsstandard für Multicore-Prozessoren mit Shared-Memory
MPI	Message Passing Interface; Parallelisierung für Distributed-Memory-Systeme
OpenGL	Open Graphics Language; Programmierstandard zur Verwendung von GPUs für grafische Darstellungen
vGM	VAN-GENUCHTEN-Model
vGP	VAN-GENUCHTEN-Parameter
RETC	Software zur Ermittlung der Retentionsfunktion (retention curve)
NLPQLP	Sequential quadratic programming algorithm with non-monotone line search
GOK	Geländeoberkante
BBodSchG	Bundesbodenschutzgesetz
BBodSchV	Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung
BMBF	Bundesministerium für Bildung und Forschung
L	Dimension Länge
M	Dimension Masse
T	Dimension Zeit
SRB	Strömungsrandbedingung
FEM	Finite-Elemente-Methode
PDC	Primary Drainage Curve
MWC	Main Wetting Curve

MDC	Main Drainage Curve
SDC	Scanning Drainage Curve
SWC	Scanning Wetting Curve

Symbolverzeichnis

Symbol	Dimension	Erläuterung/ Beschreibung
Δt	T	Zeitinkrement bzw. zeitlicher Abstand
t	T	Zeitpunkt oder Zeit
β	-	Term in der allgemeinen Sorptionsisothermengleichung
η	M/L ³	Maximalbeladung in der allgemeinen Sorptionsisothermengleichung
θ	L ³ /L ³	Volumetrischer Wassergehalt
F_{adv}	M/L ² /T	Advektiver Massenfluss im Boden
F_{diff}	M/L ² /T	Diffusiver Massenfluss im Boden
F_{disp}	M/L ² /T	Dispersiver Massenfluss
F_s	M/L ² /T	Durch Transportprozesse indizierter Massenfluss
s	M/M	Konzentration des an der festen Phase sorbierten Stoffs
c	M/L ³	Konzentration des im Wasser gelösten Stoffs
c_t	M/L ³	Gesamtkonzentration eines Stoffes in flüssiger und fester Phase
$T_{1/2}$	T	Halbwertszeit eines Stoffes
γ_w	M/L ³ /T	Transformations- und Abbaukonstante für Prozesse nullter Ordnung in flüssiger Phase
γ_s	1/T	Transformations- und Abbaukonstante für Prozesse nullter Ordnung in fester Phase
μ_w, μ_s	1/T	Transformations- und Abbaukonstanten für Prozesse erster Ordnung in flüssiger und fester Phase
K_d	L ³ /M	Linearer Verteilungskoeffizient für Isotherme
K_f	L ^{3β} /M ^{β}	Verteilungskoeffizient der FREUNDLICH-Isotherme
K_l	L ³ /M	Verteilungskoeffizient der LANGMUIR-Isotherme
K_s	L/T	Gesättigte hydraulische Leitfähigkeit
s_{max}	M/M	Parameter für Maximalbeladung der LANGMUIR-Isotherme
α	1/L	VAN-GENUCHTEN-Parameter; Skalierungsfaktor für die Saugspannungs-Sättigungskurve (2)
n	-	VAN-GENUCHTEN-Parameter; Anstiegsfaktor für die Saugspannungs-Sättigungskurve (2)
m	-	VAN-GENUCHTEN-Parameter, im Standardmodell berechnet aus $m = 1 - 1/n$
λ	-	MUALEM-Parameter zur Charakterisierung der Porenkonnektivität in Gleichung (3)
A	-	Funktion des hydraulischen Restwassergehalts in Gleichung (2)
A_e	L ²	Fläche des Finiten Elements e
B	-	Funktion des Restluftgehalts in Gleichung (2)
θ_r	L ³ /L ³	Residualer Wassergehalt eines Bodens
θ_s	L ³ /L ³	Gesättigter Wassergehalt eines Bodens
θ_b	L ³ /L ³	Volumetrischer Wassergehalt der benetzenden Phase
θ_0	L ³ /L ³	Wassergehalt zum Messzeitpunkt

Φ	-	Porosität eines Bodens
h	L	Druckhöhe
h_c	L	Kapillardruckhöhe
$k(\theta)$	L/T	Ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit
$K_r(\theta)$	-	Relative ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit
K^A	-	Anisotropietensor der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit
K_0	L/T	Hydraulische Leitfähigkeit korrespondierend zu θ_0
δ_{nm}	-	Kronecker-Delta
Γ_e	-	Rand des Finiten Elements e
Ω_e	-	Der durch das Finite Element e belegte Bereich
v_a	L/T	Abstandsgeschwindigkeit
q	L/T	Darcy-Geschwindigkeit
D_w	L ² /T	Diffusionskoeffizient in freiem Wasser
τ	-	Tortuositätsfaktor
D_d	L ² /T	Dispersionskoeffizient
D_e	L ² /T	Effektiver Dispersionskoeffizient
α_l	L	Longitudinale Dispersivität
R	-	Retardationsfaktor
w_2	-	Anteil der 2. Teilporosität am Gesamtporenraum
α_2	1/L	VAN-GENUCHTEN-Parameter α für 2. Teilporosität
n_2	-	VAN-GENUCHTEN-Parameter n für 2. Teilporosität

1 Einleitung

Die Bodenzone, in der Literatur vielfach auch Wurzelzone, Aerationzone oder ungesättigte Zone genannt, ist geprägt durch variabel-wassergesättigte Verhältnisse und nimmt in vielen Disziplinen eine wichtige Rolle ein. Aus Sicht des Schutzguts Grundwasser stellt sie eine Schutz- und Pufferzone vor oberirdischen Umwelteinflüssen dar, in der eindringende oder eingebrachte Schadstoffe durch die dort ablaufenden Transport-, Abbau- und Sorptionsprozesse retardiert, teilweise bis vollständig abgebaut oder in andere Stoffe umgesetzt werden können, und somit eine Verunreinigung des Grundwassers verhindern kann. Um potenzielle Gefährdungen des Grundwassers anhand einer Altlast oder eines Schadensfalls abschätzen zu können, ist in Deutschland eine Sickerwasserprognose nach dem Bundesbodenschutzgesetz und der Bundesbodenschutzverordnung vorgeschrieben. Hierbei übernimmt die ungesättigte Zone die Funktion des Quell- und Transportterms für den Schadstoff. Der Quellterm dient der Beschreibung des zeitlichen Austragsverhaltens von Schadstoffen aus der Schadstoffquelle mit dem Sickerwasser, der Transportterm beschreibt den Wirkungspfad im Boden von der Geländeoberkante bis zur Grundwasseroberfläche (Gräber, et al., 2007).

In der Landwirtschaft erfüllt die ungesättigte Zone die Rolle als Wasserspeicher und Nährstoffgeber für die dort wachsenden Pflanzen bzw. deren Wurzeln. Wichtig ist unter anderem eine optimale Versorgung mit Wasser, wofür unter anderem auch Bewässerungssysteme installiert werden. Insbesondere in Gebieten mit hoher Evaporation kommt beispielsweise unterirdische Tröpfchenbewässerungstechnik zum Einsatz, um mit sehr geringen Feuchteverlusten eine ausreichende Versorgung der Pflanzenwurzeln zu erreichen (Helm, 2008).

Ergänzend dazu steht die Regulierungsfunktion im Falle von Starkniederschlagsereignissen, wo die kurzfristig verfügbare Speicherkapazität wichtig ist für eine schnelle Infiltration der Niederschlagsmengen. Sickerbecken, wie sie häufig in Autobahnnähe gebaut werden, sind ein weiteres Beispiel, in denen die ungesättigte Zone für eine gezielte Versickerung überschüssigen Niederschlagswassers verwendet wird. Positive Effekte sind unter anderem die Reinigung des Sickerwassers sowie eine lokale Anreicherung des Grundwassers. Die Reinigungsleistung des Bodens und der darin verfügbaren Biodiversität werden auch beim Betrieb von Pflanzenkläranlagen genutzt, um Abwasser zu behandeln (Langergraber, et al., 2012).

Bei der geotechnischen Standsicherheitsbetrachtung im Zuge der Sanierung von Kippenböschungen ehemaliger Tagebaue wird bislang die Lage der freien Grundwasseroberfläche (Sickerlinie) herangezogen. Auch für die Rutschungssicherheit von Erddämmen und Deichen bildet bislang ausschließlich die wassergesättigte Zone Grundlage weiterführender bodenmechanischer Auswertungen. Sättigungsgrade im teilgesättigten Bereich außerhalb der Sickerlinie oder des gesättigten Bereichs oder die Aufweitung des Kapillarsaums bei bindigen Bodenschichten kommen nicht in Betracht. In (Aigner, 2004) wurde anhand eines physikalischen Experiments an einem Modelldamm nachgewiesen, dass bereits bei hoher Teilsättigung ein Dammversagen auftreten kann. Verschiedene Bau- und Sanierungsmaßnahmen werden unmittelbar im Bodenbereich ausgeführt und haben einen direkten Einfluss auf das Verhalten im Lastfall (Haselsteiner, et al., 2002) und (Guo, 2015). Damit erfüllt die ungesättigte Bodenzone in der Geotechnik und Bodenmechanik eine wichtige Funktion bei Standsicherheitsbetrachtungen.

Die speziellen hydraulischen Eigenschaften ungesättigter Böden werden beim Einsatz in Deponieoberflächenabdichtungen sowie zur Abdeckung von Halden und Altablagerungen gezielt ausgenutzt, um durch den Effekt der Kapillarsperre eindringendes Sickerwasser durch natürliches Gefälle innerhalb der Abdeckung abzuleiten und damit ein Herauslösen von Schadstoffen zu verhindern (Barth, 2003). Durch physikalische Experimente in Form von Kipprinnenversuchen können unter Laborbedingungen verschiedene Sickerwasserraten, Materialeigenschaften oder auch die Neigung getestet und eine optimale Bemessung der Abdichtung oder Abdeckung erzielt werden (Mattersteig, 2006).

Die Anforderungen und Aufgaben des vom BMBF geförderten Forschungsvorhabens „Prognose des Schadstoffeintrags in das Grundwasser mit dem Sickerwasser“ (SiWaP) motivierten die Entwicklung des Programms PCSiWaPro. Innerhalb des Vorhabens sollte die Möglichkeit geschaffen werden, mit geringem Aufwand eine modellgestützte Sickerwasserprognose unter Berücksichtigung der Forschungsergebnisse aus SiWaP durchführen zu können. Kommerziell verfügbare Software blieb dabei außen vor, da die Implementierung eigener Prozesse, Datenbanken und Parameter damit nicht möglich ist. Gleichzeitig war eine komplexe Betrachtung der ablaufenden Prozesse erforderlich sowie die Dokumentation der Ein- und Ausgabedaten für eine entsprechende Nachweispflicht. Dies führte zur Entwicklung einer grafischen Benutzeroberfläche (GUI) mit einem Assistenten, der den Anwender in 5 sequenziell ablaufenden Schritten zu einem physikalisch begründeten Ergebnis führt (Protokoll). Alle notwendigen Eingaben werden dazu mit sinnvollen Werten vorbelegt und bei Änderung durch den Nutzer auf Plausibilität geprüft. Gleichzeitig sollte die Funktionalität nicht auf die Möglichkeiten des Assistenten beschränkt bleiben und dem

erfahrenen Modellierer alle Optionen der numerischen Simulation bereitstellen. Die Dokumentation der Ein- und Ausgabedaten wird dabei durch die Verwendung von Datenbanken sichergestellt. Für den Einsatz in Ingenieurbüros, Behörden oder auch international war die GUI mehrsprachig zu implementieren. Diese Anforderungen begründeten die Entwicklung eines Simulationssystems, um den Wasserhaushalt und Stofftransport in ungesättigten Böden auch unter komplexen Bedingungen berechnen zu können.

Das aus dem zuvor genannten BMBF-Verbundvorhaben SiWaP entstandene Programm PCSiWaPro war wesentlicher Bestandteil nachfolgender Forschungsvorhaben, deren Ergebnisse in die weitere Entwicklung des Programms einfließen und dessen Anwendungsgebiete außerhalb der Sickerwasserprognose erweiterten. So sind erforderliche Eingangsdaten wie bodenhydraulische und Stofftransportparameter oft mit Unsicherheiten behaftet oder können nur in Wertebereichen gefasst werden. Diesem Problem wurde im Projekt APIS Rechnung getragen, um die Unschärfen auch in den Simulationsergebnissen ausweisen zu können (Blankenburg, et al., 2010).

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, neben den Grundlagen für Wasserhaushalt und Stofftransport in der ungesättigten Zone insbesondere auch die Entwicklung des Programms PCSiWaPro darzulegen. Ausgehend vom Basismodell SWMS_2D (Šimunek, et al., 1994) und den Erweiterungen durch KEMMESIES (Kemmesies, 1995) im Bereich der Parameteridentifikation werden die in PCSiWaPro implementierten Ansätze erläutert. Dies betrifft sowohl die Architektur der Software als auch die Ergebnisse aus den zuvor genannten Forschungsvorhaben. In einer Reihe von Beispielsimulationen soll die jeweilige Anwendung demonstriert werden.

Anmerkungen des Autors

Der Name PCSiWaPro[®] existiert seit 2010 und ist ein eingetragenes Warenzeichen der Ingenieurbüro für Grundwasser GmbH. Der frühere Name des Programms lautete SiWaPro DSS und ist in verschiedenen (Eigen-)Veröffentlichungen bis ca. 2010 (so auch in der Literaturliste) noch zu finden. Aus Gründen der Lesbarkeit wird das Zeichen für Registered Trademark[®] im Folgenden nicht weiter aufgeführt.

2 Wasserhaushaltsberechnung in variabel gesättigten porösen Medien

Das Kapitel geht zunächst auf die Basisgleichung ein, mit der der Wasserhaushalt beschrieben werden kann. Da diese für den allgemeinen Fall nur numerisch lösbar ist, wird im Weiteren auf Ansätze zur numerischen Lösung mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente eingegangen.

2.1 Zugrundeliegende Gleichung

Der Wasserhaushalt sowie die Dynamik des Wassers unter variabel gesättigten Bedingungen (zeitliche Änderung der Verteilung des Gehalts der benetzenden Phase) kann mit Hilfe der RICHARDS-Gleichung (1) beschrieben werden (Richards, 1931):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial h}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] - S \quad (1)$$

Dabei bedeuten:

θ	Volumetrischer Wassergehalt (L^3/L^3)
t	Zeit (T)
x_i	Raumkoordinaten (für 2D-Betrachtungen: $x_1 = x$, $x_2 = z$) (L)
K	Ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit (L/T)
K^A	Anisotropietensor der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit K (-)
h	Druckhöhe (L)
S	Quellen- oder Senkenterm pro Einheitsvolumen (T^{-1})

Zur vereinfachten Schreibweise und besseren Lesbarkeit wird die EINSTEIN'sche Summenkonvention verwendet. Taucht ein Index in einem Term doppelt auf, so ist dieser über alle Werte des Index zu summieren.

Die RICHARDS-Gleichung kann aus den Bilanzgleichungen (Massen- und Energieerhaltung) hergeleitet werden. Auf eine eingehende Herleitung wird an dieser Stelle jedoch verzichtet und es sei auf (Busch, et al., 1993) und (Diersch, 2014) verwiesen. Die RICHARDS-Gleichung ist nichtlinear, da die hydraulische Durchlässigkeit K (in Form eines Tensors K^A) wiederum von der Druckhöhe h abhängt. Gleichung (1) stellt die gemischte Form der RICHARDS-Gleichung dar. Sie beinhaltet sowohl die unabhängige Größe h als auch den volumetrischen Wassergehalt θ . Daneben existieren auch die h -basierte sowie die θ -basierte Form. Nach Untersuchungen von (Celia, et al., 1990) weist die numerische Lösung der gemischten Form die beste Bilanztreue bzw. den geringsten Volumenbilanzfehler

auf. Für die Lösung der RICHARDS-Gleichung müssen zwei Parameterfunktionen bekannt sein:

- Funktionaler Zusammenhang zwischen der Kapillardruckhöhe h und dem volumetrischen Wassergehalt θ (Saugspannungs-Sättigungs-Kurve, Retentionsfunktion)
- Abhängigkeit der hydraulischen Durchlässigkeit vom volumetrischen Wassergehalt bzw. der Kapillardruckhöhe (Funktion der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit)

Der in PCSiWaPro implementierte Ansatz verwendet die geschlossene analytische Lösung nach VAN GENUCHTEN (van Genuchten, 1980), welche von LUCKNER (Luckner, et al., 1989) erweitert wurde. Damit werden sowohl die Saugspannungs-Sättigungs-Kurve als auch die Funktion der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit mit einem geschlossenen Parametersatz beschrieben.

2.1.1 Saugspannungs-Sättigungs-Kurve

Der hier dargestellte Zusammenhang zwischen Saugspannung und Sättigung stellt eine geschlossene analytische Form der Retentionsfunktion dar (van Genuchten, 1980). Der Ansatz wurde später durch LUCKNER (Luckner, et al., 1989) erweitert und berücksichtigt die Restphasengehalte des Bodenwassers und der Bodenluft zur Berücksichtigung der Hysterese des Bodens bei Be- und Entwässerungsvorgängen. Der funktionale Zusammenhang ist in Gleichung (2) aufgeführt, Abbildung 1 zeigt die grafische Darstellung dazu.

$$\theta_b = A + \frac{\Phi - A - B}{[1 + (\alpha \cdot h_c)^n]^{1-\frac{1}{n}}} \quad (2)$$

Mit:

θ_b	Volumetrischer Wassergehalt (b für benetzende Phase) (L^3/L^3)
A	Funktion des hydraulischen Restwassergehalts (-)
B	Funktion des Restluftgehalts (-)
Φ	Porosität (-)
α	Maßstabsfaktor, VAN-GENUCHTEN-Parameter (1/L)
n	Anstiegsparameter, VAN-GENUCHTEN-Parameter (-)
h_c	Kapillardruckhöhe (L)

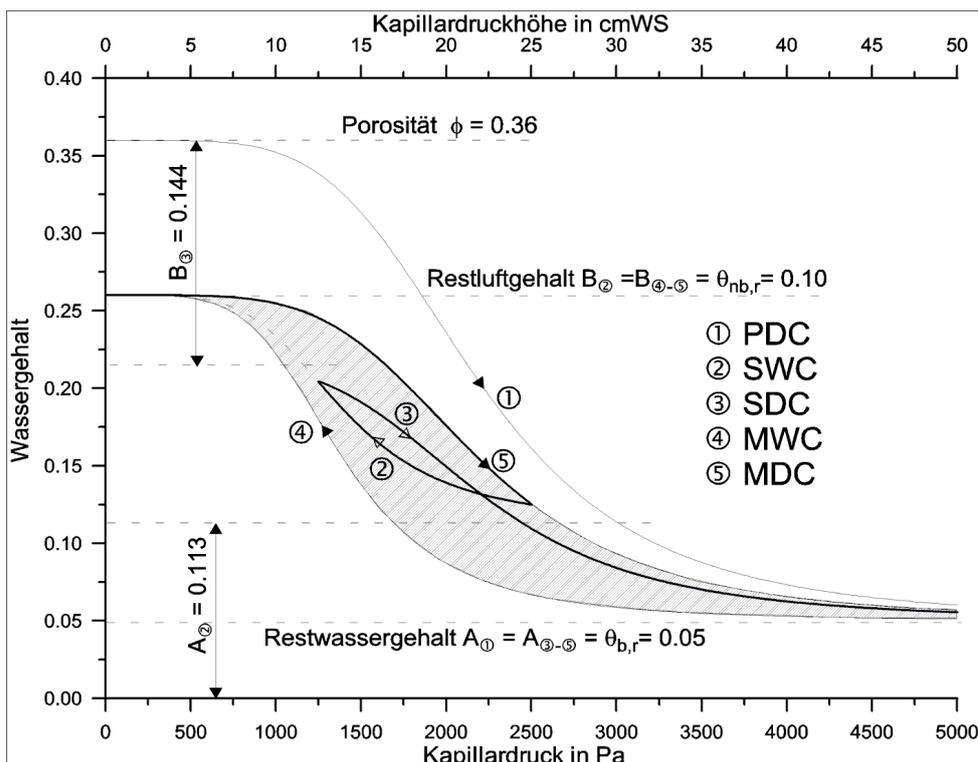


Abbildung 1: Saugspannungs-Sättigungs-Kurve entsprechend Gleichung (2), beispielhaft für einen Sand, aus (Kemmesies, 1995).

An dieser Stelle sollen die Abkürzungen aus Abbildung 1 kurz erläutert werden. Für weiterführende Informationen sei auf (Kemmesies, 1995) verwiesen.

- PDC Primary Drainage Curve
- SWC Scanning Wetting Curve
- SDC Scanning Drainage Curve
- MWC Main Wetting Curve
- MDC Main Drainage Curve

2.1.2 Funktion der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit

Der von (van Genuchten, 1980) und (Luckner, et al., 1989) verwendete Ansatz ist auf die Arbeiten von (Mualem, 1976) zurückzuführen. Die Berechnung der Funktion der relativen ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit erfolgt nach Gleichung (3):

$$K_r(\theta) = \frac{k(\theta)}{k_0} = \left(\frac{\bar{S}}{\bar{S}_0}\right)^\lambda \cdot \left[\frac{1 - \left(1 - \bar{S}^m\right)^{m-2}}{1 - \left(1 - \bar{S}_0^m\right)^m} \right] \quad (3)$$

Darin bedeuten:

$K_r(\theta)$ Relative ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit

$k(\theta)$	ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit
\bar{S}	effektive Sättigung oder Mobilitätsgrad
\bar{S}_0	effektive Sättigung bei einem beliebigen (gemessenen) Wassergehalt θ_0
k_0	hydraulische Leitfähigkeit bei Wassergehalt θ_0
λ	MUALEM-Parameter zur Charakterisierung der Porenkonnektivität
m	$1-1/n$ (n entsprechend Gleichung (2))

Die effektive Sättigung wird nach Gleichung (4) berechnet. In (Kemmesies, 1995) wird dieser Wert auch mit Mobilitätsgrad bezeichnet. Der Parameter λ wurde durch MUALEM (Mualem, 1976) nach Auswertung zahlreicher Böden mit einem mittleren Wert von 0,5 belegt.

$$\bar{S} = \frac{\theta_w - \theta_{w,r}}{\phi - \theta_{w,r}} \quad (4)$$

2.2 Numerische Lösung

Aufgrund des nichtlinearen Charakters der RICHARDS-Gleichung (1), muss diese im Allgemeinen mit Hilfe eines numerischen Verfahrens iterativ gelöst werden. Als Verfahren kommt die Methode der Finiten Elemente mit linearen Basisfunktionen zum Einsatz. Diese Methode ist sehr verbreitet und in der Literatur ausführlich beschrieben, z.B. (Diersch, 2014) und (Spitz, et al., 1996). An dieser Stelle soll daher auf die mathematische Herleitung der Grundlagen verzichtet und nur auf den Lösungsprozess der quantisierten RICHARDS-Gleichung eingegangen werden. Aufgrund der Entwicklungshistorie des Programms PCSiWaPro basiert der numerische Lösungsprozess auf der Public-Domain Simulationssoftware SWMS_2D (Šimuněk, et al., 1994). SWMS_2D wurde Anfang der 1990er Jahre am US Salinity Laboratory¹ entwickelt. Das Programm simuliert die Prozesse für Strömung und Stofftransport in variabel gesättigten, porösen Medien. Die Beschreibung dieses Abschnitts orientiert sich daher daran.

2.2.1 Räumliche Quantisierung

Für die erforderliche Quantisierung der RICHARDS-Gleichung im zweidimensionalen Raum unter Nutzung der FEM wird das Modellgebiet in ein Netz dreieckiger Elemente unterteilt. Die Ecken dieser Elemente werden als Knotenpunkte definiert. Die abhängige Variable, die Druckhöhe $h(x,z,t)$, wird durch eine Funktion wie folgt angenähert:

¹ Agricultural Research Service, US Department of Agriculture, Riverside, Kalifornien

$$h'(x, z, t) = \sum_{n=1}^N \varphi_n(x, z) h_n(t) \quad (5)$$

wobei φ_n stückweise lineare Basisfunktionen (im Falle linearer Elemente) sind, die die Bedingung $\varphi_n(x_m, z_m) = \delta_{nm}$ erfüllen, h_n sind unbekannte Variablen, die der Lösung der RICHARDS-Gleichung an den Knotenpunkten entsprechen, N ist die Gesamtzahl der Knotenpunkte, δ_{nm} bezeichnet das Kronecker-Delta und hat für $n = m$ den Wert 1 sowie für $n \neq m$ den Wert 0. Die Basisfunktionen eines Elements nehmen für alle Bereiche außerhalb des Elements den Wert null an.

Die GALERKIN-Methode als Spezifizierung der FEM fordert, dass der Differentialoperator in Verbindung mit der RICHARDS-Gleichung orthogonal zu jeder der N Basisfunktionen ist, d.h.,

$$\int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[K \left(K_{ij}^A \frac{\partial h}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) \right] + S \right\} \varphi_n d\Omega = 0 \quad (6)$$

Wendet man den ersten Satz von GREEN auf Gleichung (6) an und ersetzt h durch h' , erhält man

$$\begin{aligned} & \sum_e \int_{\Omega_e} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \varphi_n + K K_{ij}^A \frac{\partial h'}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} \right) d\Omega = \\ & \sum_e \int_{\Gamma_e} K \left(K_{ij}^A \frac{\partial h'}{\partial x_j} + K_{iz}^A \right) n_i \varphi_n dT + \sum_e \int_{\Omega_e} \left(-K K_{iz}^A \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} - S \varphi_n \right) d\Omega \end{aligned} \quad (7)$$

mit

Ω_e Bereich des Elements e

Γ_e Rand des Elements e

Die natürlichen Zu- bzw. Abstromrandbedingungen (Randbedingungen 2. Art, NEUMANN-RB) können direkt in das numerische Schema aufgenommen werden, indem man das erste Integral der rechten Seite in Gleichung (7) spezifiziert.

Durch Integration über alle Elemente und der Anwendung zweier Vereinfachungen, die anschließend erläutert werden, entsteht ein System zeitabhängiger gewöhnlicher Differen-

tialgleichungen mit nichtlinearen Koeffizienten. In Matrizenschreibweise² können diese geschrieben werden durch:

$$[F] \frac{d\{\theta\}}{dt} + [A]\{h\} = \{Q\} - \{B\} - \{D\} \quad (8)$$

Die einzelnen Ausdrücke aus Gleichung (8) werden durch folgende Terme dargestellt:

$$\begin{aligned} A_{nm} &= \sum_e K_l K_{ij}^A \int_{\Omega_e} \varphi_l \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_j} d\Omega \\ &= \sum_e \frac{1}{4A_e} \bar{K} [K_{xx}^A b_m b_n + K_{xz}^A (c_m b_n + b_m c_n) + K_{zz}^A c_n c_m] \end{aligned} \quad (9)$$

$$B_n = \sum_e K_l K_{iz}^A \int_{\Omega_e} \varphi_l \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} d\Omega = \sum_e \frac{1}{2} \bar{K} (K_{xz}^A b_n + K_{zz}^A c_n) \quad (10)$$

$$F_{nm} = \delta_{nm} \sum_e \varphi_n d\Omega = \delta_{nm} \sum_e \frac{1}{3} A_e \quad (11)$$

$$Q_n = - \sum_e \sigma_{1l} \int_{\Gamma_e} \varphi_l \varphi_n d\Gamma = - \sum_e \sigma_{1n} \frac{L_n}{2} \quad (12)$$

$$D_n = \sum_e S_l \int_{\Omega_e} \varphi_l \varphi_n d\Omega = \sum_e \frac{1}{12} A_e (3\bar{S} + S_n) \quad (13)$$

$$l = 1, 2, \dots, N \quad m = 1, 2, \dots, N \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (14)$$

Die Indizes i und j stellen die jeweilige Dimension im Raum dar (i, j = 1, 2). Darüber hinaus gelten

$$\begin{aligned} b_u &= z_v - z_w & c_u &= x_w - x_v \\ b_v &= z_w - z_u & c_v &= x_u - x_w \\ b_w &= z_u - z_v & c_w &= x_v - x_u \end{aligned} \quad (15)$$

$$A_e = \frac{c_w b_v - c_v b_w}{2} \quad \bar{K} = \frac{K_u + K_v + K_w}{3} \quad \bar{S} = \frac{S_u + S_v + S_w}{3} \quad (16)$$

Die Gleichungen (9) bis (13) gelten für die Strömung in einem zweidimensionalen Kartesischen Koordinatensystem (x, z). Die Indizes u, v und w in Gleichung (15) stehen für die drei Knotenpunkte eines dreieckigen Elements e. A_e ist die Fläche des Elements e, \bar{K} die

² Ausdrücke in eckigen Klammern stellen Matrizen dar, Terme in geschweiften Klammern repräsentieren Vektoren.

mittlere hydraulische Leitfähigkeit und \bar{S} steht für die Wasserextraktion durch Pflanzenwurzeln an einem Element e , L_n ist die Länge des Randsegments, die dem Knoten n zugeordnet ist. Das Symbol σ_n in Gleichung (12) steht für den Fluss (LT^{-1}) über den Rand in der Nähe des Randknoten n (σ_n ist positiv, wenn der Fluss aus dem System führt). Für den Randfluss wird angenommen, dass dieser über jedes Randsegment gleich ist. Die Eintragungen für den Vektor Q_n sind bei allen internen Knoten, die nicht als Zu- oder Abstrom für Wasser wirken, gleich Null.

Das numerische Vorgehen, das zu Gleichung (8) führt, enthält zwei wichtige Annahmen. Eine Annahme betrifft die Differentiation der Knotenwerte des Wassergehalts in (8) nach der Zeit. Das Differential nach der Zeit wird entsprechend

$$\frac{d\theta_n}{dt} = \frac{\sum_e \int_{\Omega_e} \frac{\partial \theta}{\partial t} \varphi_n d\Omega}{\sum_e \int_{\Omega_e} \varphi_n d\Omega} \quad (17)$$

gewichtet. Diese Annahme wird mit dem Mass Lumping Ansatz der Koeffizientenmatrix durchgeführt, der nach (Celia, et al., 1990) und (Šimunek, et al., 1994) sowohl die Konvergenzgeschwindigkeit des iterativen Lösungsprozesses verbessert als auch zu kleineren Bilanzfehlern führt.

Die zweite Annahme betrifft den Anisotropie-Tensor K^A , der als konstant über jedes Element angesehen wird. Im Gegensatz dazu wird angenommen, dass die hydraulische Leitfähigkeit K , die Wasserkapazität C des Bodens und die Wasserextraktionsrate z.B. durch Pflanzenwurzeln S über jedem Element linear variieren. Zum Beispiel ist der Wassergehalt über jedes Element wie folgt verteilt:

$$\theta(x, z) = \sum_{n=1}^3 \theta(x_n, z_n) \varphi_n(x, z) \quad \text{für } (x, z) \in \Omega_e \quad (18)$$

wobei n die einzelnen Knotenpunkte des Elements durchläuft. Der Vorteil der linearen Interpolation ist, dass keine numerische Integration benötigt wird, um die Koeffizienten in (8) zu bestimmen.

2.2.2 Zeitquantisierung

Die Integration von Gleichung (8) nach der Zeit erhält man, indem man den Zeitbereich in eine Sequenz von finiten Intervallen quantisiert und die Differentiale nach der Zeit durch

finite Differenzen ersetzt. Ein implizites (rückwärts gerichtetes) finites Differenzenschema wird verwendet:

$$[F] \frac{\{\theta\}_{j+1} - \{\theta\}_j}{\Delta t_j} + [A]_{j+1} \{h\}_{j+1} = \{Q\}_j - \{B\}_{j+1} - \{D\}_j \quad (19)$$

wobei $j+1$ für den aktuellen Zeitpunkt steht, an dem die Lösung betrachtet wird, Index j bezieht sich auf den vorherigen Zeitpunkt. Die Zeitschrittweite ist dann $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j$. Gleichung (19) stellt das endgültige Gleichungssystem dar, welches gelöst werden muss. Da die Koeffizienten θ , A , B Funktionen der abhängigen Variable h sind, sind die Gleichungen in der Regel nicht linear und müssen iterativ gelöst werden.

2.2.3 Lösungsprozess

Aus der Quantisierung der RICHARDS-Gleichung entsteht zunächst ein nichtlineares Gleichungssystem (Gleichung (19)), welches iterativ gelöst werden muss. Dazu werden die Gleichungen linearisiert und durch einen Gleichungslöser (Abschnitt 2.2.4) erfolgt die Berechnung der unbekanntenen Druckhöhen. Mit dieser Lösung wird Gleichung (19) erneut ausgewertet: Linearisierung der Gleichungen und Berechnung einer neuen Lösung. Dieser Prozess wird solange wiederholt, bis die Lösung konvergiert. Konvergenz ist erreicht, wenn die maximale Differenz in der Druckhöhe oder im Wassergehalt an einem Knoten zwischen 2 aufeinanderfolgenden Iterationen das Iterationskriterium nicht übersteigt.

2.2.4 Lösung des Gleichungssystems

Aus der Linearisierung von Gleichung (19) entsteht ein lineares Gleichungssystem, welches allgemein in der Form

$$[A]\{x\} = \{b\} \quad (20)$$

geschrieben werden kann. Hierbei steht $[A]$ für die Koeffizientenmatrix, $\{x\}$ ist der Vektor der Unbekannten und $\{b\}$ ist der Vektor der rechten Seite. Die Matrix $[A]$ enthält die Matrizen aus Gleichung (19), die Unbekannten $\{x\}$ sind die Druckhöhen an den Knoten und $\{b\}$ enthält die Randbedingungen sowie interne Massenflüsse. Das Gleichungssystem wird mit Hilfe eines Gleichungslösers für die Unbekannten $\{x\}$ gelöst. Grundsätzlich sind im Programm PCSiWaPro zwei Gleichungslöser implementiert: Elimination nach GAUß als direktes Verfahren sowie das vorkonditionierte konjugierte Gradientenverfahren (PCG) als iterativer Löser (Mendoza, et al., 1991). Die Vorkonditionierung beim PCG-Verfahren erfolgt durch unvollständige LU-Zerlegung. Nachteil bei Verwendung der Elimination nach Gauß sind der notwendige Speicherbedarf sowie der numerische Aufwand, da die gesamte Koeff-

fizientenmatrix im Speicher gehalten werden muss. Insgesamt steigt der Aufwand proportional zum Quadrat der Anzahl der Unbekannten. Die Anzahl der erforderlichen Rechenoperationen ist dafür a priori bekannt. Im Gegensatz dazu steigen bei iterativen Verfahren der Bedarf an Speicherplatz und der numerische Aufwand mit der Problemgröße nur um eine Potenz von 1,5. Die Zahl an erforderlichen Iterationen ist dafür a priori nicht bekannt. Für kleine Problemstellungen bis 500 Knoten wird daher automatisch der direkte Löser verwendet, andernfalls das iterative PCG-Verfahren.

Die Koeffizientenmatrix $[A]$ ist symmetrisch und dünn besetzt (sparse). Um Speicherplatz zu sparen und da iterative Verfahren nur die besetzten Elemente benötigen, werden daher ausschließlich die Nicht-Null-Elemente sowie deren Position gespeichert. Im Programm PCSiWaPro wird dazu ein spezielles Format verwendet (Mendoza, et al., 1991), welches Ähnlichkeiten zu dem verbreiteten Compressed Row Storage-Verfahren (CRS) aufweist und aufgrund der dichten Speicherweise positive Auswirkungen auf die Performance von Prozessoren mit schnellen Caches aufweist (Barrett, et al., 1993).

3 Transport- und Umsetzungsprozesse

Dieses Kapitel beschreibt die im Programm PCSiWaPro zugrundeliegende Gleichung für den Stofftransport und die dabei stattfindenden Umsetzungsprozesse. Ausgehend von der Erhaltungsgleichung werden zunächst die maßgeblichen Transport- und Umsetzungsprozesse erläutert. Schließlich wird auf die numerische Lösung der Advektions-Dispersionsgleichung eingegangen. Die in diesem Kapitel verwendeten Begrifflichkeiten und Definitionen, beispielsweise zur Beschreibung der Dispersion, richten sich maßgeblich nach den Angaben in (Radcliffe, et al., 2010).

3.1 Erhaltungsgleichung

Die Erhaltungsgleichung beschreibt, dass die zeitliche Änderung der gesamten Konzentration im Boden gleichzusetzen ist zur negativen Änderungsrate des Massenflusses in den einzelnen Raumkoordinaten abzüglich vorhandener interner Quellen und Senken. Auf eine ausführliche Herleitung wird an dieser Stelle verzichtet und es sei z.B. auf (Radcliffe, et al., 2010) verwiesen:

$$\frac{\partial c_t}{\partial t} = -\frac{\partial F_{s_i}}{\partial x_i} - S c_s \quad (21)$$

c_t	Gesamte Konzentration (flüssige und feste Phase)
t	Zeit
F_s	Massenfluss verursacht durch Transportprozesse
S	Interne Quellen und Senken entsprechend Gleichung (1)
c_s	Konzentration bei Entnahme oder Einspeisung (Senken und Quellen)

Die Variable c_t beschreibt dabei die Konzentration c des im Wasser gelösten Stoffs (M/L^3) als auch die Konzentration s des an der festen Phase sorbierten Stoffs (M/M). Um Einheitengleichheit (M/L^3) herzustellen, wird c mit dem volumetrischen Wassergehalt multipliziert, s mit der Trockenrohddichte ρ_b :

$$c_t = \theta c + \rho_b s \quad (22)$$

Im folgenden Abschnitt 3.2 wird zunächst der Massenfluss F_s beschrieben, der durch die Transportprozesse verursacht wird.

3.2 Transportprozesse

Der Transport von Stoffen im Untergrund, dargestellt durch den Massenfluss F_s in Gleichung (21), wird maßgeblich durch 3 Prozesse verursacht. Mit der Advektion wird die Bewegung des Wassers, in welchem der Stoff gelöst ist, beschrieben. Die Diffusion ist davon unabhängig und wird maßgeblich durch die BROWNSche Molekularbewegung verursacht. Die hydrodynamische Dispersion lässt sich wiederum auf die Advektion zurückführen und ist sehr skalenabhängig.

Der Massenfluss F_s lässt sich als Summe der 3 einzelnen Massenflüsse beschreiben:

$$F_s = F_{adv} + F_{diff} + F_{disp} \quad (23)$$

3.2.1 Advektion

Advektion ist die Bewegung des gelösten Stoffes mit dem Bodenwasser. Die Geschwindigkeit der Bewegung entspricht dabei der mittleren Porenwassergeschwindigkeit, der Abstandsgeschwindigkeit v_a . Diese Geschwindigkeit berücksichtigt, dass das Bodenwasser nur durch die wassererfüllten Porenkanäle (durchflusswirksamer Porenraum) fließen kann. Im Vergleich zur Strömungsgeschwindigkeit, hervorgerufen durch ein Potentialgefälle, ist die Abstandsgeschwindigkeit erhöht:

$$v_{a,i} = \frac{q_i}{\theta} \quad (24)$$

v_a	Abstandsgeschwindigkeit (L/T)
q	DARCY-Geschwindigkeit (L/T)
θ	Volumetrischer Wassergehalt (L^3/L^3)

Als advektiver Massenfluss ergibt sich damit

$$F_{adv,i} = q_i c = v_{a,i} \theta c \quad (25)$$

F_{adv}	Advektiver Massenfluss ($M/L^2/T$)
c	Stoffkonzentration (M/L^3)

3.2.2 Diffusion

Diffusion wird maßgeblich durch die BROWNSche Bewegung der Moleküle in der festen, flüssigen und gasförmigen Phase hervorgerufen. Bei einem Konzentrationsgradienten bewegt sich der Migrant entlang des Konzentrationsgefälles. Die Diffusion ist ein physikali-

scher Ausgleichsprozess und tritt unabhängig von anderen Wasserbewegungen auf. In freiem Wasser kann der Prozess durch das erste FICKsche Gesetz beschrieben werden:

$$F_{diff,i} = -D_w \frac{\partial c}{\partial x_i} \quad (26)$$

F_{diff}	Massenfluss durch Diffusion in freiem Wasser (M/L ² /T)
D_w	Diffusionskoeffizient in freiem Wasser (L ² /T)
$\partial c/\partial x_i$	Konzentrationsgradient (M/L ⁴)

Der Diffusionskoeffizient weist für viele im Wasser gelöste Stoffe eine Größenordnung von ungefähr 10⁻⁹ m²/s auf, während dieser für Luft um ca. 4 Größenordnungen größer ist. Im Boden als porösem Medium kann die Diffusion ebenfalls mit Gleichung (26) beschrieben werden, jedoch müssen die hier vorherrschenden Bedingungen berücksichtigt werden. Neben reduzierten Fließquerschnitten sind dies auch gewundene Fließwege. Dies führt letztlich zu einer verlangsamten Diffusion im Boden, so dass der Diffusionskoeffizient reduziert werden muss. Zur Berücksichtigung der gewundenen Fließwege wird ein Tortuositätsfaktor τ definiert, der eine Funktion des Wassergehalts θ darstellt und nach (Millington, et al., 1961) wie folgt berechnet wird:

$$\tau(\theta) = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_s^2} \quad (27)$$

θ_s ist der Wassergehalt des wassergesättigten Bodens. Mit Hilfe des Tortuositätsfaktors τ wird schließlich der effektive Diffusionskoeffizient ermittelt:

$$D_w^{eff} = \tau(\theta)D_w \quad (28)$$

Für die Berücksichtigung der reduzierten Querschnittsflächen der Porenkanäle im Boden wird der effektive Diffusionskoeffizient mit dem Wassergehalt multipliziert, woraus sich letztlich der diffusive Massenfluss im Boden ergibt:

$$F_{diff,i} = -\theta\tau(\theta)D_w \frac{\partial c}{\partial x_i} = -\theta D_w^{eff} \frac{\partial c}{\partial x_i} \quad (29)$$

F_{diff}	Diffusiver Massenfluss (M/L ² /T)
θ	Volumetrischer Wassergehalt (L ³ /L ³)
D_w	Diffusionskoeffizient in freiem Wasser (L ² /T)
τ	Tortuositätsfaktor (-)
$\partial c/\partial x_i$	Konzentrationsgradient (M/L ⁴)

3.2.3 Hydrodynamische Dispersion

Die hydrodynamische Dispersion ist die Verteilung von gelösten Stoffen im bewegten Bodenwasser, welche aufgrund unterschiedlicher Fließgeschwindigkeiten und Fließwege einzelner Wasserteilchen hervorgerufen wird. Grundsätzlich tragen 3 unterschiedliche Prozesse zur Dispersion bei. Zunächst treten durch die Reibung am Porenrand innerhalb des Porenkanals unterschiedliche Fließgeschwindigkeiten auf. Darüber hinaus verfügen unterschiedliche Porenkanäle nicht über einen gleichmäßigen Durchmesser, sodass größere Porendurchmesser höhere mittlere Fließgeschwindigkeiten bedingen als kleinere Durchmesser. Schließlich führt die Gewundenheit der Porenkanäle dazu, dass Unterschiede in den Pfadlängen entstehen und sich damit unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten ergeben.

Durch zahlreiche (eindimensionale) Experimente ist bekannt, z.B. (Luckner, et al., 1991) oder (Radcliffe, et al., 2010), dass der Dispersionskoeffizient proportional zur Abstandsgeschwindigkeit v_a ist, wobei der Proportionalitätsfaktor mit Dispersivität bezeichnet wird:

$$D_d = \alpha_l \cdot v_a \quad (30)$$

D_d	Dispersionskoeffizient (L^2/T)
α_l	Longitudinale Dispersivität (L)
v_a	Abstandsgeschwindigkeit (L/T)

Der Betrag der Dispersivität ist stark skalenabhängig. Während für Messungen im Labormaßstab mit einer Dispersivität im Zentimeterbereich gerechnet werden kann, ist für regionale Problemstellungen ein Wert im Meterbereich nicht unüblich (Luckner, et al., 1991).

Im mehrdimensionalen Raum wird der Dispersionskoeffizient als Tensor dargestellt. Zusätzlich zur longitudinalen Dispersivität (in Fließrichtung geltend) wird dann allgemein auch der Begriff transversale Dispersivität (orthogonal zur Fließrichtung geltend) verwendet. Dies ist erforderlich, da sich im instationären Strömungsraum die Fließrichtung zu jedem Zeitpunkt und an jedem Ort ändern kann.

Mathematisch kann der dispersive Massenfluss analog zur Diffusion mit Hilfe des ersten FICK'schen Gesetzes beschrieben werden (es wird der Dispersionstensor \underline{D}_d verwendet):

$$F_{disp,i} = -\theta \underline{D}_{d,ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \quad (31)$$

F_{disp}	Massenfluss verursacht durch Dispersion ($M/L^2/T$)
------------	---

θ	volumetrischer Wassergehalt (L^3/L^3)
\underline{D}_d	hydrodynamischer Dispersionstensor (L^2/T)
$\partial c/\partial x_j$	Konzentrationsgradient (M/L^4)

Aufgrund der analogen mathematischen Beschreibung und der ähnlichen Effekte können Diffusionskoeffizient und Dispersionskoeffizient in einem Parameter zusammengefasst werden. Dieser wird als effektiver Dispersionskoeffizient D_e bezeichnet (Radcliffe, et al., 2010):

$$D_{e,ij} = D_w^{eff} \delta_{ij} + D_{d,ij} \quad (32)$$

3.2.4 Zusammenfassung Transportprozesse

Zusammengefasst ergibt sich für F_s :

$$F_{s,i} = q_i c - \theta D_w^{eff} \delta_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} - \theta D_{d,ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \quad (33)$$

Nach Anwendung von Gleichung (32) ergibt sich:

$$F_{s,i} = q_i c - \theta D_{e,ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \quad (34)$$

Setzt man Gleichung (34) in Gleichung (21) ein und beachtet außerdem Gleichung (22), erhält man

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} + \frac{\partial \rho s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{e,ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial (q_i c)}{\partial x_i} \quad (35)$$

Gleichung (35) ist die allgemeine Form der Advektions-Dispersions-Gleichung, enthält jedoch keine Terme zur Beschreibung von Abbau- und Umsetzungsprozessen. Auf diese wird in Abschnitt 3.3 eingegangen, speziell auf Sorptions- und Abbauprozesse. Für stationäre Verhältnisse und einem linearen Sorptionsansatz kann Gleichung (35) vereinfacht werden, wobei in Verbindung mit bestimmten Randbedingungen analytische Lösungen existieren, z.B. (Luckner, et al., 1991) und (Radcliffe, et al., 2010).

3.3 Umsetzungsprozesse

Dieser Abschnitt beschreibt die Umsetzungsprozesse. Neben der Sorption werden grundlegend auch Abbauprozesse verschiedener Ordnung sowie deren Darstellung in PCSiWa-Pro beschrieben. Stoffumwandlungsprozesse, d.h. die Entstehung eines (neuen) Stoffs aus

einem vorhandenem, werden hier nicht betrachtet, da diese nicht Bestandteil des Programms PCSiWaPro sind und Gegenstand weiterführender Arbeiten darstellen. Beispielhaft sei das Programm PhreeqC (Parkhurst, et al., 2013) genannt, welches derartige Umwandlungsprozesse betrachtet und über eine zukünftige Kopplung angesprochen werden kann.

3.3.1 Sorption

Sorption beschreibt die Bindung (Beladung) eines im Wasser gelösten Stoffes an der festen Phase (Bodenmatrix). Der Stoff unterliegt dabei keiner chemischen Veränderung. Grundsätzlich kann dabei in Adsorption (Anhaften an der Bodenmatrix) und Desorption (Freisetzen von dieser) unterschieden werden. Bei der funktionalen Beschreibung wird davon ausgegangen, dass die Sorption unter konstanter Temperatur abläuft und mit Isothermen erfasst werden kann. Insgesamt sind 3 verschiedene Isothermen in PCSiWaPro implementiert.

3.3.1.1 Lineare Gleichgewichtssorption

Die lineare Sorption wird beschrieben durch:

$$s = K_d c \quad (36)$$

s Konzentration des an der Bodenmatrix sorbierten Stoffes (M/M)

K_d Linearer Verteilungskoeffizient (L^3/M)

c Konzentration des im Wasser gelösten Stoffes (M/L^3)

3.3.1.2 Nichtlineare Gleichgewichtssorption

Im Programm PCSiWaPro sind darüber hinaus 2 nichtlineare Isothermen implementiert, welche auch in der Literatur weit verbreitet sind. In (Freundlich, 1906) wird der Zusammenhang zwischen gelöster und sorbierter Konzentration wie folgt beschrieben:

$$s = K_f c^\beta \quad (37)$$

K_f Verteilungskoeffizient nach FREUNDLICH ($L^{3\beta}/M^\beta$)

β Exponent (-)

Die lineare Sorption ist ein Spezialfall für $\beta = 1$. Durch die Potenzfunktion wird berücksichtigt, dass bei stärkerer Beladung der Sorptionsoberfläche des Sorbents weniger Sorbat aufgenommen werden kann. Sie verfügt jedoch nicht über eine Begrenzung nach oben. Es kann daher keine vollständige Beladung der Sorptionsoberfläche abgebildet werden.

Mit der Isotherme nach LANGMUIR (Langmuir, 1916) kann indes die maximale Beladung vorgegeben werden. Mit stärker werdender Beladung der Sorptionsoberfläche nähert sich die Konzentration des Sorbats der maximalen Beladungsgrenze s_{max} asymptotisch an. Sie stellt die einfachste physikalisch begründete Isotherme dar:

$$s = \frac{K_l c}{1 + K_l c} s_{max} \quad (38)$$

K_l Verteilungskoeffizient nach LANGMUIR (L^3/M)

s_{max} Maximalbeladung (M/M)

3.3.1.3 Darstellung der Isothermen im Programm PCSiWaPro

Die bislang beschriebenen Sorptionsisothermen werden im Programm PCSiWaPro über eine allgemeine Sorptionsgleichung wiedergegeben:

$$s = \frac{K_x c^\beta}{1 + \eta c^\beta} \quad (39)$$

Tabelle 1 führt verschiedene Parameterkonfigurationen für Gleichung (39) auf und stellt die resultierenden Isothermen dar. Der Parameter K_x bezeichnet den für die jeweilige Isotherme gültigen Verteilungskoeffizienten.

Tabelle 1: Verfügbare Isothermen und Parametervorgaben

Parameter η	Parameter β	Isotherme
0	1	Lineare Sorption (nach HENRY)
0	$\neq 0$ und $\neq 1$	Isotherme nach FREUNDLICH
>0	1	Isotherme nach LANGMUIR mit K_x als Maximalbeladung K_l und $\eta = K_l$.

Die Isothermen nach FREUNDLICH und LANGMUIR sind in ihrem Funktionsverlauf nichtlinear und führen dazu, dass Gleichung (35) ebenfalls nichtlinear wird und iterativ gelöst werden muss. Eine analytische Lösung existiert für diesen Fall nicht.

In Abbildung 2 sind beispielhafte Funktionsverläufe der Isothermen, wie sie mit Gleichung (39) berechnet worden sind, grafisch dargestellt. Die dazu verwendeten Werte für die Parameter sind in Tabelle 2 aufgeführt. Der asymptotische Verlauf der LANGMUIR-Isotherme ist deutlich zu erkennen.

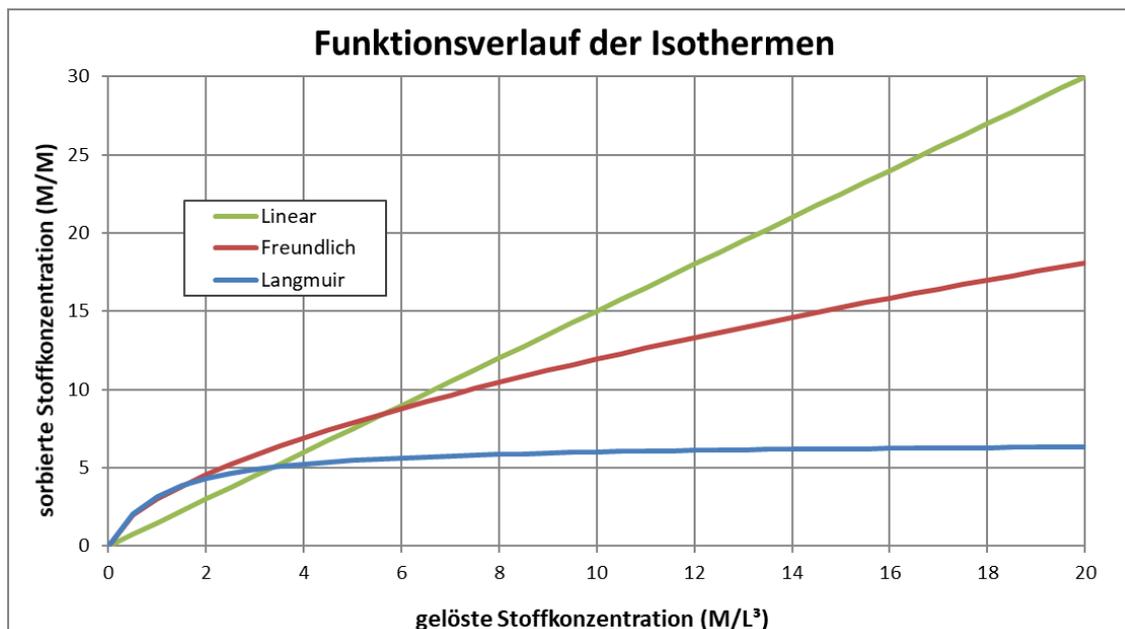


Abbildung 2: Grafische Darstellung für einen beispielhaften Verlauf der Isothermen

Tabelle 2: Parameterwerte zur Berechnung der Funktionsgraphen aus Abbildung 2

Isotherme	Verteilungskoeffizient K_x	Parameter β	Parameter η
Linear	1,5	1,0	0,0
FREUNDLICH	3,0	0,6	0,0
LANGMUIR	6,0	1,0	0,9

3.3.2 Transformations- und Abbauprozesse

Viele Stoffe im Boden, insbesondere organische Substanzen, unterliegen vielfältigen Abba- und Transformationsprozessen, z.B. Nitrifikation, mikrobiellem Abbau (anaerob und aerob) oder auch radioaktivem Zerfall.

Diese Prozesse können als Reaktion erster Ordnung abgebildet werden. Die Rate oder Geschwindigkeit, mit der der Prozess stattfindet, ist dabei abhängig von der vorhandenen Konzentration des Stoffes. Für die Reaktion in Wasser kann geschrieben werden:

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} = -\mu_w \theta c \quad (40)$$

μ_w Konstante für Transformations- oder Abbauprozess erster Ordnung in der flüssigen Phase (1/T)

Es wird allgemein angenommen, dass mikrobieller Abbau nur für in Wasser gelöste Stoffe stattfindet (Radcliffe, et al., 2010). Für radioaktiven Zerfall trifft diese Einschränkung jedoch im Allgemeinen nicht zu. Zur Beschreibung der Reaktion des an der festen Phase sorbier-ten Stoffes kann folgende Gleichung verwendet werden:

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} = -\mu_s \rho s \quad (41)$$

μ_s Konstante für Transformations- oder Abbauprozess erster Ordnung an der Bodenmatrix (1/T)

Die Halbwertszeit $T_{1/2}$ eines Stoffes beschreibt die Zeitspanne, in der die Stoffkonzentration auf die Hälfte der Ausgangskonzentration abgesenkt wurde. Mit Hilfe der Halbwertszeit kann die Konstante μ stoffspezifisch ermittelt werden:

$$\mu = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}} \quad (42)$$

Darüber hinaus ist die Vorgabe von Reaktionen nullter Ordnung möglich. Auch hier wird wieder zwischen Konstanten für flüssige und feste Phase unterschieden. Reaktionen nullter Ordnung finden unabhängig von der vorhandenen Stoffkonzentration mit gleicher Geschwindigkeit statt. Für die flüssige Phase gilt dann:

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} = -\gamma_w \theta \quad (43)$$

γ_w Konstante für Transformations- oder Abbauprozess nullter Ordnung in flüssiger Phase ($M/L^3/T$)

Analog dazu die feste Phase:

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} = -\gamma_s \rho \quad (44)$$

γ_s Konstante für Transformations- oder Abbauprozess nullter Ordnung in fester Phase (1/T)

3.4 Basisgleichung für den Stofftransport in PCSiWaPro

Ergänzt man Gleichung (35) um die Koeffizienten für die zuvor beschriebenen Transformations- und Abbauprozesse als Senkenterme und betrachtet zusätzlich die zweite Dimension in den partiellen Ableitungen, ergibt sich die Grundgleichung für den Stofftransport im Programm PCSiWaPro:

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} + \frac{\partial \rho s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij}^w \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial q_i c}{\partial x_i} - \mu_w \theta c - \mu_s \rho s + \gamma_w \theta + \gamma_s \rho - S c_s \quad (45)$$

c	Konzentration des gelösten Stoffes (M/L ³)
s	Konzentration des sorbierten Stoffes (M/M)
ρ	Trockenrohddichte (M/L ³)
x_i, x_j	Raumkoordinaten (vertikal-eben: x, z) in (L)
t	Zeit (T)
θ	volumetrischer Wassergehalt (aus der Lösung der RICHARDS-Gleichung)
q_i	Komponente i (i = x, z) der Stromrate aus der Lösung der RICHARDS-Gleichung
D_{ij}	Dispersionstensor
μ_w, μ_s	Abbaukoeffizienten erster Ordnung für flüssige und feste Phase (1/T)
γ_w, γ_s	Abbaukoeffizienten nullter Ordnung für flüssige (M/L ³ /T) und feste Phase (1/T)
S	Quellen und Senken aus der RICHARDS-Gleichung
c_s	Konzentration im Quellen- oder Senkenterm S

Die Schreibweise von Gleichung (45) verwendet die EINSTEIN'sche Summenkonvention für die Indizes i und j. Die ebenfalls verwendeten Indizes w (für wässrig) und s (für solid, fest) beziehen sich auf die Angabe der jeweiligen Phase und sind von der Summenkonvention ausgenommen. Gleichung (45) ist eine parabolische Differentialgleichung. In der allgemeinen Form kann die Advektions-Dispersions-Gleichung nur numerisch gelöst werden, wobei Anfangs- und Randbedingungen vorzugeben sind. Die Lösung der RICHARDS-Gleichung (Gleichung (1)) ist erforderlich, um die Größen θ , q_i sowie den Senkenterm S zur Verfügung zu stellen.

3.5 Numerische Lösung

Analog zum Vorgehen bei der RICHARDS-Gleichung erfolgt die Lösung mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente. Die zum Lösen der Gleichungen angewandte Vorgehensweise ist in weiten Teilen analog dem Verfahren für die Lösung der Strömungsgleichung. Aufgrund der Entwicklungshistorie des Programms PCSiWaPro basiert der numerische Lösungsprozess auf dem des Programms SWMS_2D (Šimunek, et al., 1994). Die Beschreibung dieses Abschnitts orientiert sich daher an der dort implementierten Vorgehensweise.

3.5.1 Räumliche Quantisierung

Die abhängige Variable, die Konzentration $c(x,z,t)$, wird durch eine finite Reihe $c'(x,z,t)$ der Form

$$c'(x, z, t) = \sum_{n=1}^N \varphi_n(x, z) c_n(t) \quad (46)$$

approximiert. Dabei sind φ_n die gewählten linearen Basisfunktionen, c_n sind die unbekannt-zeitabhängigen Koeffizienten, die die Lösungen der Gleichung an Knotenpunkten des Finiten Elements darstellen. Wie in Abschnitt 2.2 steht N für die Gesamtzahl an Knotenpunkten und die Basisfunktionen eines Elements e nehmen außerhalb des Bereichs des Elements den Wert Null an. Das Anwenden der Standard-GALERKIN-Methode führt zu der folgenden Reihe von N Gleichungen:

$$\int_{\Omega} \left[-\theta R \frac{\partial c}{\partial t} - q_i \frac{\partial c}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + Fc + G \right] \varphi_n d\Omega = 0 \quad (47)$$

Wendet man den ersten Satz von GREEN auf die zweite Ableitung in Gleichung (47) an und ersetzt c durch c' , erhält man folgende zeitabhängige Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} \sum_e \int_{\Omega} \left[\left(-\theta R \frac{\partial c'}{\partial t} - q_i \frac{\partial c'}{\partial x_i} + Fc' + G \right) \varphi_n - \theta D_{ij} \frac{\partial c'}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} \right] d\Omega \\ + \sum_e \int_{\Gamma_e} \theta D_{ij} \frac{\partial c'}{\partial x_j} n_i \varphi_n d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (48)$$

In Matrixschreibweise³ stellt sich diese wie folgt dar:

$$[Q] \frac{d\{c\}}{dt} + [S]\{c\} + \{f\} = -\{Q^D\} \quad (49)$$

³ Ausdrücke in eckigen Klammern repräsentieren Matrizen, Terme in geschweiften Klammern stellen Vektoren dar.

wobei

$$Q_{nm} = \sum_e (-\theta R)_l \int_{\Omega} \varphi_l \varphi_n \varphi_m d\Omega = - \sum_e \frac{\kappa A_e}{12} (3\overline{\theta R} + \theta_n R_n) \delta_{nm} \quad (50)$$

und

$$\begin{aligned} S_{nm} &= \sum_e \left[(-q_i) \int_{\Omega_e} \varphi_l \varphi_n \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_i} d\Omega - (\theta D_{ij})_l \int_{\Omega_e} \varphi_l \frac{\partial \varphi_n}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi_m}{\partial x_j} d\Omega + F_l \int_{\Omega_e} \varphi_l \varphi_n \varphi_m d\Omega \right] \\ &= \sum_e \left[-\frac{\kappa b_m}{24} (3\overline{q_x} + q_{xn}) - \frac{\kappa c_m}{24} (3\overline{q_z} + q_{zn}) + \frac{\kappa A_e}{60} (3\overline{F} + F_n + F_m)(1 + \delta_{nm}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\kappa}{4A_e} (b_m b_n \overline{\theta D_{xx}} + (b_m c_n + c_m b_n) \overline{\theta D_{xz}} + c_m c_n \overline{\theta D_{zz}}) \right] \end{aligned} \quad (51)$$

sowie

$$f_n = \sum_e G_l \int_{\Omega_e} \varphi_l \varphi_n d\Omega = \sum_e \frac{\kappa A_e}{12} (3\overline{G} + G_n) \quad (52)$$

$$R = 1 + \frac{\rho}{\theta} \frac{K_x \beta c^{\beta-1}}{(1 + \eta c^\beta)^2} \quad (53)$$

Dabei stehen die überstrichenen Variablen für die Mittelwerte eines gegebenen Elements e . Die Benennung in obigen Gleichungen ist analog zu Gleichung (15). Das Randintegral in (48) steht für den dispersiven Massenstromanteil Q_n^D über den Rand, R ist der Retardationsfaktor und berechnet sich aus der Sorptionsisotherme.

Die Ableitung der Gleichungen (50) bis (52) enthält Annahmen, ergänzend zu den Annahmen, die in der Approximation der Finiten Elemente nach GALERKIN vorkommen (Šimuněk, et al., 1994). Zunächst werden die verschiedenen Koeffizienten aus den Integralen (θR , q_i , θD_{ij} , F , G) linear über jedes Element ausgedehnt, ähnlich wie die abhängige Variable, d.h. in Termen ihrer Knotenwerte und in Verbindung mit Basisfunktionen. Danach wird der Ansatz mit Mass Lumping erneut durchgeführt, indem man die Knotenwerte der Ableitung nach der Zeit aus (49) als gewichtete Mittelwerte über das gesamte Strömungsgebiet neu definiert:

$$\frac{dc_n}{dt} = \frac{\sum_e \int_{\Omega_e} \theta R \frac{\partial c}{\partial t} \varphi_n d\Omega}{\sum_e \int_{\Omega_e} \theta R \varphi_n d\Omega} \quad (54)$$

3.5.2 Zeitquantisierung

Zur Quantisierung der Zeitdifferentiale werden Finite Differenzen verwendet. Eine Annäherung erster Ordnung der Differentiale nach der Zeit führt zu folgenden algebraischen Gleichungen (Šimuněk, et al., 1994):

$$[Q]_{j+\varepsilon} \frac{\{c\}_{j+1} - \{c\}_j}{\Delta t} + \varepsilon[S]_{j+1}\{c\}_{j+1} + (1 - \varepsilon)[S]_j\{c\}_j + \varepsilon\{f\}_{j+1} + (1 - \varepsilon)\{f\}_j = 0 \quad (55)$$

wobei j für den vorherigen und $j+1$ für den aktuellen Zeitschritt stehen; Δt ist die Zeitschrittweite und ε ein Zeitwichtungsfaktor. Der Zeitwichtungsfaktor ε kann Werte im Bereich von $0 \leq \varepsilon \leq 1$ annehmen. In Tabelle 3 sind die gebräuchlichsten Schemata und ihre charakteristischen Merkmale aufgelistet. Die einzelnen Kriterien zur Einschätzung der Stabilität sowie der Oszillationsfreiheit eines Schemas werden in (Diersch, 2014) sehr ausführlich behandelt.

Tabelle 3: Übersicht der möglichen Schemata zur Lösung von Gleichung (55)

ε	Schema	Approximationsordnung	Stabilität	Oszillationsfreiheit
0	explizit	1.	beschränkt	stark restriktiert
1/2	CRANK-NICOLSON	2.	uneingeschränkt	restriktiert
2/3	GALERKIN-FEM	1.	uneingeschränkt	restriktiert
1	implizit	1.	uneingeschränkt	nicht restriktiert

Die Koeffizientenmatrix $[Q]_{j+\varepsilon}$ enthält gewichtete Mittelwerte der aktuellen und vorherigen Knotenwerte von θ und R . Gleichung (55) kann nun in folgender Form geschrieben werden:

$$[G]\{c\}_{j+1} = \{g\} \quad (56)$$

Wobei

$$[G] = \frac{1}{\Delta t} [Q]_{j+\varepsilon} + \varepsilon [S]_{j+1} \quad (57)$$

$$\{g\} = \frac{1}{\Delta t} [Q]_{j+\varepsilon} \{c\}_j - (1-\varepsilon)[S]_j \{c\}_j - \{f\}_{j+1} - (1-\varepsilon)\{f\}_j$$

4 Entwicklung des Programms PCSiWaPro

Dieses Kapitel gliedert die Grundsätze und Verfahren auf, auf Basis derer die Entwicklung des Programmsystems PCSiWaPro durchgeführt wurde.

Bei der Entwicklung des Programms spielten mehrere Faktoren eine Rolle, die es zu berücksichtigen galt. Zum einen existierte ein Simulationskernel, welcher vom bereits erwähnten Programm SWMS_2D adaptiert und erweitert wurde (Kemmesies, 1995) und weitestgehend im Standard FORTRAN 95/2003 (Gräber, et al., 2007) geschrieben ist. Dabei wurden auch Vorstufen der Objektorientierung umgesetzt (intensive Verwendung abgeleiteter Datentypen und von Modulen), damit der Code lesbarer, besser erweiterbar und weniger fehleranfällig wird.

Die Entwicklung einer grafischen Benutzeroberfläche (GUI – Graphical User Interface) sollte nach dem aktuellen Windows-Standard erfolgen, Mehrsprachigkeit unterstützen und die Datenhaltung (sowohl der Modelleingangs- als auch der Simulationsdaten) strukturiert in Datenbanken erfolgen. Die Wahl fiel auf das .NET-Framework der Firma Microsoft. Es bietet eine gute Unterstützung zur Entwicklung datenbankbasierter Anwendungen. Zudem können komplexe GUIs mit überschaubarem Aufwand entwickelt werden, welche darüber hinaus dem Windows-Standard entsprechen. Seit 2006 ist es Bestandteil des Windows-Betriebssystems, sodass keine zusätzliche Software zur Ausführung des Programms erforderlich ist. Für die Mehrsprachigkeit (Internationalisierung) wurde ebenfalls eine datenbankbasierte Lösung entwickelt, da dies die Aufnahme weiterer Landessprachen mit geringem Aufwand ermöglicht und zur Programmlaufzeit die Anzeigesprache gewechselt werden kann.

4.1 Softwarearchitektur

In der Entwicklung von Software gibt es eine Vielzahl von Möglichkeiten, die Architektur eines Programms zu gestalten. Durchgesetzt haben sich Verfahren, die die verschiedenen Komponenten einer Software getrennt voneinander betrachten und in Schichten oder auch Layer untergliedern. Da der Entwurf der Architektur einer Software bei Verwendung dieser Verfahren grundsätzlich einem Muster folgt, wird dies mit Entwurfsmuster bezeichnet (Gamma, et al., 2002). Die Verwendung dieses Terminus ist in der Literatur jedoch nicht immer einheitlich. Oft wird auch der Begriff Architekturmuster verwendet (Wickramanayake, 2010). Diese Gliederung spielt insbesondere bei der Art von Software eine wichtige Rolle, die mit einer GUI ausgestattet sind. Man kann diese Unterteilung von den Grundprinzipien eines beliebigen Programms ableiten:

- Nahezu jede Software muss mit Daten umgehen, daher ist eine Schicht für die Datenthaltung erforderlich (z.B. Einlesen, Löschen und Speichern von Daten)
- Die Software muss diese Daten verarbeiten können, daher ist eine Logik-Schicht erforderlich (Simulationsprozess, z.B. Berechnung der numerischen Lösung)
- die Software muss die Eingabedaten und die Ergebnisse aus der Verarbeitung präsentieren können, womit eine Präsentationsschicht erforderlich ist (z.B. Pre- und Postprocessing)

Ein weit verbreitetes Entwurfsmuster ist das Model-View-Controller-Prinzip (Krasner, et al., 1988), welches bereits in den 1980er Jahren entwickelt wurde und heute in verschiedenen Implementierungsstufen existiert (MVVM: Model-View-ViewModel, MVP: Model-View-Presenter). Die funktionale Trennung des Quellcodes steht dabei im Vordergrund, um Abhängigkeiten zwischen den Anwendungsschichten zu minimieren. Gleichzeitig bewirkt dies eine bessere Testbarkeit einzelner Funktionsgruppen, da potentielle Fehler in dem sonst mitzuführenden Overhead an Programmquellcode keinen Einfluss auf das Testergebnis haben.

4.2 Datenbankkonzept

Bei der Wahl des zugrundeliegenden Datenbankverwaltungssystems stand neben einer einfachen Handhabung und Verfügbarkeit auch eine weite Verbreitung maßgeblich im Vordergrund. Ein dedizierter Server zur Datenbankverwaltung sollte nicht erforderlich sein, da dieser den administrativen Aufwand erhöht. Das von der Firma Microsoft vertriebene Access erfüllt die wesentlichen Voraussetzungen an diese Forderungen. Die Datentabellen können prinzipiell von jedem Nutzer über die grafische Benutzeroberfläche eingesehen und untereinander verknüpft werden, es ist weit verbreitet und für kleine bis mittlere Datenmengen ausreichend leistungsfähig. Es ist kein Datenbankserver für den Betrieb erforderlich, da es sich um eine Desktopanwendung handelt, jedoch kann MS Access als Front-End für SQL-Server-Installationen verwendet werden.

Die Datenabfragen (grundsätzlich ist damit auch die Speicherung von Daten gemeint) werden in SQL erstellt, ebenso sind automatische Berichte (Reports) möglich. Ein großer Vorteil im Hinblick auf die Verwendung in der Entwicklung ist die sehr gute Einbindung in das .NET-Framework, welches über den optimierten JET-Treiber einen relativ schnellen Datenaustausch (lesend und schreibend) ermöglicht. Zudem ist durch Spracherweiterungen im .NET-Framework (Linq und LinqToSQL) ein Objekt-relationaler Mapper implementiert und eine nahezu vollständig objektorientierte Ausführung von relationalen Datenbankab-

fragen direkt im Quellcode möglich, sodass das Fehlerpotenzial aufgrund der automatischen Überprüfungen durch den Compiler deutlich verringert wird.

Um die Verarbeitungsgeschwindigkeit im Zusammenhang mit den Modelldaten zu erhöhen und deren Verwaltung (Abfrage und Ablage) im Hauptspeicher des Rechners zu vereinfachen, wurde bei der Entwicklung eine Hauptspeicherdatenbank implementiert. Realisiert wurde dies auf Basis der Dataset-Klasse, welche grundsätzlich als Abbild einer physischen Datenbank beschrieben werden kann.

4.2.1 Verwaltung der Projektdaten

Die Datenhaltung im Programm PCSiWaPro erfolgt basierend auf Projekten und Varianten. Projekte bezeichnen die oberste hierarchische Ebene. Grundsätzlich sind mehrere Projekte in einer Datenbank zulässig, jedoch bietet sich eine projektbezogene Datenhaltung an. Jedem Projekt können wiederum mehrere Varianten zugeordnet sein, jede Variante ausschließlich einem Projekt. Eine Variante besteht wiederum aus den eigentlichen Modelldaten. Die Zuordnung erfolgt durch datenbankseitig vergebene, eindeutige Projekt- und Variantenummern (Primär- und Fremdschlüssel) auf Basis einer 1:n-Verknüpfung⁴, welche die Modelldaten eindeutig kennzeichnet.

4.2.2 Softwarestruktur zur Verwaltung der Projektdaten

Der objektorientierte Ansatz bei der Entwicklung der GUI erfordert die Bereitstellung von Klassen, aus denen die Objekte instanziiert werden. Klassen bestehen neben den Daten auch aus Mitgliedern (Member), welche sich in Eigenschaften (Properties) und Methoden (Funktionen) unterteilen lassen. In Abbildung 3 ist die Klassenstruktur zur Verwaltung der Modelldaten dargestellt. Die blau hinterlegten Felder „Projektdatenbank“ und „Systemdatenbank“ im linken Teil der Grafik repräsentieren die physische Datenbank (Datei) als Datencontainer auf dem Datenträger. Programmtechnisch werden diese durch die Klassen „clsSpeicherDB“, „clsDatenbank“, „clsSprachDB“, „clsSystemDB“ sowie „RAMDB“ abgebildet, dargestellt durch die grau gefärbten Felder in der Mitte der Grafik. Die Klasse „RAMDB“ stellt den eigentlichen Datencontainer für die Modelldaten dar und enthält untereinander verknüpfte Tabellen (blau eingefärbte Felder oben rechts). Bedingt durch die Zahl an Tabellen zeigt Abbildung 4 nur einen Auszug des Datenbankschemas aus der Projektdatenbank. Erkennbar sind jedoch die Verknüpfungen der Tabellen mit dem Typ 1:n, die durch Normalisierung der Daten entstehen.

⁴ Der Ausdruck 1:n wird gelesen als „1 zu n“ und besagt, dass ein Datensatz in der Primärtabelle mit beliebig vielen Datensätzen in der Sekundärtabelle verknüpft sein kann.

Für eine eingehendere Beschreibung der Datenbankklassen und -tabellen sei auf die Anhänge 8.1 und 8.2 verwiesen.

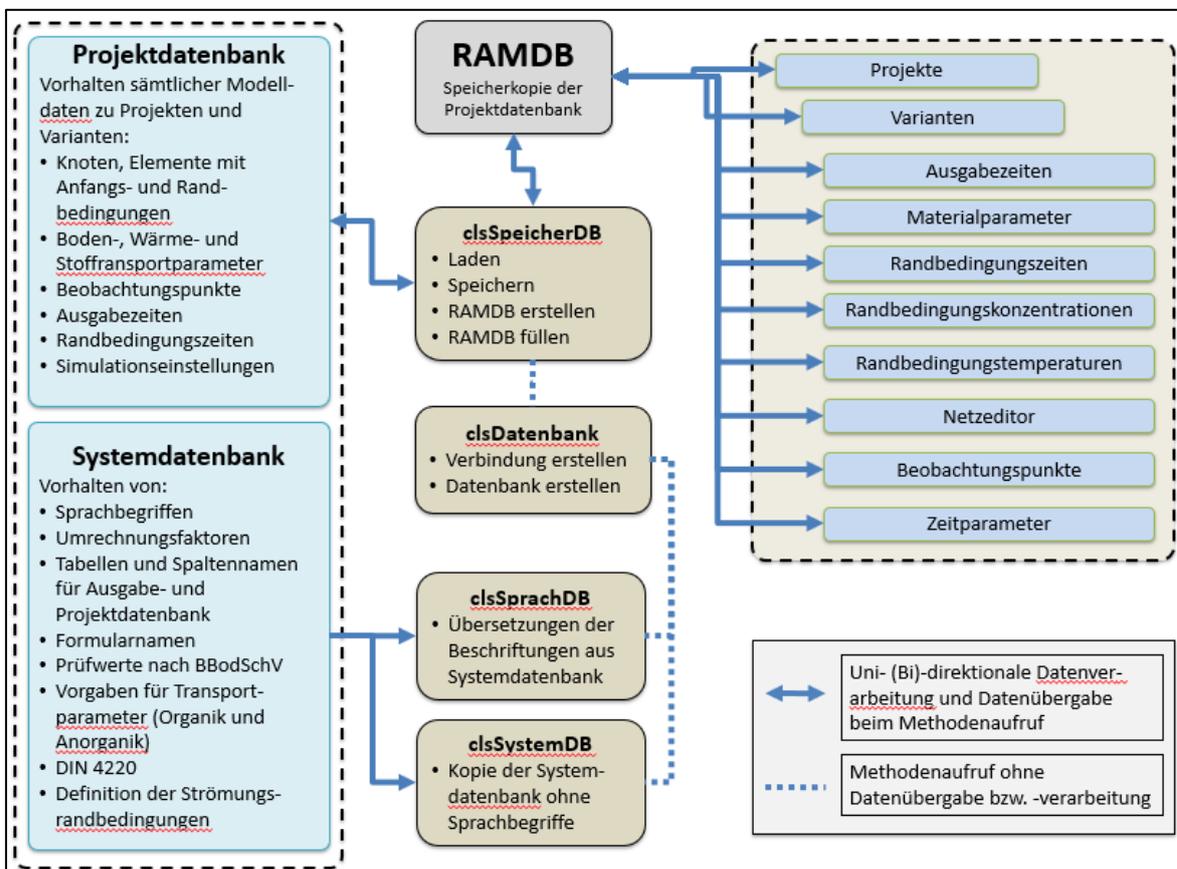


Abbildung 3: Softwaredesign zur Datenbankverwaltung (Projektdatenbank). In dem Punkt „Materialparameter“ sind bodenhydraulische und stoffabhängige Parameter zusammengefasst.

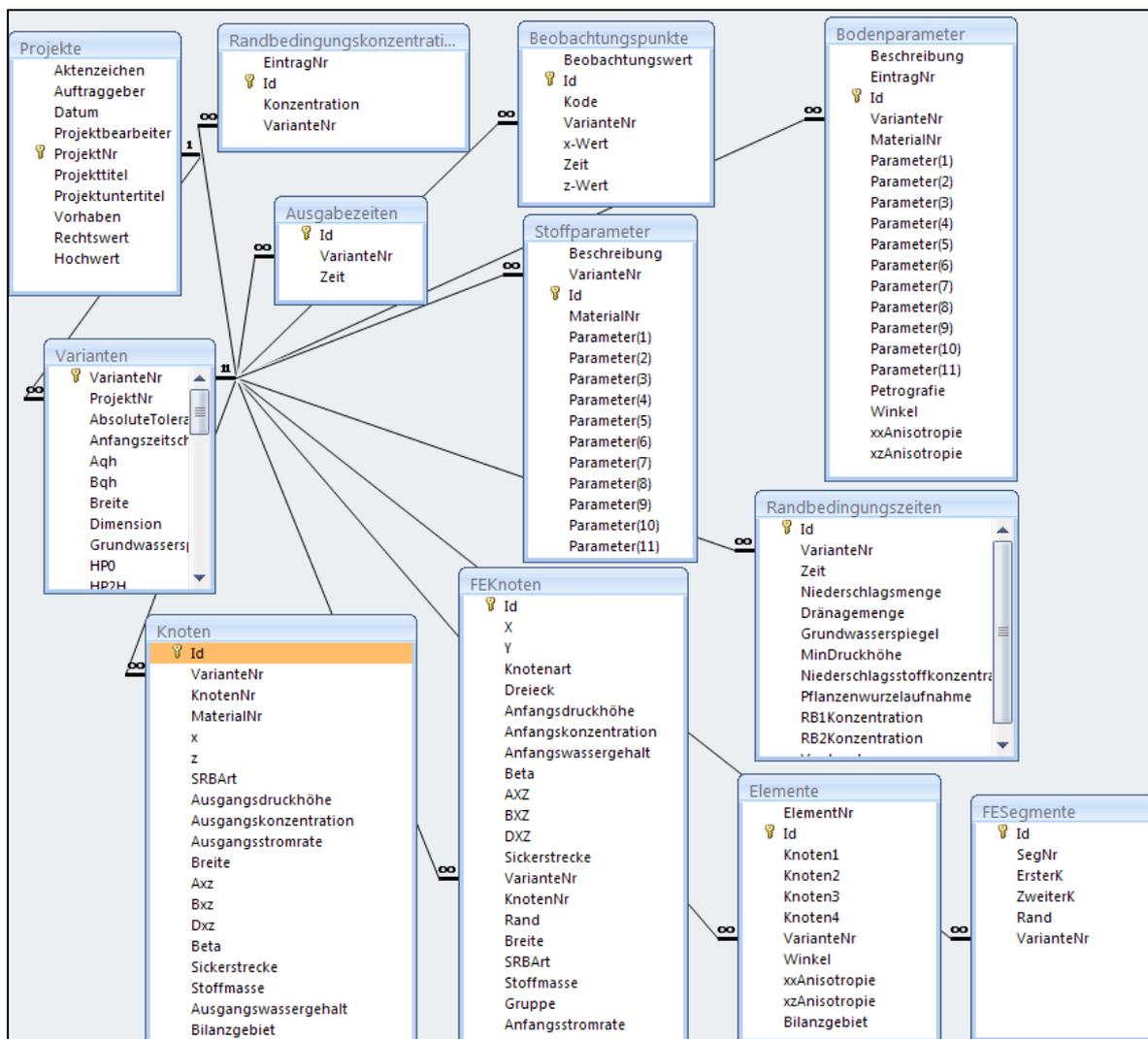


Abbildung 4: Datenbankschema mit den Relationen der Tabellen in der Projektdatenbank (Auszug)

4.2.3 Systemdatenbank

Die Systemdatenbank enthält Daten, die für die Ausführung von PCSiWaPro erforderlich sind. Neben Maßeinheiten für Länge, Zeit und Masse (mit entsprechenden Umrechnungsfaktoren) sind unter anderem die Übersetzungen für die Spracheinstellungen, Grenzwerte für Prüfwerte einzelner Stoffe nach Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) (Verbraucherschutz, 1999) und die bodenhydraulischen Parameter der DIN 4220 enthalten. Weitere wichtige Tabellen sind die Definitionen der Tabellenspalten, Datentypen und Beziehungen für die im vorigen Abschnitt beschriebene Speicherdatenbank „RAMDB“, welche letztlich die Modelldaten enthält. Die Struktur der „RAMDB“ wird beim Programmstart aus den in der Systemdatenbank enthaltenen Informationen erstellt und erst anschließend mit den Daten gefüllt.

In Abbildung 5 sind die in der Datenbank implementierten Tabellen aufgeführt. Weiterführende Informationen dazu finden sich im Anhang 8.3. Soweit es möglich und erforderlich war, wurde auch hier das Prinzip der relationalen Datenbank umgesetzt.

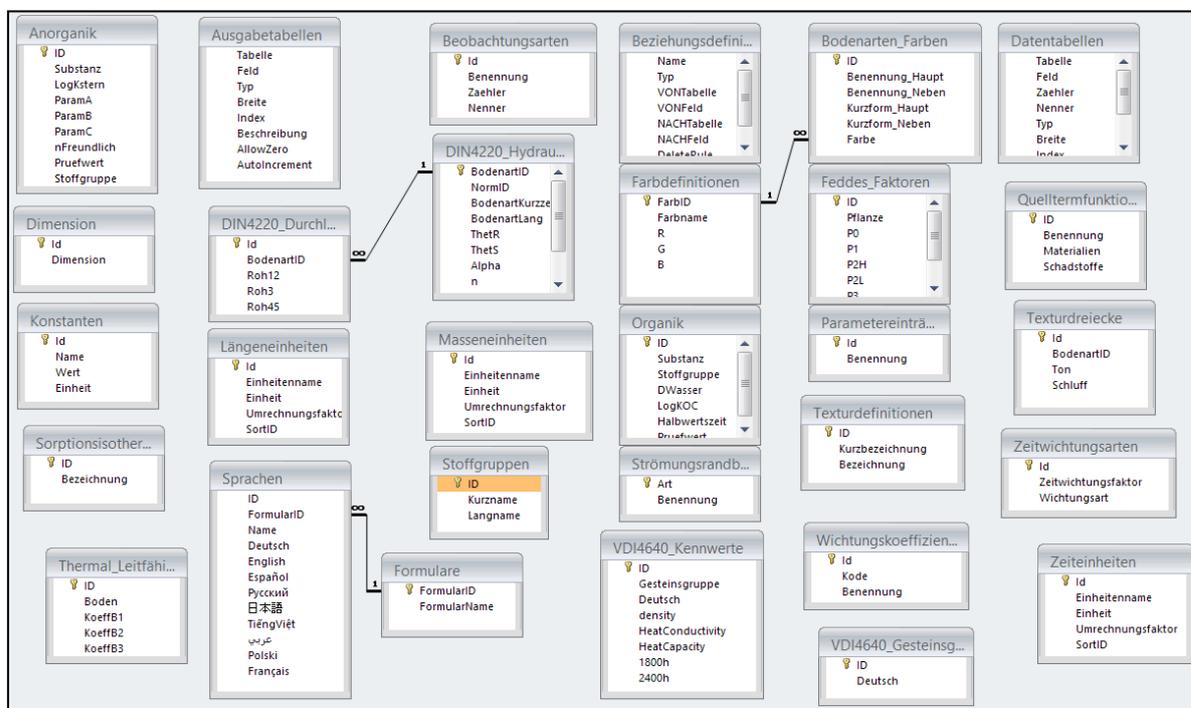


Abbildung 5: Datenbankschema mit den Tabellen und Beziehungen der Systemdatenbank

4.2.4 Ausgabedatenbank

Die bei der Simulation berechneten Daten werden in einer Datenbank gespeichert und entsprechend ihrer Zuordnung in verschiedenen Tabellen abgelegt. Diese Tabellen weisen keine Verknüpfungen untereinander auf und stehen daher in keiner Relation zueinander. Trotzdem ist die Speicherung der Simulationsdaten in einer Datenbank sinnvoll, da sämtliche Daten strukturiert in einer Datei abgelegt werden. Die Ausgabedatenbank dient der Dokumentation der Simulationsergebnisse. Darin werden relevante Informationen über den zeitlichen und räumlichen Verlauf der Simulation und Ergebnisse an den jeweiligen Netzknoten eingetragen. Die Datenbank besteht grundsätzlich aus 6 Tabellen, in welche die entsprechenden Daten abgelegt werden:

- Ergebnisse
- Laufzeitinformationen
- Randbedingungen
- Simulationslaufkennung

- Beobachtungspunkte
- Protokolleinträge

Der Inhalt der Tabellen bzw. die Benennung der Spalten kann aus Abbildung 6 entnommen werden. Weitere Erläuterungen zu den Tabellen sind im Anhang, Abschnitt 8.4, aufgeführt.

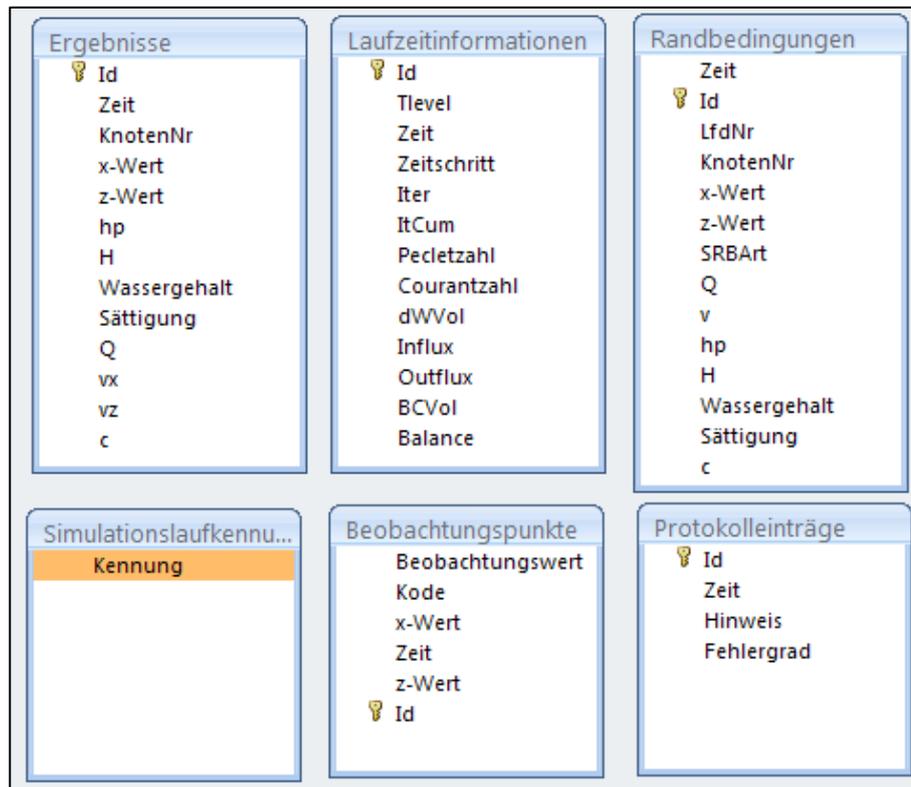


Abbildung 6: Schema der Ausgabedatenbank

4.3 Benutzeroberfläche für das Preprocessing

Die grafische Benutzeroberfläche (GUI – Graphical User Interface) stellt die Schnittstelle zwischen dem Anwender und der Programmlogik dar. Eine wesentliche Funktion der GUI ist die Benutzerführung, indem komplexe Abläufe in thematische Abschnitte separiert werden und der Nutzer gezielt und in der notwendigen Abfolge durch die Teilbereiche geführt wird. Am Beispiel eines Modellaufbaus mit PCSiWaPro sind derartige Abschnitte typischerweise:

- Festlegen der Eigenschaften des Modells (Einheiten, Prozesse, numerische Einstellungen)
- Durchführung der Modellquantisierung und Netzgenerierung
- Parametrisierung der hydraulischen Eigenschaften

- Definition der Randbedingungen (Lage und Art)
- Vorgabe der Rand- und Anfangswerte
- Angaben zur Ergebnisspeicherung
- Angaben zu Messwerten

Eine weitere Funktion ist die Präsentation existierender Modelldaten und die Erfassung neuer Daten durch den Anwender. Grundsätzlich ist ein Modellaufbau auch ohne GUI möglich, jedoch ist dieser Vorgang ohne visuelle und programmtechnische Kontrolle fehleranfällig und bei Modellen mit komplexer Geometrie, vielen Bodenschichten oder vielfältigen Randbedingungen praktisch nicht möglich. Darüber hinaus können Fehler bereits direkt bei der Datenerfassung durch ereignisbasierte Validierungstests (Syntax- und Formatprüfung) vermieden werden. Beispielsweise ist durch Verwendung typgebundener Felder nur die Eingabe numerischer Werte möglich, die in einer zusätzlichen Einschränkung nur einen bestimmten, z.B. physikalisch begründeten, Wertebereich zulassen.

Dieser Abschnitt beschreibt die wesentlichen Dialogfelder und Eingabemasken, welche für den GUI-gestützten Modellaufbau existieren. Für Abbildungen und Erläuterungen, die aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht hier dargestellt werden, sei auf den Anhang 8.5 verwiesen.

4.3.1 Eingabedialoge

Die in PCSiWaPro implementierten Anwenderdialoge setzen auf dem Datenbankkonzept (Abschnitt 4.2) auf und stellen spezifische Eingabefelder bereit. Die für ein vollständiges, datenadäquates Modell erforderlichen Daten sind in verschiedene Bereiche gegliedert und baumartig dargestellt. Ausgehend von einem Projekt als Wurzel, erfolgt eine Verzweigung in mindestens eine Variante. Mehrere Varianten pro Projekt sind möglich. Zu jeder Variante existieren wiederum Eingabedaten, welche in der Hierarchie die gleiche Ebene aufweisen. Datenbankseitig ist damit immer eine eindeutige Zuordnung gegeben. In Abbildung 7 ist die Hierarchie schematisch dargestellt. Zu jedem aufgeführten Punkt existiert mindestens ein Dialogfenster.

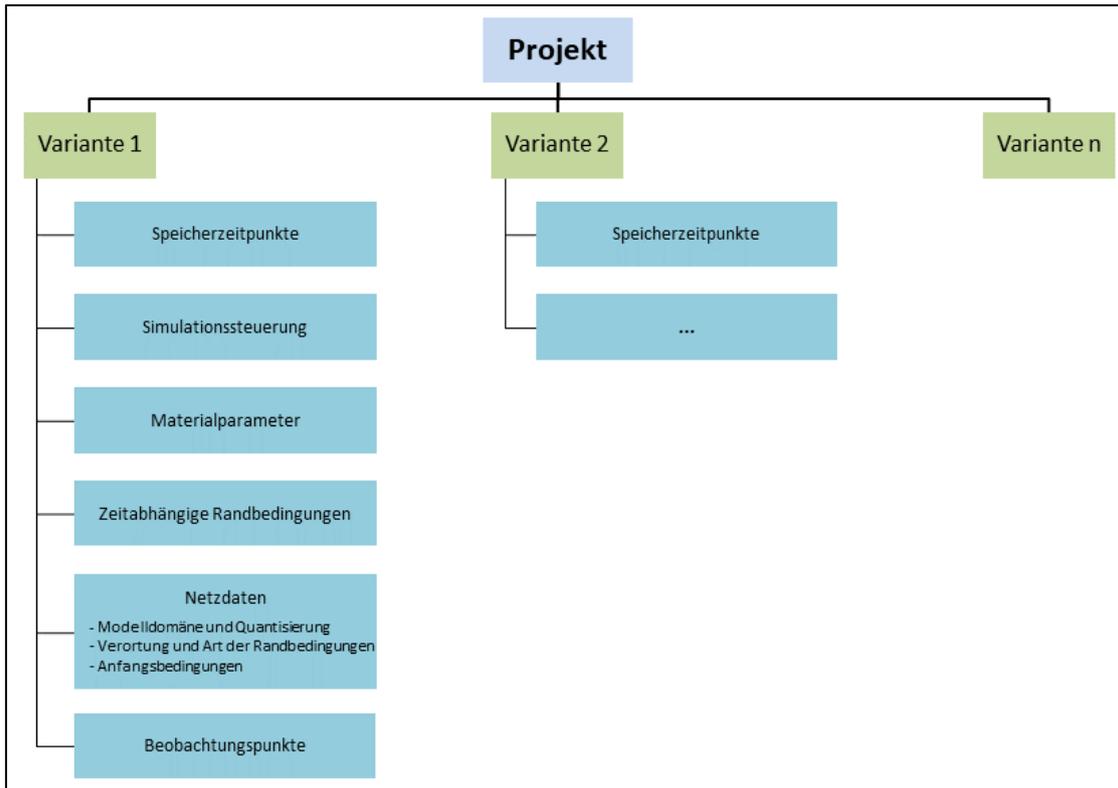


Abbildung 7: Datenhierarchie und Gruppierung

4.3.1.1 Dialogfenster Projekt

Das Dialogfenster erfasst projektbezogene, allgemeine Informationen, die zur Verwaltung verwendet werden können. Es werden keine Daten erfasst, welche zur Modellbildung erforderlich sind.

4.3.1.2 Varianteninformationen

In diesem Anwenderdialog (Abbildung 8) werden die wesentlichen Modelloptionen definiert. Neben der Variantenbezeichnung werden zusätzlich Speicherverzeichnis, Einheiten, Dimension und Prozessoptionen (Zeitabhängigkeit der Randbedingungen, Stofftransport, Berücksichtigung von Pflanzenwurzeln) definiert. Die in diesem Dialog vorgenommenen Einstellungen wirken sich auf den weiteren Modellaufbau aus, da die zu erfassenden Modelldaten davon abhängen.

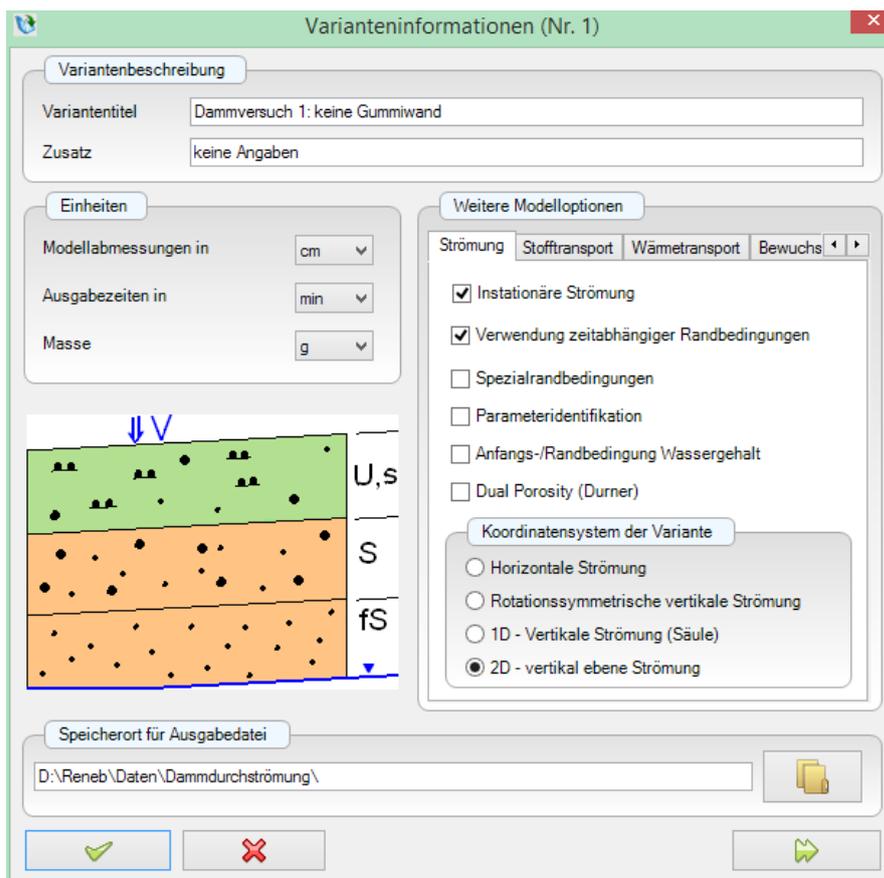


Abbildung 8: Dialogfenster zur Definition der Modelloptionen

4.3.1.3 Speicherzeitpunkte

In diesem Fenster werden die Zeitpunkte definiert, an denen PCSiWaPro berechnete Modellergebnisse speichern soll. Nur diese Ergebnisse stehen im Postprocessing zur Auswertung zur Verfügung.

4.3.1.4 Simulationssteuerung

In diesem Dialogfeld werden Optionen vorgegeben, welche die Steuerung der numerischen Lösung der RICHARDS- und Stofftransportgleichung ermöglichen. Die Einstellungen umfassen die Zeitschrittweitensteuerung und Iterationskriterien sowie spezifische Optionen für den Stofftransport: Stabilitätskriterium und Verfahren zur Verringerung von Oszillationen.

4.3.1.5 Materialparameter

Das Fenster umfasst die Definition der hydraulischen und stoffspezifischen Parameter für jede Bodenschicht. Im Abschnitt Hydraulik werden die Graphen der Retentionsfunktion sowie der Funktion der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit dargestellt, die unmittelbar aus den Nutzereingaben errechnet werden. Als Hilfsmittel zur Parameterabschätzung

stehen die Werte nach DIN 4220 (DIN 4220:2008-11, 2008) sowie Pedotransferfunktionen (Vereecken, et al., 1989) zur Verfügung.

Sind bei den Modelloptionen Stofftransport, kinetische Sorption oder Berücksichtigung von Pflanzenwurzeln ausgewählt, werden zusätzliche Reiter mit entsprechender Beschriftung eingeblendet, die die Definition der erforderlichen Parameter ermöglichen. Zur visuellen Kontrolle der Eingabedaten und zur einfachen Abschätzung der Wirkung in der Simulation werden für die Sorptionsisothermen und die Parameter zur Beschreibung der Wasseraufnahme durch Pflanzenwurzeln entsprechende Funktionsgraphen berechnet und in Diagrammen dargestellt (siehe Anhang, Abschnitt 8.5.4).

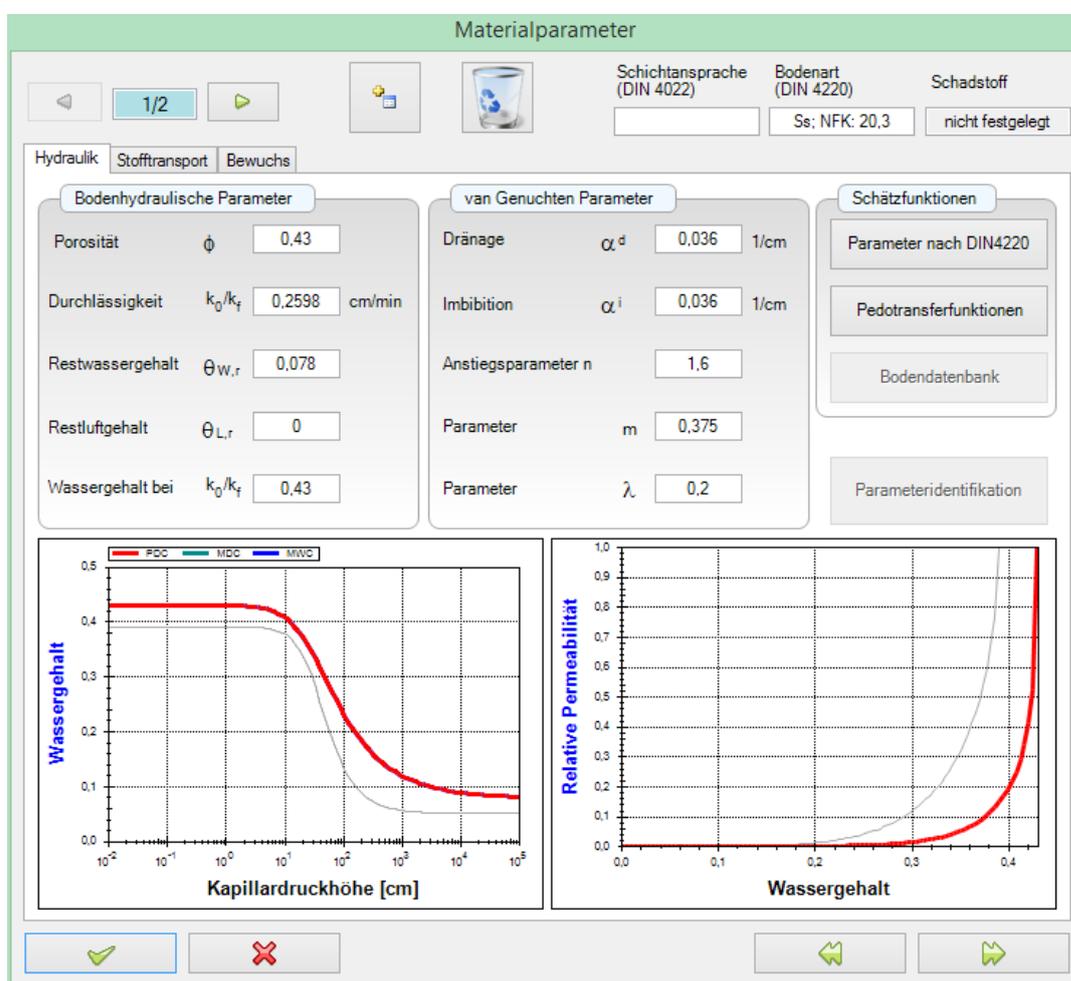


Abbildung 9: Definition der hydraulischen Parameter

4.3.2 Zeitabhängige Randbedingungen

Die Möglichkeit der zeitvariablen Vorgabe von Randbedingungen für Wasserhaushalt und Stofftransport erfolgt in Form von Zeitreihen. Die Zeitpunkte, an denen Randbedingungs-

werte definiert werden, können ein beliebiges Intervall aufweisen und theoretisch in unbegrenzter Anzahl vorgegeben werden.

4.3.3 Netzgenerator und Randbedingungseditor

Zentraler Bestandteil des Modellaufbaus ist die Definition des Modellgebiets, Quantisierung des Modells sowie die Belegung des quantisierten Modells mit Anfangs- und Randbedingungen. Bei Verwendung einer GUI erfolgen diese Schritte zumeist grafisch interaktiv und ermöglichen eine sofortige visuelle Kontrolle durch den Anwender. Im Programm PCSiWa-Pro existiert dazu ein entsprechendes Werkzeug, welches einen Netzgenerator sowie einen Randbedingungseditor kombiniert. Der Netzgenerator erlaubt die grafische Eingabe der Modellränder, führt die Quantisierung mit Hilfe einer DELAUNAY-Triangulation (Geuzaine, et al., 2009) aus und stellt schließlich das Finite-Elemente-Netz grafisch dar. Die aus der Triangulation resultierenden Dreieckselemente stellen somit immer eine zweidimensionale Quantisierung dar.

Die Definition der Rand- und Anfangsbedingungen erfolgt ebenfalls über diese Eingabemaske. Grundsätzlich ist hierbei in Strömungs- und Transportprozess zu unterscheiden.

Die Anfangsbedingungen für den Strömungsprozess können als Druckhöhe oder als Wassergehalt vorgegeben werden. Für den Transportprozess wird die Konzentration in der gelösten Phase als Anfangsbedingung definiert.

Die Zuweisung der Randbedingungen ist für den Strömungsprozess separiert in Typ 1 und 2 (entspricht 1. und 2. Art), jeweils zeitkonstant oder -variabel. Für den Transportprozess können Randbedingungen der 1., 2. sowie 3. Art definiert werden, ebenfalls zeitkonstant oder -variabel.

4.3.4 Assistent zur Sickerwasserprognose

Grundsätzlich erfordert die sichere Bedienung eines numerischen Simulationsprogramms ein hohes Maß an Einarbeitungszeit und ist mit einer steilen Lernkurve verbunden. Darüber hinaus sind fundierte Kenntnisse über die betrachteten Prozesse notwendige Voraussetzung für Simulationsergebnisse, die zu belastbaren Aussagen führen und damit eine weitergehende Verwendung zu Planungs- oder Steuerungszwecken erst ermöglichen. Hinzu kommen die bei numerischen Simulationsprogrammen häufig auftretenden Probleme durch Oszillationen und Divergenzen beim Lösen der Gleichungssysteme oder auch durch hohe Sensitivitäten der Eingangsparameter auf das Simulationsergebnis.

Die Verwendung von Assistenten bietet bei der Bedienung eines Programms gewisse Vorteile:

- Dem Anwender werden schrittweise alle erforderlichen Eingabemasken angezeigt
- Nachträgliche Änderungen sind durch Zurückgehen in einen vorangegangenen Arbeitsschritt jederzeit möglich
- Erforderliche Eingabefelder sind mit sinnvollen Daten vorbelegt
- Durch Beschränkung auf zunächst einfache Probleme können Eingabefehler vermindert oder gar vermieden werden

In das Programm PCSiWaPro wurde ein Assistent implementiert, der den Nutzer in 5 Schritten durch den Modellaufbau bis zum Simulationsergebnis führt. Es entsteht hierbei immer ein Quasi-1D-Vertikalmodell (Säulenversuch, Lysimeter). Die durchzuführenden Schritte umfassen:

1. Import der Bodenschichten und Aufbau der Modellgeometrie

Anzahl und Mächtigkeit werden beim Import aus einer Aufschlussdatenbank (aus der Bohr- und Aufschlussdatenverwaltung GeODIN (Fugro, 2014)) bestimmt. Die Quantisierung erfolgt mit einem regelmäßigen Vierecksgitter mit sehr geringer horizontaler Ausdehnung (quasi 1D), Geländeoberkante sowie Gesamtmächtigkeit des entstehenden Modells können vom Anwender vorgegeben werden.

2. Definition der bodenhydraulischen Parameter

Für jede Bodenschicht sind vom Anwender die Parameter zur Beschreibung der hydraulischen Eigenschaften der einzelnen Bodenhorizonte anzugeben. Die Eingabemaske ist mit sinnvollen Werten vorausgefüllt. Zusätzlich stehen dem Anwender weitere Hilfsmittel zur Abschätzung zur Verfügung: Parameter aus der DIN 4220 (DIN 4220:2008-11, 2008) sowie Pedotransferfunktionen (Vereecken, et al., 1989).

3. Angabe der Strömungsrandbedingungen

Durch die Beschränkung der Modelldimension auf quasi eine Dimension ist nur die Definition der Randbedingung an der oberen sowie unteren Modellberandung erforderlich. Für die obere Berandung ist immer ein Volumenstrom zu definieren. Es kann zwischen zeitkonstanter und zeitvariabler Vorgabe der Werte gewählt werden. Der Zustrom entspricht dabei der Grundwasserneubildung, da keine Lateralabflüsse, hypodermischer Abfluss usw. existieren. Neben der direkten Vorgabe eines Mittelwerts können mithilfe eines Zeitreihengenerators (Wettergenerator WettGen) aus (Nitsch, et al., 2007) sowohl eine mittlere Grundwasserneubildungsrate als auch zeitvariable Werte abgeschätzt werden. Neben realen Klimazeitreihen gehen dabei

auch standortbezogene Daten wie Exposition und Neigung in die Berechnung ein. Die Simulation von Worst-Case-Szenarien ist damit ebenfalls möglich.

Die Randbedingung am unteren Modellrand wird bei Verwendung des Assistenten immer als zeitkonstant erster Art definiert, um die Grundwasseroberfläche zu simulieren.

4. Definition der Transportparameter

Für jede Bodenschicht sind entsprechende Transportparameter zu definieren. Dabei ist die Vorgabe auf die Parameter Trockenrohdichte, Sorptionskennwerte sowie Abbaurrate in der fluiden Phase begrenzt. Zusätzlich kann zur Abschätzung der Parameter eine implementierte, einfache Stoffdatenbank aufgerufen werden.

5. Angabe der Randbedingungen für die Transportsimulation als Quellterm

Der letzte Schritt des Assistenten im Preprocessing umfasst die Definition der Randbedingungen für den Transportprozess an der oberen und unteren Berandung des Modellgebiets. Die Randbedingungsart am oberen Modellrand wird von der Zeitabhängigkeit der dort wirkenden Strömungsrandbedingung festgeschrieben. Ist diese beispielsweise zeitkonstant, kann die Transportrandbedingung auch nur zeitkonstant definiert werden. Für den Fall der zeitvariablen Vorgabe, kann ein exponentielles Abfallen der Eingangskonzentration vorgegeben werden, um ein Abklingen der Stoffquelle abzubilden. Für den unteren Modellrand wird bei Verwendung des Assistenten immer eine zeitkonstante Randbedingung 3. Art vorgegeben.

Das Modellgebiet wird dabei grundsätzlich als Bodensäule generiert und die Wahl der möglichen Randbedingungen für die Strömungs- und Transportberechnung ist auf sinnvolle Vorgaben beschränkt.

Als Ergebnis der Simulation wird ein Protokoll (Abbildung 10) erstellt, in welchem die Eingangsdaten (Boden- und Transportparameter, Schichtverteilung und Randbedingungen) sowie die Ergebnisse (Konzentration und Fracht am Ort der Beurteilung) in grafischer und tabellarischer Form aufgeführt sind. Das Layout der Schichtenfolge orientiert sich an dem durch den Assistenten erzeugten Modellaufbau in Form einer Bodensäule. Grundsätzlich sind auch Modelle mit allgemeiner Geometrie durch das Protokoll darstellbar, die Repräsentation als Bodensäule ändert sich hierdurch nicht.

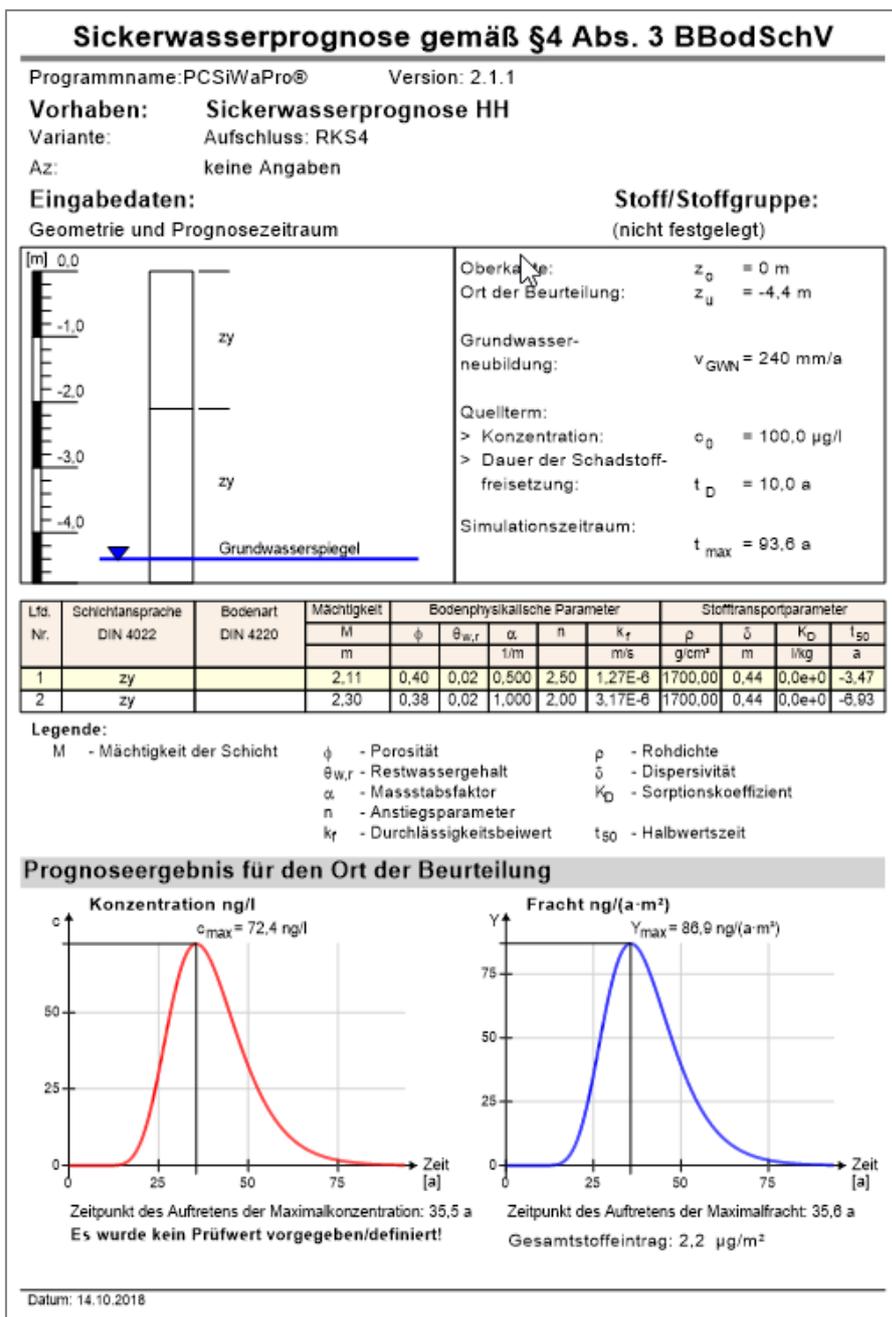


Abbildung 10: Protokoll der Eingabe- und Ergebnisdaten eines Modells

4.4 Ergebnisvisualisierung und Postprocessing

Neben der Speicherung der Simulationsergebnisse in der Ausgabedatenbank ist für eine adäquate Bewertung des Modells auch eine Visualisierung der Modellergebnisse erforderlich, oft in Verbindung mit Animation. Damit ist nicht nur die Darstellung von Durchbruchkurven (Durchflussraten, Frachten und dergleichen) verbunden, sondern auch die räumliche Verteilung der berechneten Größen (z.B. Druckhöhe, Wassergehalt, Sättigungsgrad, Konzentration) zu einem Simulationszeitpunkt (vor allem bei instationärer Betrachtung) im Modellgebiet. Im Programm PCSiWaPro wurden drei Ansätze implementiert, die jeweils für

einen Anwendungszweck konzipiert wurden. Für einen ersten Ergebnisüberblick bereits während der Simulation existiert eine Online-Grafik, die in vom Anwender definierbaren Zeitintervallen die aktuellen Simulationsergebnisse darstellt. Für einfache, zeitabhängige Visualisierungen nach Beendigung der Simulation wurde ein interner Viewer implementiert, der die Anzeige der räumlich verteilten Modellergebnisse zu verschiedenen Speicherzeitpunkten ermöglicht. Für weitergehende Visualisierungen bis hin zur Erstellung von Animationen und Videos wurde eine Ausgabeschnittstelle zur Open-Source-Software GMSH (Remacle, et al., 2007) und (Geuzaine, et al., 2009) entwickelt. Die genannten Ansätze werden in den folgenden Abschnitten detaillierter beschrieben. Da alle Simulationsergebnisse in Datenbank- bzw. Tabellenform vorliegen, kann mit jedem Tabellenkalkulationsprogramm oder anderer Grafiksoftware, bspw. auch GIS-Programmen, eine Auswertung vorgenommen werden. Mit Hilfe von Microsoft Access und einigen Standard-SQL-Abfragen können weiterführende Auswertungen erfolgen. Auch die Überführung in andere Datenformate (z.B. ASCII-Dateien) ist möglich.

4.4.1 Online-Grafik während des Simulationslaufs

Die Darstellung der Ergebnisse beinhaltet folgende Daten:

- Anzeige von Isolinien, Beobachtungspunkten, berechneten Werten an den Beobachtungspunkten, Konzentration, Wassergehalt, Druckhöhe, Wassersättigung im Modellgebiet (z.B. Abbildung 11)
- Getrennte Darstellung für Strömung/Transport mit Farbskalierung und Anzeige einer Legende
- Zusätzlich bei Transportberechnung: Anzeige von Durchbruchkurven für nutzerdefinierte Vorgaben (RB-Art): Ausgabe von Konzentration und Fracht; Summation der Fracht (siehe Abbildung 12)

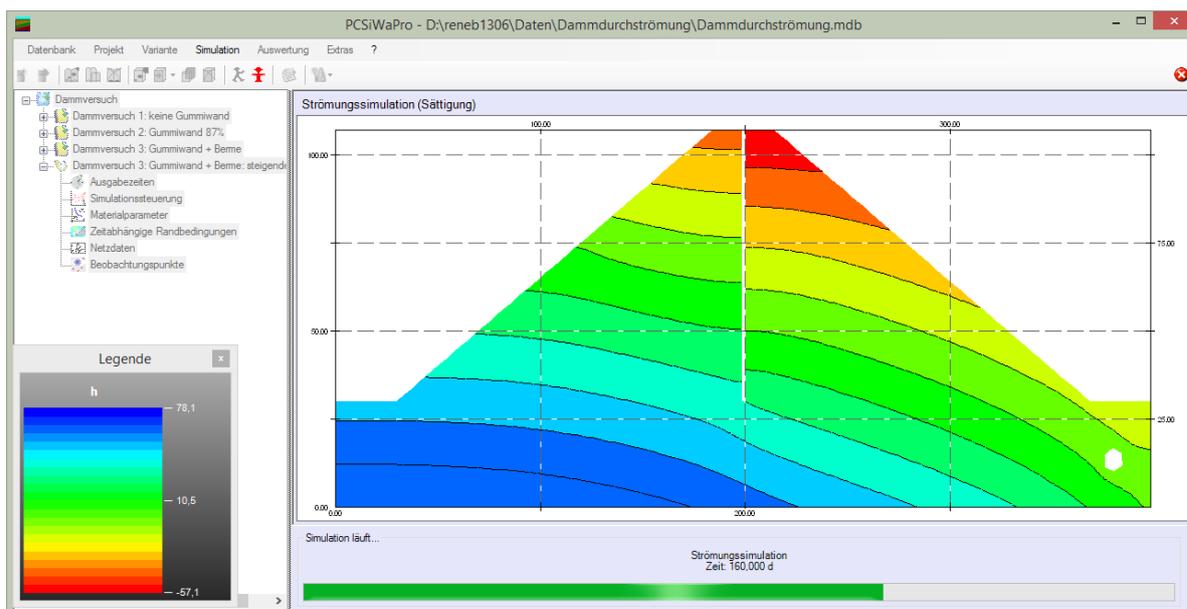


Abbildung 11: Darstellung der Online-Grafik für ein Strömungsmodell anhand der Druckhöhenverteilung in einem Dammkörper. Die weiße, runde Fläche am rechten Rand des Damms repräsentiert den Querschnitt einer Drainage zur Abführung überschüssigen Wassers. Siehe auch Abschnitt 5.1.

Das Aktualisierungsintervall der Anzeige kann dabei vom Nutzer über das Optionsmenü vorgegeben werden und sollte bei größeren Modellen auf längere Zeitintervalle eingestellt werden, da die Berechnung der Isoflächen und Isolinien und schließlich die Aktualisierung des Bildschirminhalts einige Zeit in Anspruch nehmen können. Die Darstellung erfolgt unter Umständen verzerrt, um den zur Verfügung stehenden Raum zur Anzeige maximal ausnutzen zu können. Farbanzahl und –modus sowie darzustellendes Berechnungsergebnis (Druckhöhe oder Wassergehalt) können ebenfalls über das Optionsmenü voreingestellt werden.

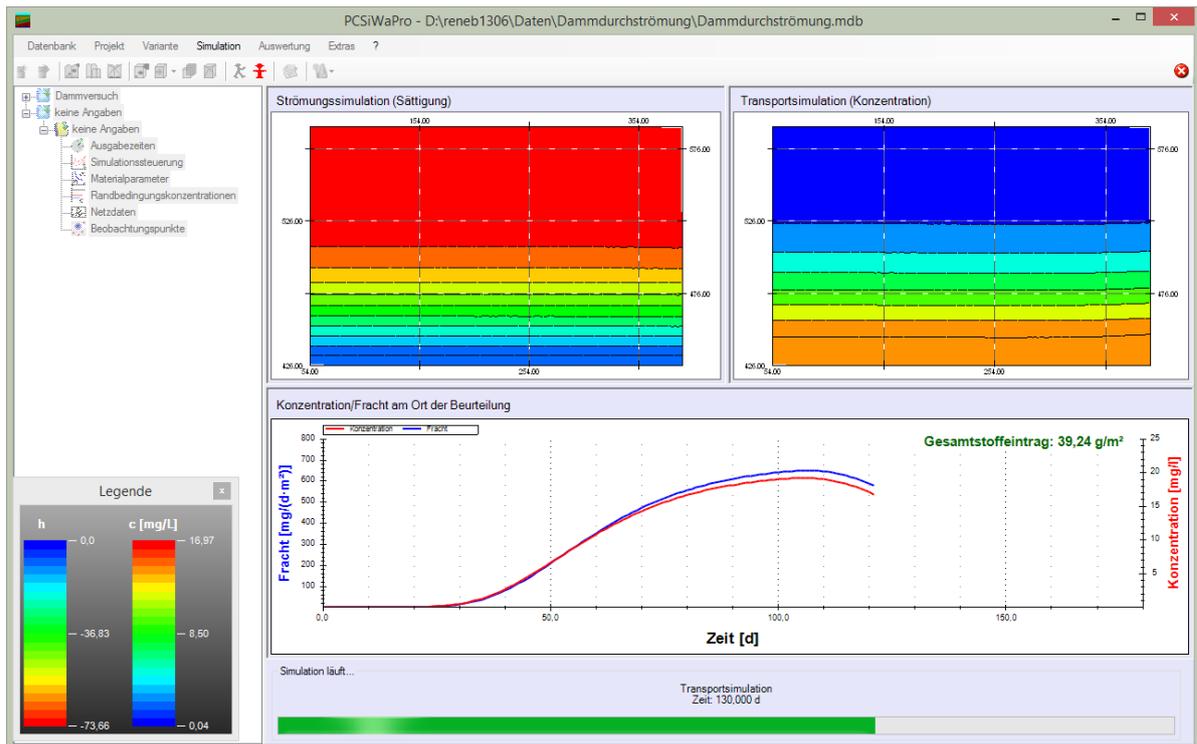


Abbildung 12: Darstellung der Online-Grafik mit Strömungs- und Stofftransport (oberer Bereich, verzerrt) sowie Anzeige der Durchbruchkurve (unterer Bereich)

4.4.2 Interner Viewer

Der interne Viewer (siehe Abbildung 13) ermöglicht die schnelle Anzeige der in der Ausgabedatenbank gespeicherten Simulationsergebnisse. Dabei können die vorhandenen Speicherzeitpunkte über einen Schieberegler angefahren werden. Weitere Möglichkeiten sind in folgender Auflistung aufgeführt:

- Anzeige von Druckhöhe, Wassergehalt, Wassersättigung, Konzentration, sorbierte Konzentration (bei Verwendung des Nichtgleichgewichtssorptionsmodells)
- Ausgabe des dargestellten Zeitpunkts als Bitmap
- Aufruf der Exportschnittstelle für GMSH

Auch hier erfolgt die Ausgabe unter Umständen verzerrt, da der zur Verfügung stehende Anzeigepplatz maximal ausgenutzt wird. Farbzahl sowie –modus werden entsprechend den Einstellungen der Online-Grafik verwendet.

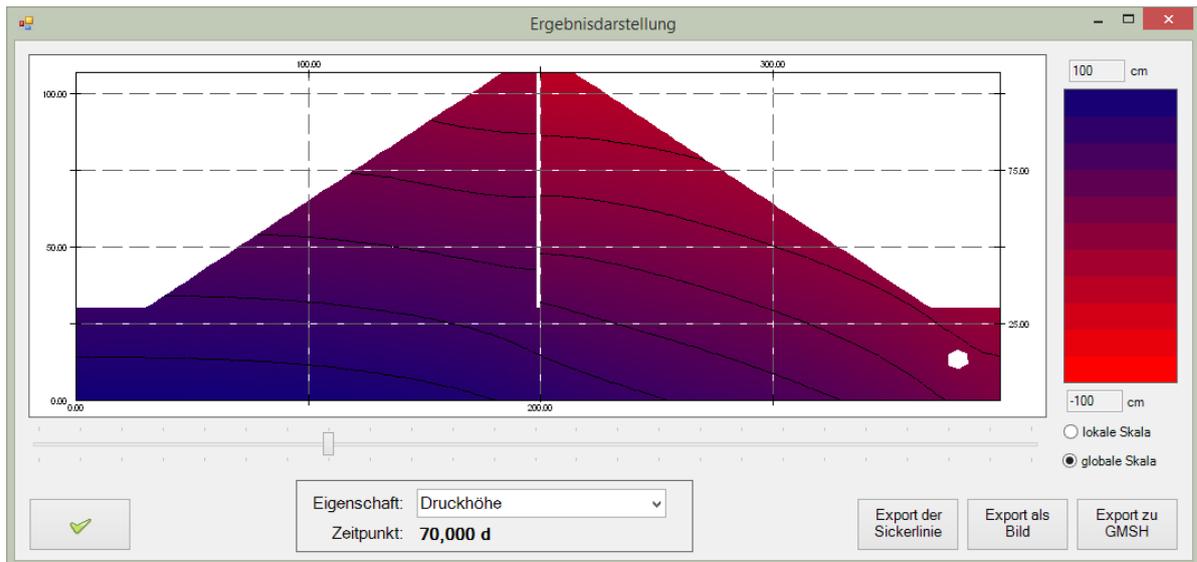


Abbildung 13: Anzeige des internen Viewers mit Beispielmodell. Dargestellter Sachverhalt analog zu Abbildung 11.

4.4.3 Hochleistungsvisualisierung mit GMSH

Die Verwendung dieses Softwarewerkzeuges hat mehrere Vorteile, welche in der folgenden Auflistung aufgeführt sind:

- Als Open-Source-Software frei verfügbar
- Verwendung eines offenen Dateiformats
- Nutzung der Leistungsfähigkeit moderner Grafikkarten (GPU) durch Verwendung von OpenGL
- Optimierte Darstellung von Ergebnissen aus Finite-Elemente-Simulationen
- Interaktive Darstellung von Simulationsergebnissen in hoher Qualität und Geschwindigkeit mit beliebigen Drehen und Zoomen des Modellgebiets auch bei komplexen Modellen (> 500.000 Knoten), z.B. Abbildung 14
- Verschiedene Ergebnisse simultan darstellbar (Wassergehalt, Druckhöhe, Geschwindigkeit als Vektor) über sogenannte Views (Abbildung 15)
- Darstellung erfolgt in der Voreinstellung grundsätzlich immer unter Einhaltung der Relationen (keine Verzerrung in x- oder z-Richtung)
- Möglichkeit der Animation sowie Ausgabe als Video bzw. Animation
- Beschriftung und Farbskala flexibel durch Anwender modifizierbar

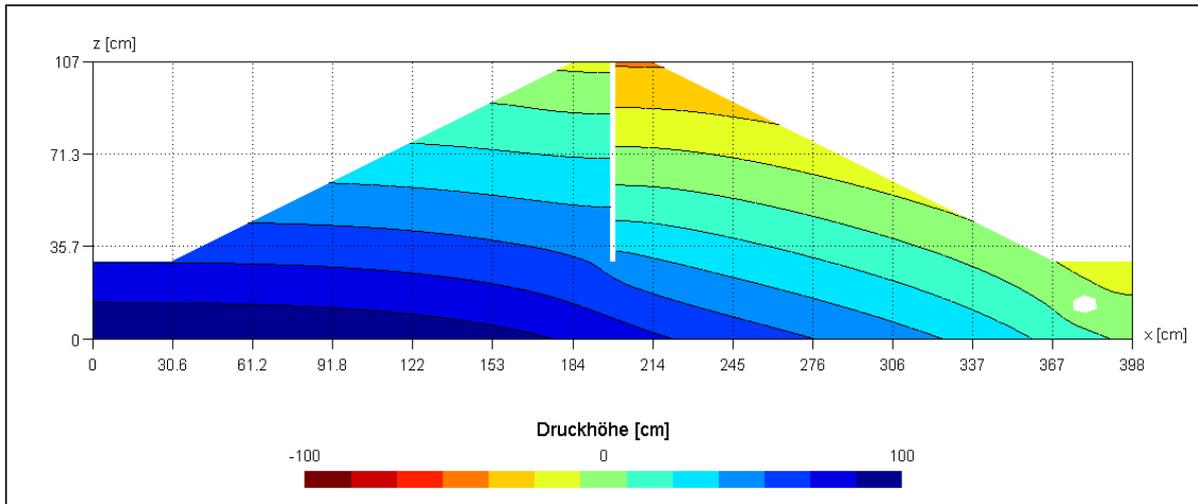


Abbildung 14: Darstellung der Druckhöhenverteilung in einem Erddamm. Sachverhalt analog Abbildung 11.

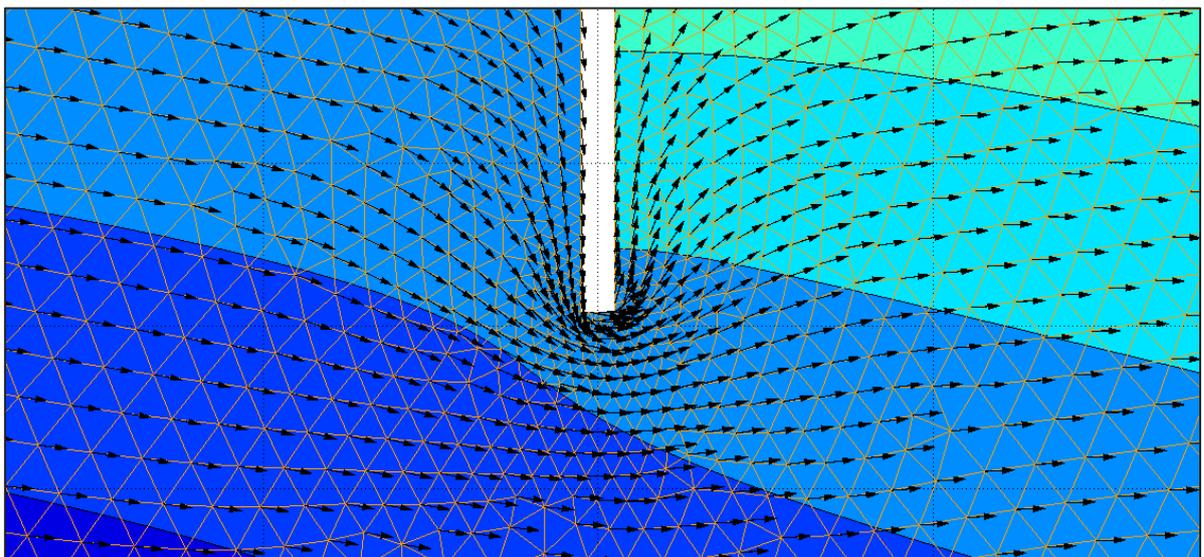


Abbildung 15: Vergrößerte Darstellung aus Abbildung 14, zusätzlich ist jedoch die Geschwindigkeit an den Knoten der Finiten Elemente als Vektorkomponente eingeblendet

4.5 Parallelisierung des Rechenkerns

Grundsätzlich ist bei parallelisierter Software die erreichbare Beschleunigung gegenüber der seriellen Ausführung entscheidend. Der ideale Beschleunigungsfaktor (Speedup) ergibt sich aus dem Quotienten der Rechenzeit nach seriellem Ansatz und der Rechenzeit mit parallelem Ansatz und ist in Gleichung (58) dargestellt.

$$S_{max} = \frac{\text{Laufzeit seriell}}{\text{Laufzeit parallel}} \quad (58)$$

Gleichung (58) geht davon aus, dass der vollständige Programmcode ohne Einschränkungen parallelisiert werden kann und kein serieller Anteil bei der Programmausführung verbleibt. Im Allgemeinen ist dies nicht möglich, sodass ein gewisser Anteil an seriell Programmcode bei der Ausführung verbleibt. (Amdahl, 1967) formuliert eine Vorschrift, die den Anteil an seriell Code berücksichtigt und damit den maximal erreichbaren Speedup begrenzt. Diese Vorschrift ist als AMDAHLsches Gesetz bekannt und wird in Gleichung (59) dargestellt:

$$S_{max} = \frac{1}{(1 - P) + \frac{P}{N}} \quad (59)$$

Darin bedeuten P der Anteil an parallelisierbarem Code und N die Anzahl zur Verfügung stehender Prozessoren. In Abbildung 16 sind beispielhaft für 2-16 verfügbare CPUs die nach Gleichung (59) erreichbaren Beschleunigungen aufgeführt, welche deutlich die Bedeutung des Anteils an parallelisiertem Code hervorheben.

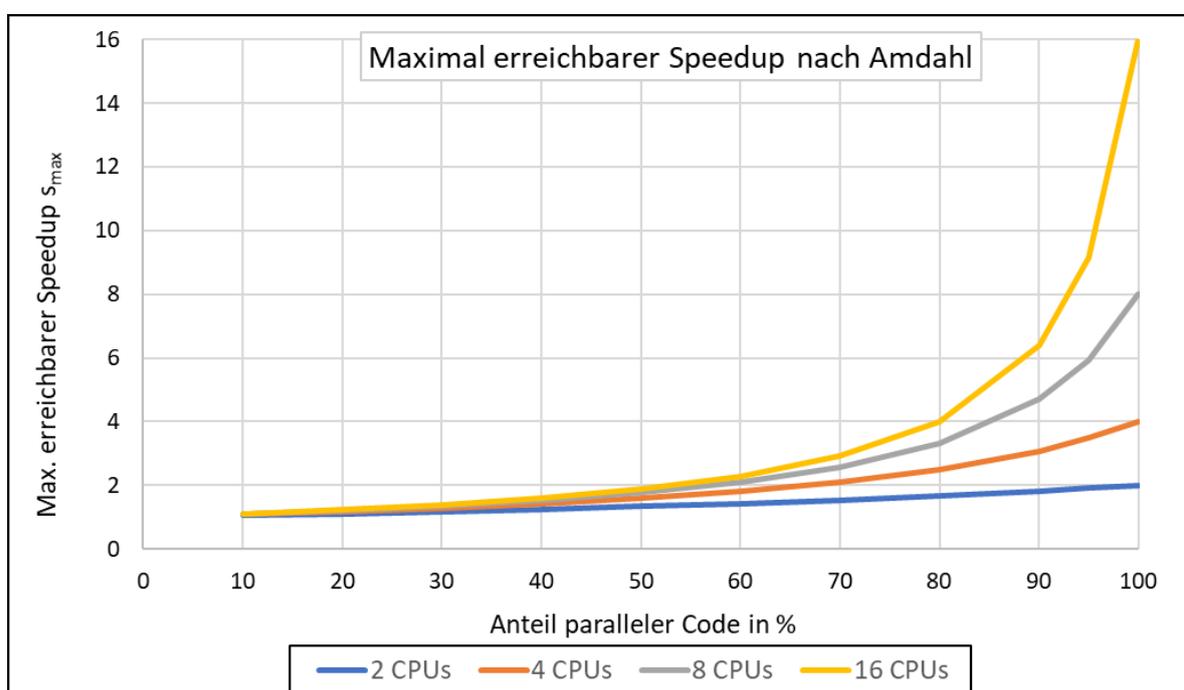


Abbildung 16: Erreichbarer Speedup nach AMDAHL für 2-16 CPUs

Für mehr als 2 CPUs ist ein überproportionales Anwachsen des Speedups erst dann zu verzeichnen, wenn der Anteil an parallelisiertem Code mehr als 90 % beträgt.

Der Ansatz nach AMDAHL geht von einer konstanten Problemgröße aus, welches durch die Parallelisierung entsprechend schneller gelöst werden kann. Ignoriert wird dabei, dass sich gleichzeitig komplexere Problemstellungen effizienter lösen lassen und es zu Skaleneffekten kommen kann. In (Gustafson, 1988) wird ein entsprechender Ansatz vorgeschlagen. Für weiterführende Details sei auf die entsprechende Literatur verwiesen.

4.5.1 Standards zur Parallelisierung von Anwendungen

Um Applikationen auf parallelen Rechnerarchitekturen effizient und skalierbar betreiben zu können, sind die Algorithmen in den Programm Quelltexten zu adaptieren. Es existieren zahlreiche Standards und Verfahren, um die Parallelisierung einer Anwendung umsetzen zu können, wobei stark nach dem Einsatzgebiet und Zweck der zu erzielenden Beschleunigung unterschieden werden muss. Im Bereich der Kontinuumsmechanik und der Anwendung numerischer Lösungsverfahren sind im Wesentlichen 2 Standards verbreitet:

- Open Multi Processing (OpenMP), (OpenMP Architecture Review Board, 2008)
- Message Passing Interface (MPI), (Gropp, 2011)

Open Multi Processing (OpenMP)

OpenMP (OpenMP Architecture Review Board, 2008) ist für den Einsatz auf Shared-Memory-Rechnerarchitekturen konzipiert worden. Mehrere Prozessoren bzw. Prozessorkerne teilen sich einen gemeinsamen, globalen Speicher, in dem die zu bearbeitenden Daten vorliegen. Insbesondere Schleifenkonstrukte lassen sich mit dem OpenMP-Ansatz gut parallelisieren und entsprechen dem Prinzip der Datenparallelität. Voraussetzung für eine Parallelisierung ist die Unabhängigkeit der Schleifendurchläufe untereinander, d.h., die Berechnung i muss unabhängig von der Berechnung $i+1$ sein. OpenMP arbeitet nach dem Fork-Join-Prinzip, bei dem die Daten für die Durchläufe auf einzelne Ausführungsströme (Threads) aufgeteilt (Fork) und nach Beendigung des letzten Workerthreads im Masterthread wieder zusammengeführt (Join) werden (schematisch in Abbildung 17 dargestellt). Jedem Thread wird hierbei nur eine bestimmte Anzahl an Schleifendurchläufen zur Ausführung zugeordnet. Systembedingt (abhängig vom Betriebssystem, verwendeten Compiler, Typ des Prozessors und der Anzahl der Threads) benötigt das Aufgliedern und Zusammenführen der Daten sowie die Erstellung der Threads zusätzliche Rechenzeit, sodass der Einsatz erst ab einer signifikanten Anzahl erforderlicher Schleifendurchläufe erfolgen sollte oder innerhalb der Schleife erfolgen derart aufwändige Berechnungen, dass der Zeitgewinn durch die parallele Berechnung den Zeitaufwand übersteigt. Vorteil des Ansatzes ist die Möglichkeit, die Parallelisierung bestehender Programmcodes schrittweise durchzuführen. Durch Einbinden von speziellen Compiler-Direktiven wird eine Programmschleife automa-

tisch parallelisiert, für die Aufteilung und Synchronisation ist der Compiler zuständig. Dem Shared-Memory-Modell entsprechen in der Regel solche Rechner, die über eine Mehrkern-CPU verfügen, welches auch für gewöhnliche Desktop-Rechner der Fall ist. Der OpenMP-Ansatz kann daher relativ einfach auf derartigen Systemen angewandt werden und ist auch für Software des Ingenieurbereichs mit grafischer Benutzeroberfläche einsetzbar. Nachteilig ist die begrenzte Skalierbarkeit, welche insbesondere von der verfügbaren Speicherbandbreite abhängt.

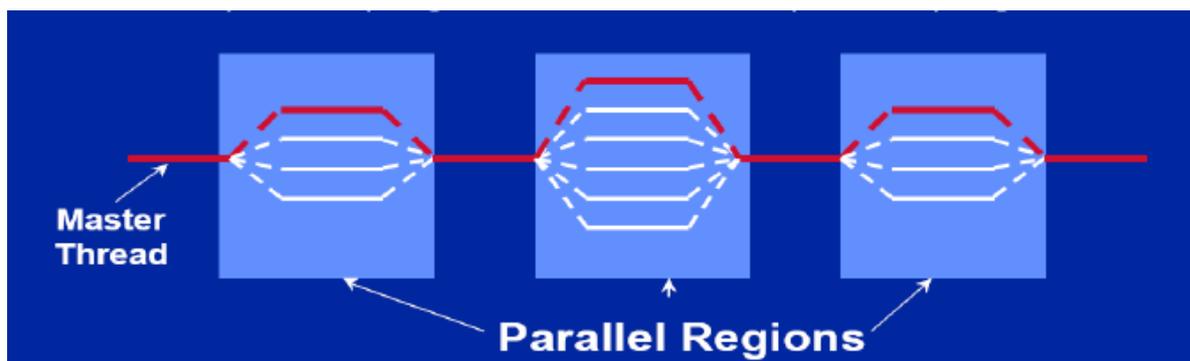


Abbildung 17: Fork-Join-Prinzip der Parallelisierung mit OpenMP, aus (Meyer, Martin; Sallwey, Jana; Blankenburg, René; Gräber, Peter-Wolfgang, 2012)

Message Passing Interface (MPI)

Ansätze nach dem MPI-Standard verfolgen die Strategie, dass das zu lösende Problem durch mehrere parallel laufende Prozesse bearbeitet und damit insgesamt schneller gelöst wird. Jeder Prozess bearbeitet dabei nur einen Bruchteil an Daten des Gesamtproblems, läuft auf einem eigenen Rechner oder einem CPU-Kern und greift auf eigenen lokalen Speicher zurück (Prinzip des verteilten Speichers). Letztlich arbeitet jeder Teilprozess unabhängig von anderen Prozessen, führt jedoch die gleichen Operationen auf die ihm zugeordneten Daten aus. Die Lösung aus den Einzelprozessen wird schließlich durch Synchronisation (Interprozesskommunikation) zu einer Gesamtlösung zusammengeführt. Dieser Ansatz lässt sich übertragen auf ein beliebiges Modellgebiet. Entsprechend der Anzahl an verfügbaren Prozessen wird das aus der Quantisierung entstandene Modellgebiet in aneinander angrenzende Teilgebiete zerlegt (domain decomposition, siehe Abbildung 18). Jeder beteiligte Prozess bearbeitet letztlich nur das ihm zugeordnete Teilgebiet mit den darin enthaltenen Daten. Das aus dem Lösungsprozess entstehende Gleichungssystem eines Prozesses umfasst schließlich nur die dem Teilgebiet zugeordneten Knoten zuzüglich angrenzender Nachbarknoten (ghost nodes). Die Einbeziehung der Nachbarknoten ist erforderlich für den Abgleich der lokal berechneten Lösung mit der Gesamtlösung.

Vorteil dieses Ansatzes ist die gute Skalierbarkeit mit der Problemkomplexität sowie den verfügbaren Rechnerressourcen. Der Ansatz findet vor allem auf massiv-parallelen Systemen des High-Performance-Computings (HPC) breite Anwendung in der Wissenschaft und kann auch über tausende Prozessoren skalieren. Nachteilig ist zum einen der Aufwand, bestehenden Programmcode für MPI zu adaptieren, da der vollständige Quelltext angepasst werden muss und keine schrittweise Umsetzung möglich ist, wie beim Ansatz nach OpenMP. So sind die Synchronisation sowie die Kommunikation der Prozesse untereinander manuell mit Hilfe spezieller MPI-Anweisungen zu implementieren. Zum anderen ist die hardwareseitige Leistungsfähigkeit der Datenübertragung für die Interprozesskommunikation wesentliche Voraussetzung für die Skalierbarkeit bei Ausführung über sehr viele Prozesse.

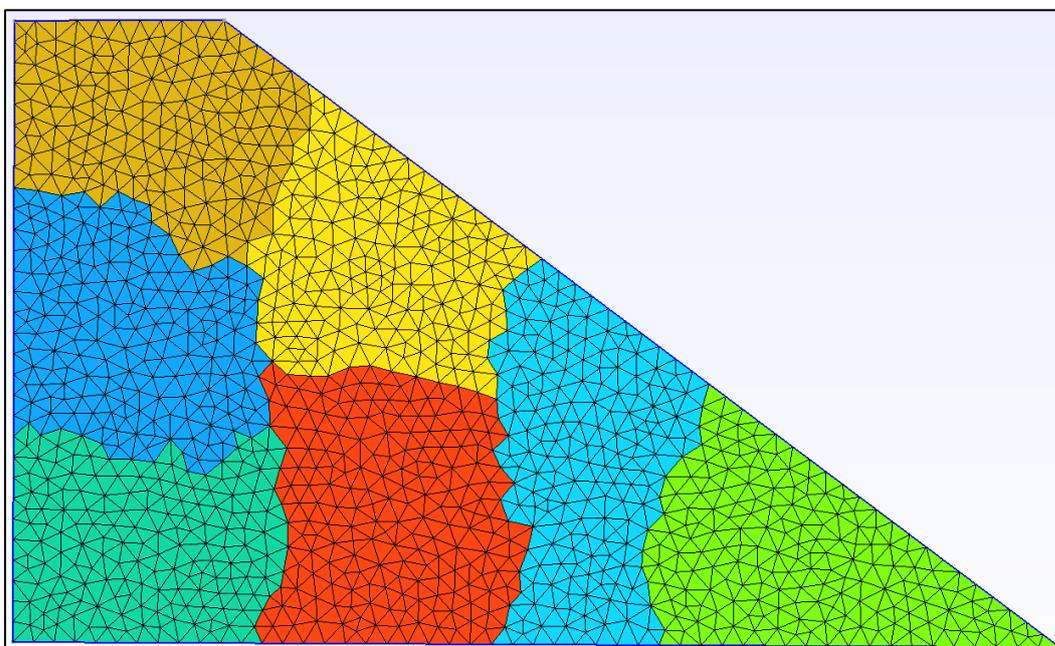


Abbildung 18: Schema eines durch Gebietszerlegung aufgeteilten Modellgebiets mit farblicher Zuordnung zu den einzelnen Prozessen. Intern werden die direkten Nachbarknoten an den Rändern ebenfalls einbezogen.

4.5.2 Umsetzung im Programm PCSiWaPro

Aus benannten Gründen wurde im Programm PCSiWaPro der OpenMP-Ansatz verfolgt und auf den numerischen Lösungsprozess der RICHARDS-Gleichung und der Stofftransportgleichung angewandt.

Das Aufstellen (Assemblierung) der Koeffizientenmatrix $[A]$ (Abschnitt 2.2.3) und die Lösung des entstehenden Gleichungssystems für den Strömungs- und Stofftransportprozess (vgl. Abschnitt 2.2.4) sind sehr rechen- und zeitaufwändig, trotz der Implementierung in der

hochoptimierenden Programmiersprache FORTRAN. Für instationäre Simulationen muss der Lösungsprozess wiederholt für jeden Zeitschritt durchlaufen werden, sodass eine effizientere Ausführung sich unmittelbar auf die benötigte Rechenzeit auswirkt. Bedingt durch den numerischen Ansatz treten zahlreiche Schleifenkonstrukte auf, die die Knoten und Elemente des Netzes umfassen und schrittweise mit OpenMP-Direktiven parallelisiert werden konnten.

Der verwendete Gleichungslöser (Abschnitt 2.2.4) ist ein vorkonditioniertes konjugiertes Gradienten-Verfahren (PCG). In (Kotakemori, et al., 2008) wird dargelegt, dass insbesondere die parallele Ausführung der Matrix-Vektor-Multiplikation bei der Lösung dünn besetzter Gleichungssysteme mit PCG-Verfahren einen wesentlichen Faktor zur Leistungssteigerung darstellt, da dies die Kernaufgabe des Verfahrens beschreibt. Daher wurden die Routinen des Gleichungslösers in die Umsetzung mit aufgenommen. Ausgenommen hiervon ist die Routine der Vorkonditionierung mittels LU-Zerlegung, deren Algorithmus ausschließlich seriell arbeitet.

Folgende Abschnitte des Rechenkerns wurden parallelisiert:

- Assemblierung der Koeffizientenmatrix
- Grundsätzlich alle knotenspezifischen Berechnungen (Zuweisung von Randbedingungen, Druckhöhen, Wassergehalte, Konzentrationen usw.)
- Berechnung der hydraulischen Parameter
- Routinen der Vektoralgebra des Gleichungslösers (Skalarprodukt, Matrix-Vektor-Multiplikation)

4.6 Dual-Porosität nach DURNER

Um die Charakteristik multimodaler Böden besser zu beschreiben, entwickelte DURNER in (Durner, 1992) und (Durner, 1994) einen auf dem VAN-GENUCHTEN-Modell (vGM) basierenden Multiporositätsansatz. Der verfügbare Porenraum wird in sich überlappende Bereiche unterteilt. Funktional bleiben der streng monotone Verlauf sowie die stetige Differenzierbarkeit der Retentionsfunktion erhalten. Nachteile des Ansatzes sind die zusätzlich erforderlichen Parameter für jede Teilporosität i :

- Anteil an der Gesamtporosität w_i
- VAN-GENUCHTEN-Parameter α_i
- VAN-GENUCHTEN-Parameter n_i

welche als reine Optimierungsparameter zu betrachten und damit nur eingeschränkt physikalisch interpretierbar sind. Die Berechnung der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit kann darüber hinaus nicht mehr mit einer analytischen Funktion angegeben werden und bedingt daher den Einsatz numerischer Modelle. Die Funktionswerte der hydraulischen Eigenschaften werden durch Linearkombination der Anteile ermittelt. Theoretisch lässt der Ansatz eine beliebige Anzahl an Teilporositäten zu (multimodal), in der Arbeit wird aus den genannten Gründen jedoch mit einer bimodalen Verteilung gearbeitet.

Exemplarisch soll dieser Ansatz mit dem unimodalen Konzept verglichen werden. Dazu wurden Messwerte für die Retentionsfunktion sowie der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit aus der Literatur verwendet, welche mit dem vGM nur unzureichend beschrieben werden können. In (van Genuchten, 1980) existiert mit dem dort aufgeführten Datensatz für den Boden „Beit Netofa Clay“ ein entsprechendes Beispiel, welches als Grundlage der nachfolgenden Darstellungen verwendet wurde. Die jeweiligen Messwerte sind im Anhang aufgeführt. Die Kurvenanpassung und damit die Berechnung der Parameterwerte wurden mit dem Programm RETC (van Genuchten, et al., 1991) durchgeführt, welches optional den Dual-Porositäts-Ansatz nach DURNER berücksichtigt.

Die Anpassung der Kurven an die gegebenen Messwerte wurde sowohl für das DURNER-Modell als auch für das vGM ausgeführt. Es galt jeweils die folgende Zuordnung

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad (60)$$

Der Transformationsparameter m stellt damit keinen Fitting-Parameter dar, dies gilt ebenso für die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit sowie den Mualem-Parameter λ . Die Startwerte der Parameter wurden in beiden Durchläufen identisch gewählt.

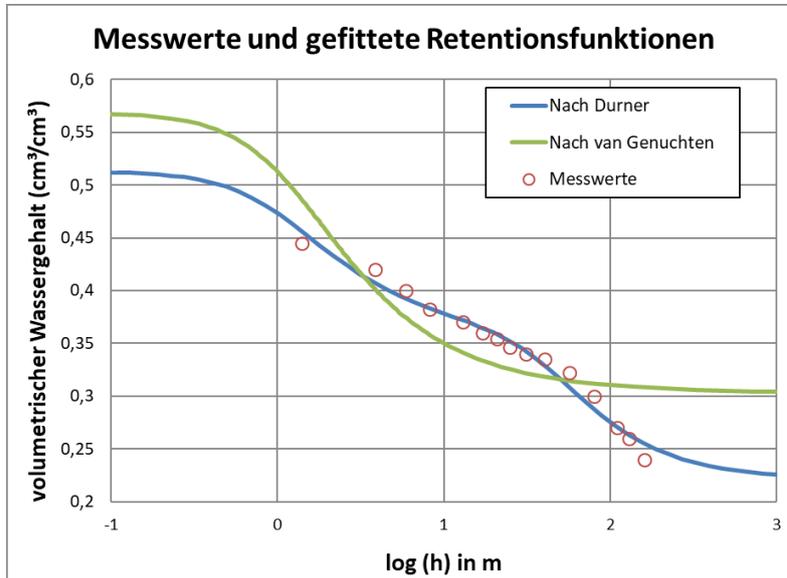


Abbildung 19: Gegenüberstellung gefitteter Kurven der Retentionsfunktion nach DURNER und VAN GENUCHTEN, inkl. Messwerte. Die Saugspannung (Abszisse) ist logarithmisch eingeteilt. Messwerte aus (van Genuchten, 1980) für Beit-Netofa-Ton.

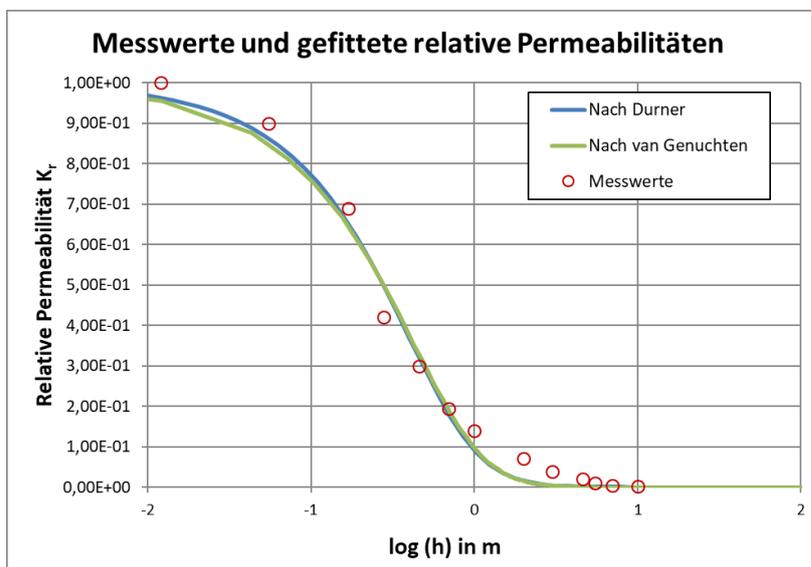


Abbildung 20: Vergleich gefitteter Kurven der relativen Permeabilität nach DURNER und VAN GENUCHTEN, inkl. Messwerte. Messwerte aus (van Genuchten, 1980) für Beit-Netofa-Ton. Abszisse in logarithmischer Teilung.

Für das Fitting nach dem DURNER-Modell war auch der Parameter w_2 als freier Parameter vorgesehen. Dabei stürzte RETC jedoch rekonstruierbar ab, sodass letztlich w_2 als fester

Parameter vorgegeben wurde. Eine Untersuchung der Logdatei zeigte, dass der Parameter w_2 schnell sehr große Werte annimmt und letztlich zu einem numerischen Überlauf führt. Eine Beschränkung der Parameterwerte in RETC ist nicht möglich.

Tabelle 4: Durch RETC berechnete Bodenparameter sowie deren Konfidenzintervalle für Dual-Porosität-Modell nach DURNER

Parameter	Startwert	Ergebnis	95%-Konfidenzintervall	
			Unterer Grenze	Obere Grenze
θ (cm ³ /cm ³)	0,52	0,509	0,404	0,615
$\theta_{w,r}$ (cm ³ /cm ³)	0,17	0,220	0,057	0,383
vGP α (m ⁻¹)	3,00	0,951	0,751	1,151
vGP n	2,00	1,885	1,746	2,025
α_2 (m ⁻¹)	0,1	0,025	-0,016	0,066
n_2	1,3	2,005	0,025	3,986
w_2		0,5	Vorgabe (siehe Text)	
λ		0,5	Vorgabe	
K_s (cm/d)		0,08	Vorgabe	

Tabelle 5: Die mit RETC berechneten Bodenparameter sowie deren Konfidenzintervalle für das VAN GENUCHTEN-Modell

Parameter	Startwert	Ergebnis	95%-Konfidenzintervall	
			Unterer Grenze	Obere Grenze
θ (cm ³ /cm ³)	0,52	0,569	0,445	0,693
$\theta_{w,r}$ (cm ³ /cm ³)	0,17	0,303	0,272	0,335
vGP α (m ⁻¹)	3,00	0,816	0,611	1,022
vGP n	2,00	1,821	1,672	1,969
λ		0,5	Vorgabe	
K_s (cm/d)		0,08	Vorgabe	

In Abbildung 19 sind die aus den identifizierten Parametern (Tabelle 4 und Tabelle 5) berechneten Retentionskurven sowie die Messwerte dargestellt. Das vGM (grüne Kurve) überschätzt den Restwassergehalt mit 0,3 deutlich und gibt die Messwerte insgesamt nur unzureichend wieder. Das DURNER-Modell zeigt dagegen eine deutlich bessere Anpassung und kann die gemessenen Werte durch die ermittelten Parameter gut widerspiegeln. Auffällig in Tabelle 4 ist der weite Bereich des Konfidenzintervalls für den Parameter n_2 , insbesondere der untere Grenzwert lässt auf eine hohe Unbestimmtheit durch die Messwerte schließen.

Abbildung 20 stellt die aus den identifizierten Parametern berechneten Kurven der relativen Permeabilität dar. Beide Ansätze zeigen einen sehr ähnlichen Verlauf und damit eine vergleichbare Anpassung an die gegebenen Messwerte. Die Unterschätzung der Permeabilität im Bereich 1 m bis 10 m Kapillardruckhöhe lässt sich auf die Verteilung der Messwerte

zurückführen, Werte für höhere Saugspannungen und damit trockene Bereiche fehlen und können daher nicht bei der Parameteridentifikation repräsentiert werden.

4.7 Strömungsrandbedingung als zeitvariable Polygonfunktion

Basis dieser Randbedingung ist eine DIRICHLET-Randbedingung (1. Art), deren Randwert als Druckhöhe zu definieren ist. Die ebenfalls denkbare Vorgabe von Wassergehalten ist nicht angebracht, da damit keine Kapillarüberdrücke vorgegeben werden können. Der Wert ist als Potentialhöhe zu definieren und wird vom Programm zeitabhängig verarbeitet. Im Gegensatz zu bislang implementierten Randbedingungen, welche ausschließlich als Stufenfunktion ausgelegt sind, erfolgt hier eine lineare Interpolation der Stützwerte zwischen den angegebenen Zeitstützstellen. Vorteil der Interpolation ist die Vermeidung von „Sprüngen“ in den Randbedingungen, welches zu einem erheblich stabileren Lösungsprozess führt. Interpolationsverfahren höherer Ordnung (z.B. Polynominterpolationen, Splines) kommen aus den im Folgenden genannten Gründen nicht zum Einsatz:

- Für die Simulationsergebnisse kann kein sinnvoller Informationsgewinn erzielt werden, da die Zeitquantisierung stückweise linear ist und die Schrittweite der Zeitschritte im Allgemeinen nicht äquidistant über die Simulationszeit vorliegt
- Obwohl die Interpolation stützstellentreu ist, kann gerade bei Polynomen höherer Ordnung ein Über- oder Unterschwingen in den Zwischenräumen auftreten und schließlich dazu führen, dass nicht nur prinzipiell falsche Werte für die Randbedingungen angesetzt werden, sondern diese Werte auch außerhalb eines physikalisch interpretierbaren Wertebereichs liegen können

4.7.1 Programmtechnische Implementierung

Durch die Angabe als Potentialhöhe wird die z-Koordinate des betreffenden Randknotens in die Interpolation einbezogen. Zusätzlich ist ein internes Kriterium implementiert worden: Liegt zum Zeitpunkt i die an einem Randknoten vorgegebene Potentialhöhe unterhalb der z-Koordinate dieses Knotens, wird lokal zu einer No-Flow-Randbedingung umgeschaltet. Damit entspricht dies einer NEUMANN-Randbedingung, wobei anwenderseitig jedoch nur Potentialhöhen definiert werden können.

4.7.2 Anwendungsszenario

Ein typisches Anwendungsbeispiel ist die Möglichkeit, damit steigende bzw. fallende Wasserspiegel zu simulieren, wie es beispielsweise bei der Deichdurchsickerung unter variablem Hochwassereinstau zum Tragen kommt, siehe (Hasan, 2013).

Weitere zwei interne Kriterien sind ebenfalls denkbar und je nach Anwendungsgebiet auch von praktischer Bedeutung. Statt wie zuvor die Stromrate zu eliminieren, kann in diesem Fall auch ein Sickerbereich definiert werden. Damit wird erreicht, dass Wasser bei Erreichen vollständiger Sättigung des Bodens austreten kann. Die Stromrate wird dann berechnet und die Druckhöhe bei Null fixiert. Ein Anwendungsfall sind beispielsweise geotechnische Standsicherheitsbetrachtungen für den Böschungsbereich von Tagebaurestseen. Um eine ausreichende Dimensionierung des Böschungsbereichs zu gewährleisten, sind hydraulische Schnittberechnungen mit verschiedenen Einstauszenarien zu berechnen. Der Einstau bezieht sich dabei sowohl auf das landseitig anströmende Grundwasser als auch auf den sich ändernden Wasserstand im (sich auffüllenden) Restsee. Ein typisches Worst-Case-Szenario im Hinblick auf die Bewertung der Standsicherheit ist ein hoher Grundwasserstand verbunden mit einem hohen Seewasserstand, der jedoch innerhalb kurzer Zeit stark abfällt. In diesem Fall ist der Böschungsbereich noch stark gesättigt und wird auch durch das anströmende Grundwasser weiterhin beeinflusst. Die fehlende Auflast durch den sinkenden Seewasserspiegel führt zu einer höheren Resultierenden, welche sich aus der Auftriebskraft des Wassers sowie der Auflast durch das Eigengewicht der Böschung ergibt. Liegen entsprechende bodenhydraulische Parameter vor, lassen sich präzise Aussagen zur zeitlichen Ausbildung der sich unter den Bedingungen verändernden Potentiallinien treffen.

Als weiteres Kriterium ist die Umschaltung zu einer atmosphärischen Randbedingung sinnvoll, falls die vorgegebene Potentialhöhe unterhalb der z-Koordinate eines Randknotens liegt. Dieser Randbedingungstyp dient im Programm PCSiWaPro der Verarbeitung atmosphärischer Eingangsdaten wie Niederschlag, Bodenverdunstung sowie Transpiration durch Pflanzenwurzeln. Intern wird diese als NEUMANN-Randbedingung behandelt. Als sinnvolles Einsatzgebiet erscheint wiederholt der landseitige Einstau bei der Dammdurchströmung. Geht der Einstau zurück, z.B. nach dem Durchlauf einer Hochwasserwelle, unterliegen die nun nicht mehr vom Wasser bedeckten Bereiche atmosphärischen Einflüssen. Somit können Effekte durch Niederschlag, Bodenverdunstung und Wasserentzug durch Pflanzenwurzeln in diesem Bereich deutlich sichtbar und beispielsweise ein Abtrocknen realistischer abgebildet werden.

4.8 Berücksichtigung von Unsicherheiten in den Eingangsdaten

Grundlage der numerischen Simulationssysteme sind in der Regel mathematische Modelle, wie auch im Fall des Programms PCSiWaPro. Solche Modelle basieren in der Regel auf mathematischen Formulierungen, die konkrete Zahlenwerte berechnen. Überschreiten die-

se Zahlenwerte gewisse Grenz- oder Richtwerte, werden dann definierte Handlungen (Sanierungsmaßnahmen o.ä.) ausgelöst (schematisch in Abbildung 21 dargestellt). Dabei erfordern Simulationssysteme zur Bedienung im Allgemeinen ein hohes Maß an Fachwissen, können aber letztendlich dieses zumeist in verbaler Form vorliegende nicht verarbeiten, da diese Systeme konkretes Wissen in Form von Zahlenwerten voraussetzen.

Darüber hinaus sind Daten, die in der Realität im Bereich Umwelt, Boden und Grundwasser bestimmt werden, mit Unsicherheiten behaftet. Ursachen hierfür sind z.B. technisch bedingte Grenzen der Genauigkeit der Messungen, Inhomogenität in den zu messenden Größen und/ oder zu geringe Messwertdichten, Fehler bei der Orts- und Zeitquantisierung von Parametern und Variablen (Zustandsgrößen).

Aus diesen Gründen wurde das Programm PCSiWaPro dahingehend erweitert, um die Einbeziehung von Unsicherheiten vorhandener Eingangsdaten sowie die systematische Verarbeitung verbalen Wissens für die Bearbeitung typischer Fragestellungen zu ermöglichen. Der Begriff Unsicherheit umfasst im Folgenden auch den Bereich der Unschärfe von Eingangsdaten, welche z.B. durch verbales Wissen (Expertenwissen) entstehen kann.

4.8.1 Zielstellung

Ziel war die Entwicklung von Verfahren und Methoden, um Unsicherheiten in der Parameter- und Randbedingungsbestimmung auch in den Berechnungsergebnissen von PCSiWaPro ausweisen zu können.

Bislang erfolgt hier eine Entscheidungsfindung auf Grundlage konkreter Zahlen, evtl. unter Angabe eines Grenzwertes. Die Berücksichtigung von Unsicherheiten und die Interpretation der Auswirkungen auf die Ergebnisgrößen sind bestenfalls durch Sensitivitäts- oder Szenarioanalysen möglich.

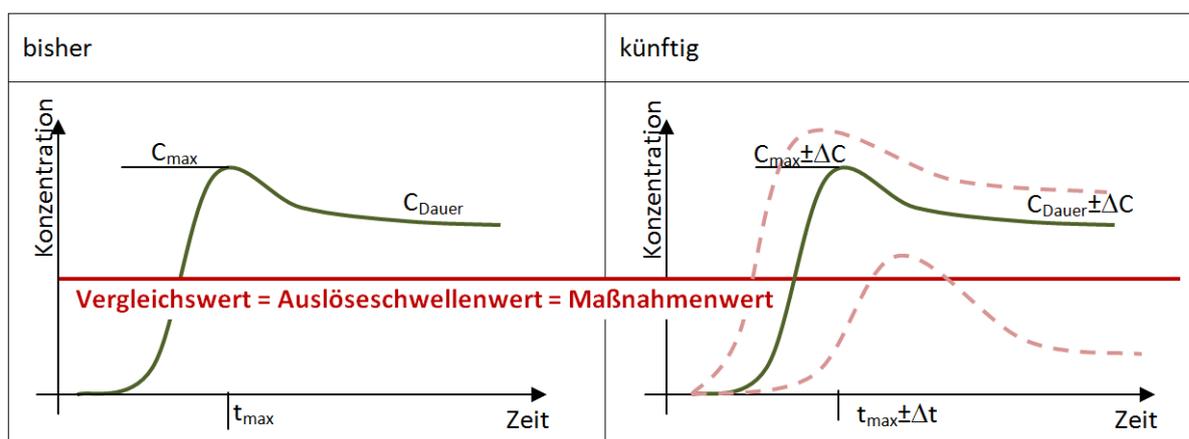


Abbildung 21: Schematische Darstellung der Zielstellung des Vorhabens (Blankenburg, et al., 2010)

Monte-Carlo-Simulationen erfordern durch häufige Wiederholungen hohe Rechenleistungen und einen hohen Zeitaufwand. Das hier beschriebene Verfahren aus der Fuzzy-Logik (Schulz, 1997) kommt in der Regel mit erheblich weniger Wiederholungen aus und bietet grundsätzlich die Möglichkeit, verbales Wissen zu berücksichtigen.

Um „verbales Wissen“ systematisch zu erschließen und unsichere Daten mit einem Modell zu kombinieren, kann die als Fuzzy-Logik bezeichnete Technik eingesetzt werden. Im Bereich der Umweltmodellierung wurde eine derartige Technik nur vereinzelt untersucht und eingesetzt. Beispielhaft seien hier Arbeiten von (Schulz, 1997), (Pühl, 2000) und (Bárdossy, et al., 2003) genannt. Um Expertenwissen auf diesem Weg in Schwankungsbreiten von Modellparametern zu übertragen, wurden in dieser Arbeit entsprechende Fuzzy-Logik-Verfahren und Regeln für diese Branche und für typische Aufgabenstellungen erarbeitet. Die Verbindung zum eingesetzten Modellierungssystem kann dabei über die Definition von Eingangsdaten im Sinne von Modellparametern, Zustandsvariablen und Randbedingungen hergestellt werden.

4.8.2 Angestrebte technische Funktionalitäten

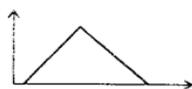
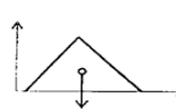
Eine Verknüpfung von diskretem und verbalem Wissen auf Basis der Fuzzy-Logik ist bei dem Vorgehen relevant, genauso wie das Einbinden unsicherer Daten in die Systeme. Auf Basis dieser Eingangsdaten erfolgt die sogenannte „Fuzzyifizierung“ der Spannweiten der einzelnen Daten oder Parameter. Damit soll eine automatische Berechnung der Modelle durchgeführt werden.

4.8.3 Grundlagen der Fuzzy-Mengen-Theorie

Um verbal beschriebene oder durch Unsicherheiten definierte Schwankungsbreiten in Berechnungssystemen nutzen zu können, müssen diese mathematisch beschrieben werden.

Die Fuzzy-Mengen-Theorie erfüllt diese Voraussetzung und soll im Folgenden dargelegt werden. In Tabelle 6 sind zum Vergleich und besseren Verständnis die Verfahrensweisen und Rechenvorschriften bei klassischer Abschätzung und Anwendung von Fuzzy-Systemen gegenübergestellt. Deutlich geht hier die Verarbeitung von verbal vorliegendem Wissen (linguistische Variable) hervor.

Tabelle 6: Gegenüberstellung von klassischer Betrachtungsweise und Fuzzy-Systeme, nach (Pühl, 2000)

„Klassische Abschätzung“	Fuzzy-Systeme
1. Numerische Faktoren z.B. $r_0, m_I, m_{II}, m_{III}, m_{IV}$	1. Linguistische Variable z.B. Stoffgefährlichkeit, Austrag, Eintrag, Transport, Bedeutung
2. Werte aus Tabellen z.B. $r_0 = 5.0$ (Düngemittel)	2. Linguistische Terme (Fuzzy-Mengen) z.B. {sehr klein, ..., sehr groß} 
3. Multiplikation z.B. $r_{IV} = r_0 * m_I * m_{II} * m_{III} * m_{IV}$	3. Inferenz einer Regelbasis z.B. Wenn Stoffgefährlichkeit = sehr groß und ..., dann Gefahrenrisiko = sehr groß Wenn ... und Austrag = klein, ...
4. Ergebnis z.B. $r_{IV} = 2.8 = R$	4. Kalkül und Unsicherheit z.B. Gefahrenrisiko = mittel mit einer bestimmten Unsicherheit
5. Handlungsschema Tabellen durch Erfahrung bewerten z.B. $R_{subj} = 2.0$, damit Zuschlag X	5. Defuzzifizierung Abbildung des Risikos auf die Zuschläge Zuschlag X mit einer bestimmten Unsicherheit 

4.8.4 Repräsentation unscharfer Zahlen als Eingangsgrößen in Simulationsprogramme

Unsichere Parameter, deren Unsicherheit als Unschärfe festgelegt wurde, können mit Hilfe der Fuzzy-Mengen-Theorie beschrieben werden. Im Gegensatz zur klassischen Mengentheorie besitzt dabei jedes Element x einer Fuzzy-Menge \tilde{A} einen Zugehörigkeitsgrad, der mit Hilfe einer Zugehörigkeitsfunktion μ beschrieben wird. Die formale Definition für eine Fuzzy-Menge lautet (Schulz, 1997):

$$\tilde{A} := \{(x, \mu_A(x)) \mid x \in X\} \quad (61)$$

wobei A Teilmenge einer Fundamentalmenge X ist.

Unscharfe Mengen mit normalisierter Zugehörigkeitsfunktion werden als unscharfe Zahlen (siehe Abbildung 22) oder unscharfe Intervalle (Abbildung 23) bezeichnet. Dabei ist eine Fuzzy-Menge normal, wenn gilt (Schulz, 1997):

$$\mu_A(x) \geq 0 \quad \forall x \in X \quad (62)$$

$$\sup_{x \in X} [\mu_A(x)] = 1 \quad (63)$$

Mit Hilfe der unscharfen Mengen können generelle Schwankungsbreiten beliebiger Struktur als Zugehörigkeitsfunktionen interpretiert werden, welche als Eingangsgrößen in Simulationsprogrammen genutzt werden können. Eine Beschränkung der Form der Zugehörigkeitsfunktionen auf stückweise lineare Kurven ist generell nicht nötig, für eine Übergabe an Simulationsprogramme jedoch sinnvoll.

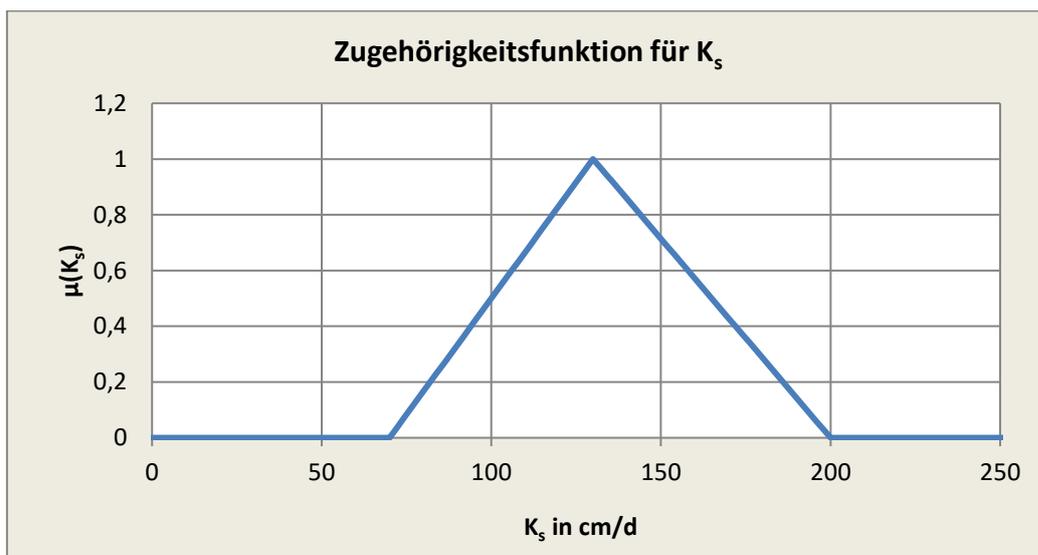


Abbildung 22: Dreiecksförmige Zugehörigkeitsfunktion für die ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit

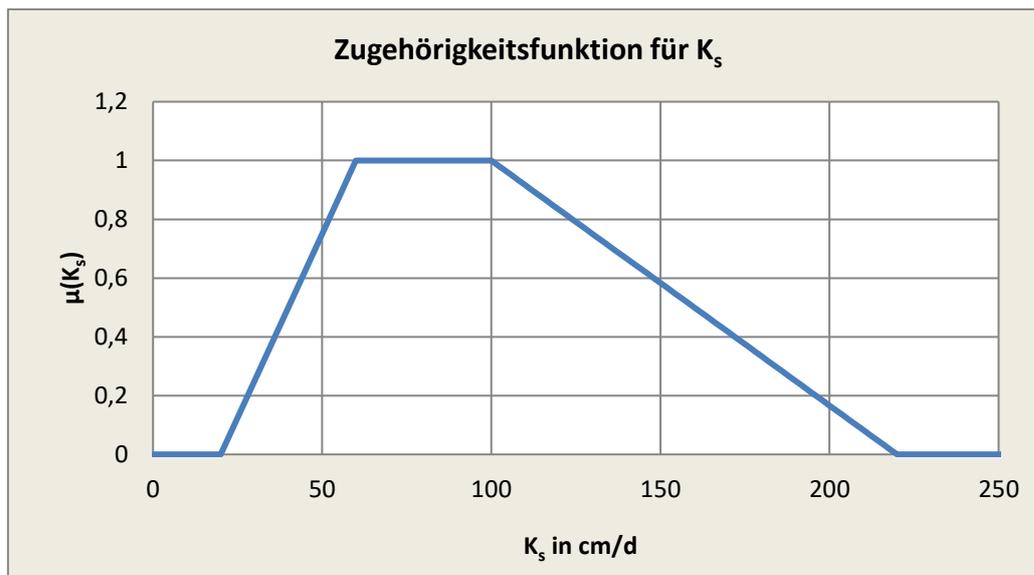


Abbildung 23: Beispiel einer trapezförmigen Zugehörigkeitsfunktion für die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit

Damit können Expertenaussagen oder rein linguistisch vorliegende Bodenbeschreibungen, aber auch die üblichen Schwankungsbreiten aus Messungen quantifiziert werden. Grundlage für die Ableitung der Zugehörigkeitsfunktion aus Abbildung 22 könnte beispielsweise folgende Expertenaussage sein:

„Die hydraulische Leitfähigkeit des vorliegenden Bodens ist auf jeden Fall größer als 70 cm/d und nicht größer als 200 cm/d. Mit großer Sicherheit liegt die hydraulische Leitfähigkeit bei 130 cm/d.“

4.8.5 Einsatz der Fuzzy-Methode am Beispiel der analytischen Lösung der DARCY-BUCKINGHAM-Gleichung

Die Strömung in der ungesättigten Bodenzone kann mit Hilfe der DARCY-BUCKINGHAM-Gleichung beschrieben werden, wobei der Wassergehalt im Boden von der Druckhöhe abhängt und die hydraulische Leitfähigkeit wiederum eine Funktion des Wassergehaltes darstellt. Unter den Annahmen

- Randbedingung 2. Art am oberen Rand (Flussrandbedingung)
- Randbedingung 1. Art am unteren Rand, Druckhöhe 0 cm bei $z=0$ cm
- Exponentielle Beschreibung der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit K
- Homogener Boden (ohne Schichtung, Isotrop)

kann die Lösung der eindimensionalen DARCY-BUCKINGHAM-Gleichung geschrieben werden als (Schulz, 1997):

$$h(z) = \frac{1}{c} \ln \left[\frac{q_{rand} + K_s}{K_s e^{cz}} - \frac{q_{rand}}{K_s} \right] \quad (64)$$

Dabei bedeuten

q_{rand} Randzufluss (<0: Infiltration; >0: Exfiltration)

K_s Gesättigte hydraulische Leitfähigkeit

c Empirischer Parameter zur Beschreibung der Porengrößenverteilung im Boden

Zur Berechnung des Minimal- bzw. Maximalszenarios dieses Modells ist aufgrund der Monotonie von Gleichung (64) mit der linken (unteren) bzw. der rechten (oberen) Grenze der unscharfen Eingangparameter zu rechnen (siehe Gleichungen (65) und (66)).

$$\overline{h(z)} = \frac{1}{\underline{c}} \ln \left[\frac{\overline{q_{rand}} + \overline{K_s}}{\overline{K_s} e^{cz}} - \frac{\overline{q_{rand}}}{\overline{K_s}} \right] \quad (65)$$

$$\underline{h(z)} = \frac{1}{\overline{c}} \ln \left[\frac{\underline{q_{rand}} + \underline{K_s}}{\underline{K_s} e^{cz}} - \frac{\underline{q_{rand}}}{\underline{K_s}} \right] \quad (66)$$

Dabei stellen

- unterstrichene Terme die linke (untere) Grenze
- überstrichene Terme die rechte (obere) Grenze

der jeweiligen Größe dar.

Um beispielhaft die Lösung der Gleichung zu berechnen werden folgenden Aussagen eines Experten betrachtet, welche in Tabelle 7 zusammengefasst sind:

„Es handelt sich um einen Lehmboden, dessen gesättigte hydraulische Leitfähigkeit auf jeden Fall zwischen 60 und 100 cm/d liegt. Die Porenverteilung des Bodens, welche unter anderem die kapillare Steighöhe charakterisiert, kann für einen Lehmboden mit Werten zwischen 0,01 und 0,02 cm⁻¹ beziffert werden. Die meteorologischen Verhältnisse lassen auf Werte für die Infiltration von 0,2 cm/d schließen, an trockenen Tagen überwiegt die Evaporation und kann ebenfalls mit 0,2 cm/d angenommen werden.“

Tabelle 7: Eingabedaten für Berechnungsbeispiel

Parameter	Untere Grenze	Obere Grenze	Bedeutung
q_{rand} (cm/d)	-0,2	0,2	<0: Infiltration >0: Exfiltration (Evaporation)
K_s (cm/d)	60	100	Leitfähigkeit eines Lehmbodens
c (1/cm)	0,01	0,02	Charakterisierung der Porengrößenverteilung im Boden

Abbildung 24 zeigt die grafische Darstellung der Ergebnisse, welche mit Hilfe der Gleichungen (65) und (66) erzielt wurden. Dabei wird deutlich, dass die Druckhöhe am oberen Rand sehr deutlich schwankt, während sie am unteren Rand des Modells durch die vorgegebene Randbedingung (Druckhöhe = 0 cm) festgelegt wird und somit keiner Schwankung unterliegt.

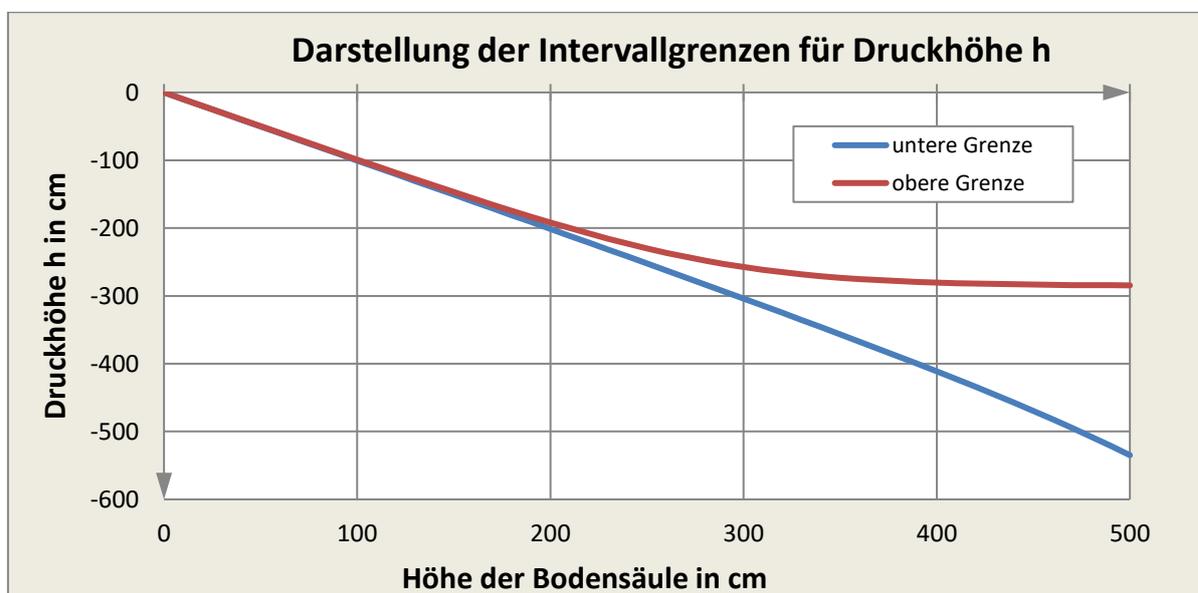


Abbildung 24: Berechnete Grenzen für die Druckhöhe

4.8.6 Intervallararithmetik

Um mathematische Operationen mit unscharfen Mengen bzw. Zahlen definieren zu können, ist es erforderlich, das Kartesische Produkt auf unscharfe Mengen zu erweitern. Mit dem Extensionsprinzip ergibt sich die Möglichkeit, Abbildungen dahingehend zu erweitern, um mit unscharfen Mengen operieren zu können (Kruse, et al., 1993) und (Schulz, 1997):

Definition: Seien X_1, \dots, X_n, Y beliebige Mengen und φ eine Abbildung von $X_1 \times \dots \times X_n \rightarrow Y$. Sind weiter A_1, \dots, A_n unscharfe Mengen bzw. Zahlen von X_1, \dots, X_n und $A_1 \times \dots \times A_n$ das Kartesische Produkt sowie B^* die Menge aller unscharfen Mengen bzw. Zahlen von Y .

Dann kann φ zu einer Abbildung $\hat{\varphi}: A_1 \times \dots \times A_n \rightarrow B^*$ erweitert werden, indem für $B \in B^*$ mit $B := \{(y, \mu_B(y))\} = \hat{\varphi}(A_1, \dots, A_n)$ der Zugehörigkeitsgrad $\mu_B(y)$ wie folgt definiert ist:

$$\mu_B(y) := \begin{cases} \sup\{\min\{\mu_{A_1}(x_1), \dots, \mu_{A_n}(x_n)\}; y = \varphi(x_1, \dots, x_n) \mid (x_1, \dots, x_n) \in X_1 \times \dots \times X_n\} \\ 0, \text{ falls kein } (x_1, \dots, x_n) \in X_1 \times \dots \times X_n, \text{ so dass } y = \varphi(x_1, \dots, x_n) \end{cases} \quad (67)$$

Für allgemeine Funktionen ist dieses Verfahren sehr kompliziert, um Erweiterungen auf unscharfe Zahlen effizient durchführen zu können (Kruse, et al., 1993). Es ist daher sinnvoll, das Extensionsprinzip für stetige Abbildungen auf reelle Zahlen in differenzierter Darstellung anzuwenden. Dafür betrachtet man zunächst die Zugehörigkeitsfunktionen und zerlegt diese in „ α -Schnitte“, welche die gegebene Fuzzy-Menge in Teilintervalle zerlegt.

Ein α -Schnitt \underline{A}_α einer Fuzzy-Menge \tilde{A} ist definiert als die Menge

$$\underline{A}_\alpha := \{x \in X \mid \mu_A(x) \geq \alpha\} \quad (68)$$

mit $\alpha \in]0,1]$. Die α -Schnitte sind scharfe Untermengen des Trägers von \tilde{A} , also der Menge, über der die Zugehörigkeitsfunktion von \tilde{A} nicht 0 ist (Abbildung 25).

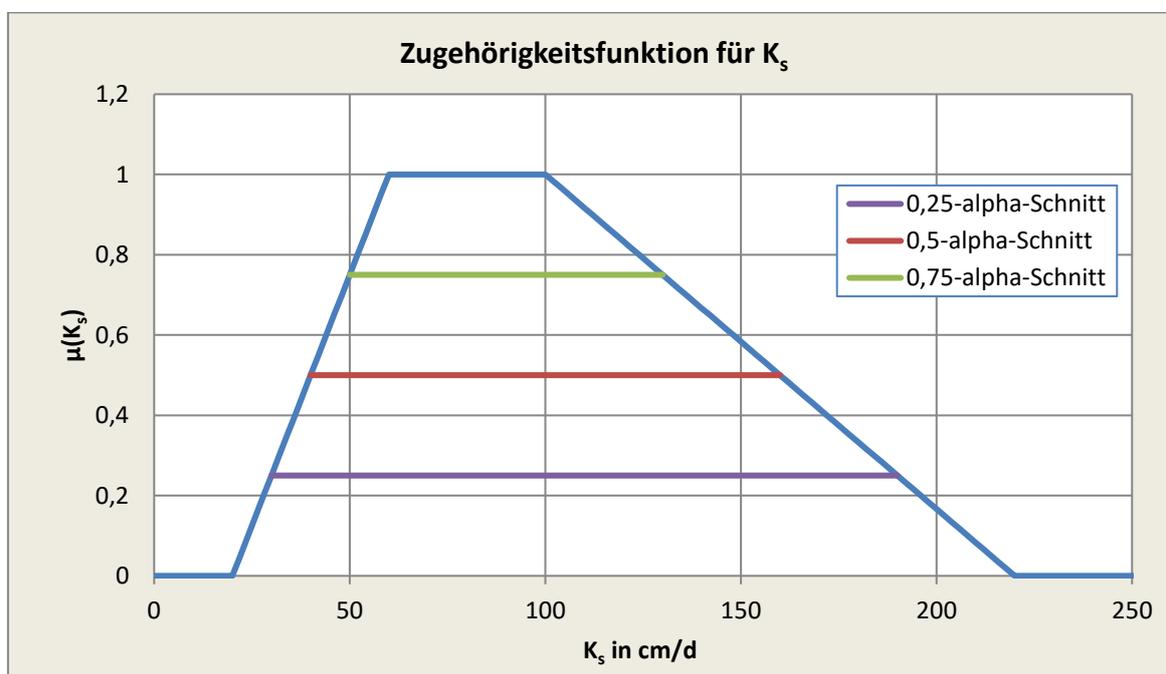


Abbildung 25: Zugehörigkeitsfunktion für K_s mit α -Schnitten

Mit Hilfe der α -Schnitte lässt sich das oben beschriebene Extensionsprinzip folgendermaßen vereinfachen (Schulz, 1997):

Seien A_1, \dots, A_n jeweils unscharfe Zahlen aus A^* und bezeichne $\mathbf{R}^n = \mathbf{R} \times \dots \times \mathbf{R}$ das Kartesische Produkt von \mathbf{R} . Ist $\varphi: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ eine stetige Abbildung. Φ ist die Erweiterung dieser Abbildung im Rahmen der Intervallarithmetik und $\check{\varphi}$ die Erweiterung im Rahmen der Fuzzy Set Theorie (Def. oben). $A_{i\alpha}$ bezeichnet den α -Schnitt der unscharfen Zahl A_i und es gilt für alle $\alpha \in]0,1[$:

$$[\hat{\varphi}(A_1, \dots, A_n)]_\alpha = \check{\varphi}(A_{1\alpha}, \dots, A_{n\alpha}) = \{y \mid y = \varphi(x_1, \dots, x_n); x_1 \in A_{1\alpha} \wedge \dots \wedge x_n \in A_{n\alpha}\} \quad (69)$$

Aufgrund der Konvexität resultieren die einzelnen Schnitte in Intervallen auf den reellen Zahlen. Mathematisch bedeutet das, dass sich Operationen mit unscharfen Zahlen für die einzelnen α -Schnitte auf entsprechende Operationen innerhalb der Intervallarithmetik zurückführen lassen. Dies bedeutet, dass zur Konstruktion der Zugehörigkeitsfunktion der resultierenden unscharfen Zahl für jeden α -Schnitt ein minimal und maximal möglicher Funktionswert gefunden werden muss. Dies erfordert bei komplexeren Funktionen (z.B. Gleichung (1)) die Anwendung eines nichtlinearen Optimierungsverfahrens. In der Praxis wird man sich auf wenige α -Schnitte beschränken (z.B. 1.0, 0.75, 0.5, 0.25, 0.0) um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten (siehe auch Abbildung 25).

Werden nun die α -Schnitte der verschiedenen Eingangsparameter in die Berechnung mit einbezogen, ist jede Simulation für einen Satz α -Schnitte als Berechnung des Minimal- bzw. Maximalszenarios für den jeweiligen α -Wert zu sehen. Zusammengenommen lässt sich damit das Ergebnis wieder als Zugehörigkeitsfunktion für die Ergebnisgröße betrachten. Die Eingangsunsicherheiten sind also direkt in das Modell eingebunden und das Modell liefert direkt eine Fuzzy-Ergebnisgröße.

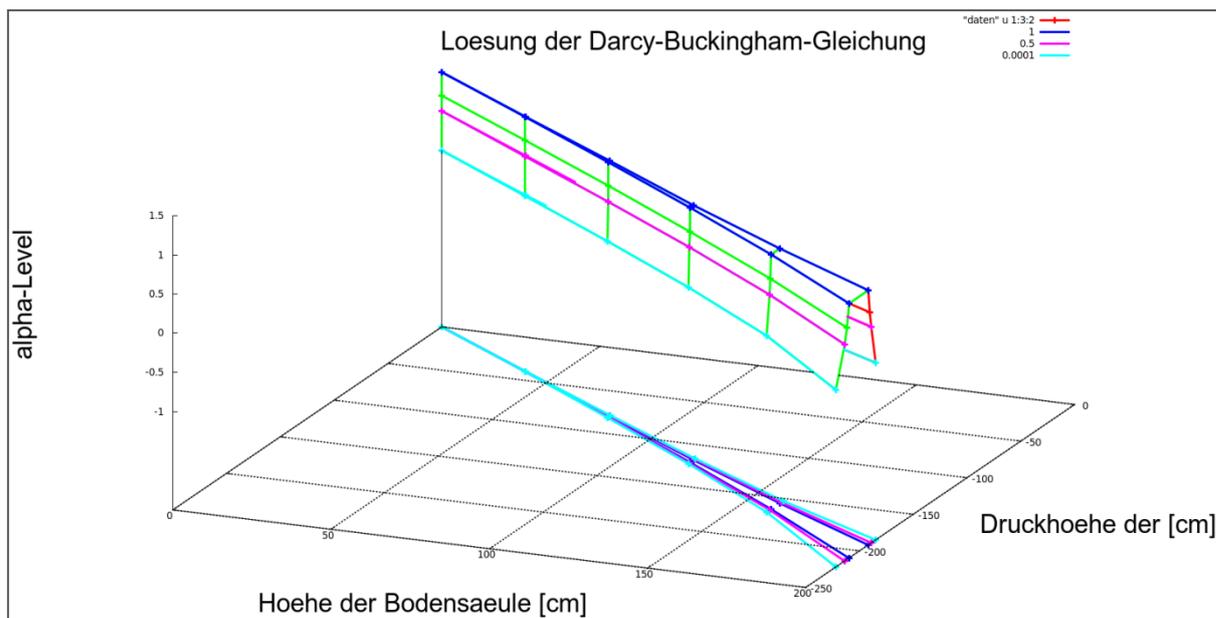


Abbildung 26: Berechnete Grenzen für die Druckhöhe mit unterschiedlichen Zugehörigkeitswerten

4.8.7 Auswahl eines Testmodells für die Simulation mit einem Umweltinformationssystem

In den nächsten Schritten sollen 2D-Probleme stationärer und instationärer Art implementiert werden, um einen Vergleich zu den Ergebnissen aus den Berechnungen mit der Intervallarithmetik zu bekommen.

Die im vorigen Abschnitt vorgestellte Lösung zur Berücksichtigung unscharfer Parameter und Randbedingungen in einem analytischen 1-dimensionalen Ansatz wurde stark erweitert und verallgemeinert. Dies geschah zum einen, da mit dem bisherigen Ansatz nur sehr eingeschränkte Problemstellungen dargestellt werden konnten, zum anderen um darüber hinaus auch andere Simulationswerkzeuge einbinden zu können. Als Simulationstool wurde PCSiWaPro ausgewählt, da es die Strömungs- und Stofftransportprozesse in variabel gesättigten Medien (d.h. sowohl im gesättigten als auch im ungesättigten Bodenbereich) vertikal-eben (2-dimensional) berücksichtigen kann, zudem als Quellcode vorliegt und damit evtl. notwendige Anpassungen möglich sind.

4.8.8 Voraussetzungen für die numerische Umsetzung und Auswertung

Für die im vorigen Abschnitt angegebenen α -Schnitte sind aufgrund des funktionalen Zusammenhangs Bildmengen zu finden. Durch die Stetigkeit der Gleichung (1) und der Konvexität der unscharfen Zahlen sind diese Mengen wiederum abgeschlossene Intervalle. Zur

Bestimmung der resultierenden Intervalle müssen der minimale und maximale Funktionswert gefunden werden, wobei die Eingangsparameter nur Werte innerhalb des Schwankungsbereichs des α -Schnittes annehmen dürfen. Während bei einfachen Funktionen die Monotonie für die Suche der Min/Max-Werte genutzt werden kann, ist bei komplexeren, nichtlinearen Modellen ein numerisches Optimierungsverfahren anzuwenden. Das hier verwendete Programm NLPQLP (Schittkowski, 2006) ist in der Lage, nichtlineare Minimierungsprobleme, wie sie bei Verwendung der RICHARDS-Gleichung auftreten, zu lösen.

Grundsätzlich ergeben sich bei der numerischen Umsetzung der Erweiterung von Funktionen auf unscharfe Zahlen die folgenden Voraussetzungen:

Die Zielfunktion muss in Form einer numerischen Realisierung vorliegen: Dies ist durch Verwendung des Simulationsprogramms PCSiWaPro gegeben.

Die zur Berechnung der Zielfunktion erforderlichen Eingabeparameter müssen zur Verfügung stehen und es ist zu unterscheiden zwischen unscharfen sowie „exakt“ bekannten Bodenparametern und Randbedingungen. Im Abschnitt 8.8 des Anhangs wird dargestellt, wie diese dem Programm zur Verfügung gestellt werden.

Zur Durchführung des Optimierungsalgorithmus ist die Vorgabe der Gradienten der Zielfunktion erforderlich. Die Berechnung der Gradienten erfolgt durch Bildung von Vorwärtsdifferenzen (Gleichung (70)), da durch die Anwendung des numerischen Simulationstools keine analytische Differentiation möglich ist:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \approx \frac{f(x_i + \Delta x_i) - f(x_i)}{\Delta x_i} \quad (70)$$

Die Gradienten sind für jeden unscharfen Bodenparameter und jede unscharfe Randbedingung zu ermitteln. Als Schrittweite Δx_i wird 1/100 der Breite des jeweiligen α -Schnittes verwendet.

Zur Ausführung des Optimierungsalgorithmus sind Startwerte der unscharfen Bodenparameter und Randbedingungen für eine Anfangsschätzung des gesuchten Minimums erforderlich. Bei allen unscharfen Eingabedaten wird als Anfangsschätzwert die Intervallmitte des jeweiligen α -Schnittes verwendet. Diese ergibt sich unter Verwendung von x_{li} und x_{ri} als Ränder des Intervalls zu: $x_i^0 = x_{li} + 0.5(x_{ri} - x_{li})$.

Zur Ansteuerung des Programms PCSiWaPro, zur Berechnung der erforderlichen Gradienten und zur Ausgabe der Zielgrößen war daher eine Steuersoftware zu erstellen. Der Nut-

zer kann die Zahl der α -Schnitte beliebig vorgeben, der numerische Aufwand steigt jedoch mit zunehmender Zahl.

4.8.9 Implementierung

Dieser Abschnitt erläutert die erstellten Algorithmen zur Steuerung des NLPQLP-Unterprogramms und des verwendeten Simulationsprogramms PCSiWaPro.

Zunächst werden die bekannten Fuzzy-Parameter vom Steuerprogramm eingelesen. Bei den Parametern kann es sich im allgemeinen Fall um die in den vorangegangenen Boden- und Stofftransportparameter sowie Randbedingungen handeln, deren Schwankungsbreiten und Zugehörigkeiten vorgegeben werden können. Aus den Schwankungsbreiten für jedes Zugehörigkeitslevel werden die Anfangswerte für die einzelnen Parameter und Randbedingungen bestimmt. In den berechneten Beispielen wurden diese auf den Mittelwert eines Intervalls festgelegt. Damit wird ein erster Funktionswert für die zu bewertende Größe (z.B. Druckhöhe, Konzentration) berechnet. Anhand des Funktionswerts wird anschließend für jede Fuzzy-Größe der Gradient berechnet, um die Sensitivität der jeweiligen Größe auf den Funktionswert zu ermitteln.

Mit den Grenz- und Anfangswerten der Fuzzy-Parameter, dem Startwert für die Zielfunktion sowie den Gradienten wird der Optimierer NLPQLP aufgerufen. Dieser ermittelt aus den Eingangswerten neue Fuzzy-Parameter innerhalb der vorgegebenen Grenzen, um den Funktionswert der Zielfunktion zu minimieren. Für die weitere Auswertung ist die Analyse des Rückgabewertes IFAIL erforderlich (Tabelle 8).

Tabelle 8: Rückgabewerte des Optimierers NLPQLP

Rückgabewert IFAIL	Erläuterung und weiteres Vorgehen
-1	die Fuzzy-Parameter wurden geändert und es ist eine neue Berechnung der Zielfunktion erforderlich
-2	die Neuberechnung der Gradienten ist erforderlich
0	es wurde eine minimale Zielfunktion gefunden; die Optimierung ist erfolgreich beendet worden; die Ergebnisse (Wert der Zielfunktion und/oder Parameterkombination) können ausgegeben werden
> 0	es trat ein Fehler in NLPQLP auf (z.B. zu viele Iterationen, Überlauf, Unterlauf, keine Lösung gefunden): die bis zum Auftreten des Fehlers beste Lösung wird zurückgegeben. In diesem Fall ist vom Nutzer festzulegen, ob diese zu verwenden ist oder verworfen wird.

In Abbildung 27 ist der Ablauf im Steuerprogramm als Flussdiagramm dargestellt. Die farblichen Abstufungen stellen die jeweiligen Abschnitte der Ein-/Ausgabe, Initialisierung und des Optimierungsvorgangs dar.

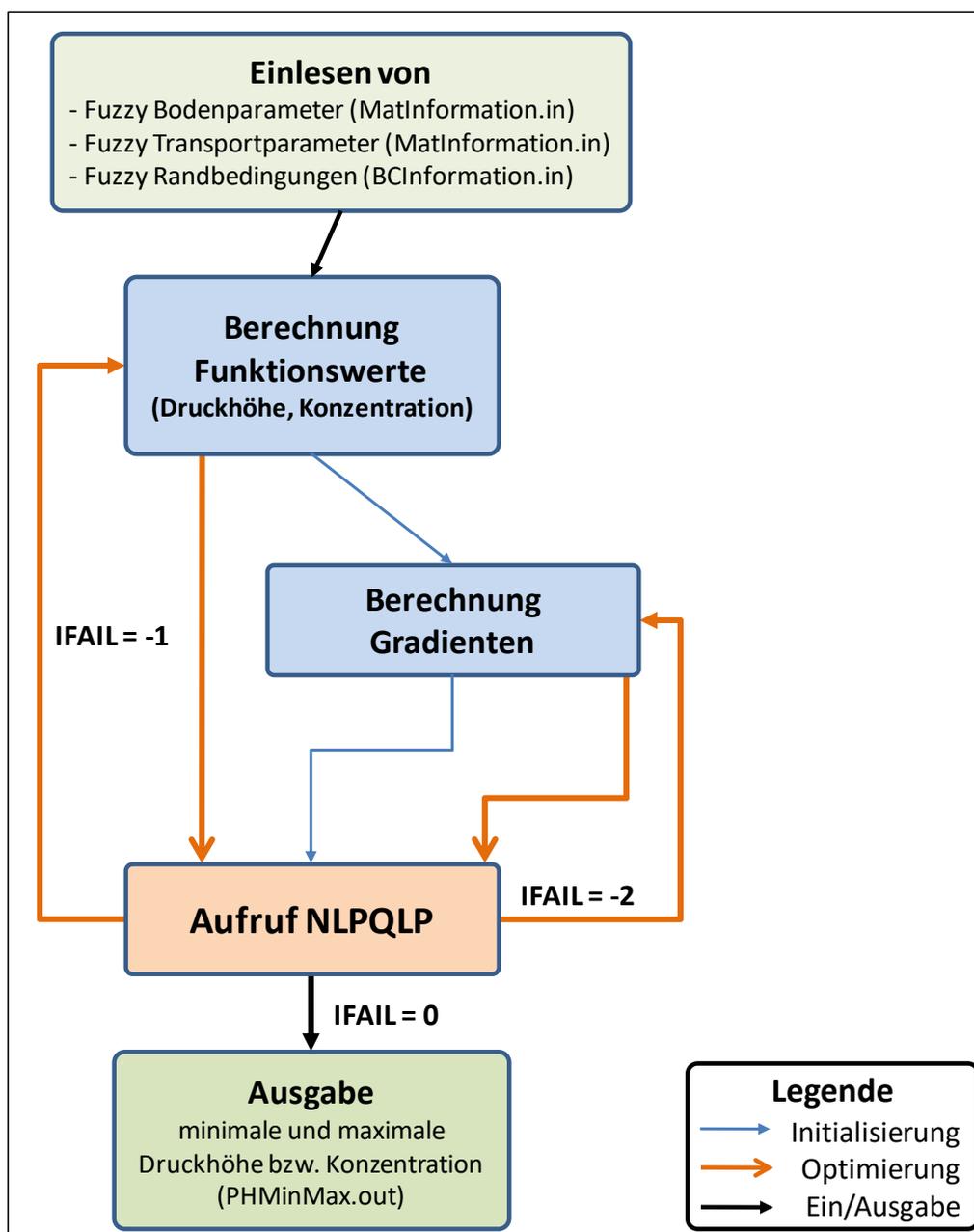


Abbildung 27: Ablauf des Steuerprogramms zur Berechnung der Schwankungsbreiten mit Hilfe von NLPQLP

4.8.10 Erweiterung des Verfahrens auf instationäre Berechnungsfälle

Bislang wurden ausschließlich stationäre Simulationsläufe und -szenarien betrachtet, die zudem auf die Strömungsberechnung beschränkt waren. In der Praxis liegen jedoch überwiegend komplexere Szenarien vor, bei denen mit instationären Strömungsprozessen ge-

rechnet werden muss. Ein typischer Anwendungsfall liegt beispielsweise bei der Durchsickerung von Erddämmen und Hochwasserschutzdeichen vor, wo zusätzlich zum schwankenden Hochwassereinstau auch die atmosphärischen Randbedingungen (Niederschlag, Verdunstung und Pflanzenbewuchs) nicht zu vernachlässigen sind. Bei der Auswertung solcher Simulationen ist unter anderem der zeitliche Verlauf im Strömungsraum bei auftretenden Starkniederschlagsereignissen (welche oft einem Hochwasser vorausgehen) und der schließlich steigende Hochwasserpegel von Interesse bzw. die Ausbreitung der Wassersättigung innerhalb des Deichkörpers, da diese eine wesentliche Grundlage für geometrische Stabilitätsberechnungen darstellen.

Wird darüber hinaus auch der Transport von im Bodenwasser gelösten Stoffen bzw. die Ausbreitung von Wärme (Geothermik) betrachtet, muss unabhängig vom Strömungsprozess in der Regel immer von einem instationären Simulationsszenario ausgegangen werden, da z.B. der zeitliche Verlauf einer Schadstofffront unter gegebenen Strömungsverhältnissen oder der zeitliche Eintrag von Schadstoffen ins Grundwasser von Interesse für eine Modellauswertung sind bzw. in einigen Fällen auch gesetzlich gefordert werden (z.B. Sickerwasserprognose nach dem Bundesbodenschutzgesetz).

Die instationäre Berechnung beruht im Grunde auf der wiederholten Anwendung des Algorithmus in Abbildung 27, wobei das Einlesen der unscharfen Größen nur einmal zu Beginn der Simulation erforderlich ist. Es wird hierbei davon ausgegangen, dass eine konkrete Kombination von Parametern und Randbedingungen für einen Simulationslauf konstant ist und damit ein für den Optimierungsprozess eindeutiges Ergebnis liefert. Da der Algorithmus NLPQLP vom Prinzip her keine Zeitabhängigkeit berücksichtigt, ist der zeitliche Aspekt mit dem Simulationsprogramm abzubilden. Mit jedem Durchlauf einer Simulation liegt eine Realisierung des Funktionswertes vor. Auf diese Weise kann durch sukzessive Änderung (Erhöhung) des zu berechnenden Zeitraums eine stückweise Abbildung des zeitlich variablen (instationären) Prozesses erreicht werden. Für die Veränderung Δt des Simulationszeitraums können verschiedene Methoden angewendet werden:

- Vorgabe durch das verwendete Simulationsprogramm:
Bei Programmen mit automatischer Zeitschrittweitensteuerung werden die einzelnen Zeitschritte so angepasst, dass der numerische Lösungsprozess mit möglichst wenigen Iterationen erfolgt und so der Prozessverlauf mit geringen Quantisierungsfehlern abgebildet wird. Dies bedeutet, dass beispielsweise bei hohen Infiltrationsfronten viele Iterationen zur numerischen Lösung erforderlich sind und die Zeitschritte vom Simulationsprogramm entsprechend kleiner gewählt werden. Der Vorteil liegt darin, dass der Simu-

lationsverlauf (und damit eventuell auftretende Peaks in der Zielfunktion) entsprechend der Modellauflösung abgebildet wird. Der Nachteil liegt darin, dass bei Auftreten kleiner Zeitschritte der numerische Aufwand ansteigt und nicht bei jeder Aufgabenstellung erforderlich ist.

- Vorgabe durch feste Zeitpunkte mit konstanter Zeitschrittweite:

Die numerische Lösung der Zielfunktion wird zwar weiterhin mit der internen Zeitschrittweitensteuerung berechnet, die Abbildung der Schwankungsbreiten erfolgt jedoch in der vom Nutzer vorgegebenen Quantisierung bzw. zeitlichen Auflösung. Der Vorteil liegt im geringeren numerischen Aufwand, jedoch wird unter Umständen der Prozessverlauf nicht adäquat abgebildet. Hier gilt es, den weiteren Verwendungszweck der Simulationsergebnisse mit einzubeziehen.

5 Anwendungsbeispiele

Das vorliegende Kapitel soll die Anwendung des Programms PCSiWaPro in Einsatzszenarien zur Wasserströmung und zum Stofftransport veranschaulichen sowie die prinzipielle Tauglichkeit in den jeweiligen Gebieten aufzeigen. Das Beispiel zum Wasserhaushalt geht auf die Durchströmung von Erddämmen ein. Am Beispiel einer Sickerwasserprognose wird die Ausweisung von Parameter- und Randbedingungsunsicherheiten in Simulationsergebnissen demonstriert.

5.1 Deichdurchströmung

5.1.1 Einführung

Im Falle eines Hochwassers steht zwischen einem gefahrlosen Abfließen des Hochwassers und einer Überflutung mit möglicherweise katastrophalen Schäden oft nur die Stabilität von Hochwasserschutzanlagen, insbesondere Deichen. Diese wurden in den letzten Jahrhunderten an vielen Flussläufen zum Schutz von Siedlungen und Nutzflächen errichtet. So besitzt allein der Freistaat Sachsen über 500 km Deichanlagen. Oft sind die Anlagen historisch gewachsen und verfügen über einen inhomogenen und häufig auch unbekanntem Aufbau, der zudem nicht den aktuellen Anforderungen an einen modernen Deich erfüllt. Das Versagen eines Deiches/ Dammes kann verschiedene Ursachen haben (Haselsteiner, et al., 2002):

1. Bruch durch Überströmung
2. Versagen der Böschungen
3. Hydraulischer Grundbruch oder Gleitversagen unter Grundwasserdruck
4. Erosionsgrundbruch

Ursache 1 kann relativ einfach mit baulichen Maßnahmen (Erhöhung der Deichkrone) entgegengewirkt werden. Bei den Ursachen aus den Punkten 2-4 ist hauptsächlich die Durchsickerung des Deichkörpers verantwortlich. Speziell bei längeren Einstauzeiten und hohem Wasserstand steigt die Gefahr eines Deichversagens aufgrund der fortschreitenden Durchnässung (Aigner, 2004). Tritt Sickerwasser auf der Luftseite des Deiches oberhalb einer vorhandenen Drainage aus, kann dies zu Rutschungen und damit zu Deichbrüchen führen. Da diese Vorgänge jedoch innerhalb eines Deiches ablaufen, ist ein entsprechender Schutz (Deichverteidigung) schwierig zu realisieren. Um die Standfestigkeit eines Deiches abzuschätzen, wird traditionell die sogenannte Sickerlinie berechnet. Sie stellt die Grenzlinie des vollgesättigten zum teilgesättigten Bereich innerhalb des Deichkörpers dar

und wird ausschließlich auf der Grundlage der Strömungsvorgänge im wassergesättigten Bereich (Grundwassersimulation) als Lage der freien Grundwasseroberfläche ermittelt. Diese Berechnungen werden iterativ mittels vertikalebener numerischer Simulationsprogramme ermittelt und sind damit nur Näherungslösungen. Eine mechanische Instabilität der luftseitigen Böschung des Deiches kann jedoch auch bereits in Bereichen mit hoher Teilsättigung auftreten und damit früher, als mittels herkömmlicher Simulationsverfahren vorhergesagt wird. Dies konnte durch physikalische Versuche nachgewiesen werden (Aigner, 2004). Dabei wurden Deichkonstruktionen mit unterschiedlichen Einbauten einem stationären Wassereinstau ausgesetzt und die Zeitspanne bis zum Versagen des Deiches gemessen. Der Deich mit dem komplexesten Aufbau umfasste neben einer Berme eine Dichtwand sowie eine luftseitige Dränage (siehe Abbildung 28). Dieser zeigte sich in den Versuchen als sehr gut geeignet bei Szenarien mit längerem Hochwassereinstau.



Abbildung 28: Aufbau des physikalischen Experiments, aus (Aigner, 2004). Zu Größenangaben siehe Abschnitt 5.1.2.

5.1.2 Modellaufbau

Mit dem Programm PCSiWaPro wurde der komplexeste Modellversuch aus (Aigner, 2004) simuliert und ausgewertet. Der Modelldeich verfügt über eine Fußbreite von ca. 3,40 m (ohne Berme), einen Böschungswinkel von 1:2 bei einer Höhe von 0,77 m. In die Deichkrone ist eine Gummiwand eingelassen, welche eine Einbindehöhe von 100% der Deichhöhe aufweist. Unterhalb des Deiches wurde sowohl luft- als auch wasserseitig eine Berme angefügt (Höhe 0,30 m), um den Austausch zwischen einströmendem Wasser und Grundwasser zu ermöglichen. An der luftseitigen Böschung befindet sich eine Dränage, um überschüssiges Wasser abführen zu können. Auf Basis dieser Angaben wurde mit PCSiWaPro ein numerisches Modell aufgebaut, welches in Abbildung 29 (verzerrt) dargestellt ist.

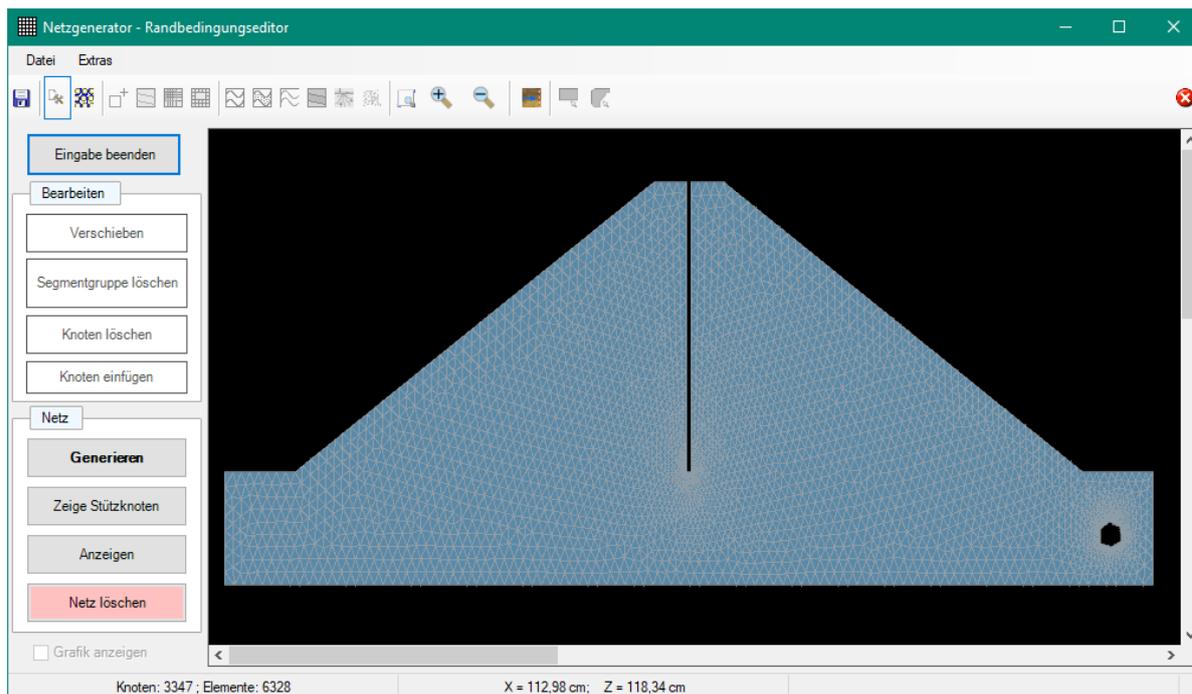


Abbildung 29: Quantisierter Modelldeich, Abbildung ist verzerrt

5.1.3 Bodenhydraulische Parameter

Als Material für den Deichkörper wurde ein homogener Boden mit Korngrößen von $d = 0,06$ mm bis 2 mm und einer gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit von $K_s = 3 \cdot 10^{-4}$ m/s verwendet. Dies ist vergleichbar mit einem eher feinsandigen Bodentyp. Die Abschätzung der VAN-GENUCHTEN-Parameter erfolgte mit Hilfe von Pedotransferfunktionen (Vereecken, et al., 1989) sowie auf Basis von Erfahrungswerten.

Tabelle 9: Bodenparameter des Modelldeichs

Φ (cm^3/cm^3)	$\theta_{w,r}$ (-)	$\theta_{l,r}$ (-)	K_s (m/s)	vGP α (1/cm)	vGP n
0,4	0,03	0	3e-4	0,02	1,8

Die in Abbildung 30 dargestellten Funktionsgraphen wurden unter Verwendung der Retentionsfunktion und der Funktion der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit mit den in Tabelle 9 angegebenen Parametern erzeugt.

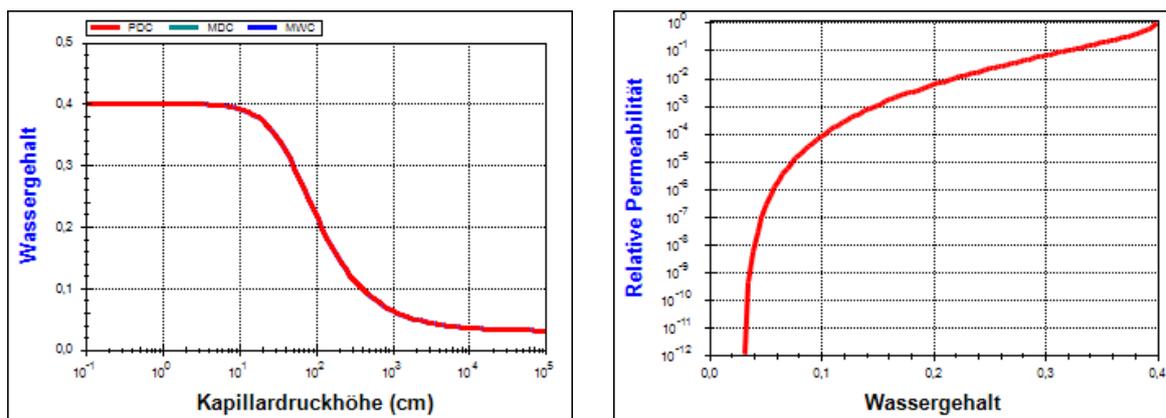


Abbildung 30: Hydraulische Eigenschaften des Modeldeichs, dargestellt anhand der Retentionsfunktion (links) sowie der relativen Permeabilität (rechts)

5.1.4 Anfangs- und Randbedingungen

Als Anfangsbedingung für die Wasserströmung und den Wasserhaushalt ist die Vorgabe einer Druckhöhe erforderlich. In der Simulation wurde eine lineare vertikale Verteilung angenommen mit Vollsättigung an der Unterkante des Deichkörpers, zur Deichkrone abnehmend.

Für die Vorgabe der Einstauhöhe des Hochwassers an der wasserseitigen Böschung wurde eine zeitkonstante Randbedingung 1. Art verwendet. Dabei wurde eine Einstauhöhe bis ca. 5 cm unterhalb der Deichkrone (Freibord) definiert.

Für die luftseitige Böschung wurde eine sogenannte Sickerfläche („seepage face“) gewählt. Wasser kann in diesen Bereich nur unter wassergesättigten Bedingungen aus dem Modellgebiet fließen, d.h. wenn die Sickerlinie aus dem Deichkörper herausreicht. Sobald Vollsättigung (Druckhöhe = 0) erreicht ist, wird dieser Zustand fixiert und der Volumenstrom berechnet. Wechselt der Systemzustand in den teilgesättigten Bereich zurück, entspricht dies einer No-Flow-Randbedingung.

Die im Modeldeich eingebaute Drainage wurde in der Simulation über eine Randbedingung 1. Art abgebildet, deren Volumenstrom berechnet wird, sobald der Bereich wassergesättigt ist. Die Randbedingung ist dabei derart definiert, dass der Volumenstrom nur nach außen gerichtet sein darf, das Modell somit nur Wasser abgeben kann. Das Einströmen von Wasser aus tieferliegenden Schichten in das Modellgebiet könnte z.B. dann auftreten, wenn aufgrund der Potenzialunterschiede die Kapillarkräfte in den Poren das Wasser nach oben „saugen“. Das durch eine Drainage aus dem Modellgebiet ausströmende Wasser kann nicht mehr zur Verfügung stehen, da es abgeflossen ist.

Darüber hinaus wurde als Begrenzung auf der Luftseite eine Randbedingung 2. Art definiert. Das einströmende Wasser soll sich nicht im Modellgebiet aufstauen und damit eine künstliche Erhöhung der Sickerlinie hervorrufen, sondern frei ablaufen können.

Tabelle 10: Randbedingungen und deren Bedeutung für die Deichsimulation

Kodierung	Bezeichnung	Bedeutung für Simulation
-7	Zeitkonstante Randbedingung 2. Art	Freie Drainage; Volumenstrom wird berechnet; freier Ablauf des Wassers auf der Luftseite, um eine künstliche Aufsättigung im Deichkörper zu verhindern
-2	Systemabhängige Randbedingung 2. Art	Luftseitige Böschung; potenzielle Sickerfläche; Wasseraustritt unter voller Sättigung möglich, dann Berechnung des Volumenstroms
+1	Zeitkonstante Randbedingung 1. Art	Vorgabe des Wassereinstaus durch Angabe der Druckhöhe
+7	Zeitkonstante Randbedingung 1. Art	Vorgabe einer Druckhöhe; nur Abstrom zugelassen; Abbildung der Drainage

5.1.5 Simulationsergebnisse

Zur Auswertung der Simulationsergebnisse ist eine Bilanzierung der Zu- und Abflüsse über die einzelnen Randbedingungen zweckmäßig. Dazu wurden die Stromraten zu verschiedenen Zeitpunkten aufgetragen (Abbildung 31), um diese besser vergleichen zu können. In das Modellgebiet gerichtete Ströme sind dabei positiv gekennzeichnet, aus dem Modellgebiet herausführende Strömungen negativ. In Abbildung 32 ist die Verteilung der Wassersättigung 10 Minuten nach Beginn des Einstaus dargestellt. Die blaue Färbung kennzeichnet Bereiche mit hoher Wassersättigung, rot gefärbte Bereiche mit geringer Wassersättigung. Deutlich ist die Wirkung der Dichtwand zu erkennen, welche zunächst unterströmt werden muss und zu einer Verzögerung der Durchsickerung des Deichkörpers führt. Zusätzlich wurde die Verteilung der Sättigung im Modellgebiet nach 60 Minuten visualisiert (Abbildung 33), um den Verlauf der Sickerlinie und die Wirkung der Drainage einschätzen zu können.

Wie aus Abbildung 31 entnommen werden kann, strömt zu Beginn der Simulation sehr viel Wasser in den Deichkörper ein (RB = +1, grüne Linie). Die Ordinate wird hier verkürzt dargestellt (graue Linie), da der Wertebereich der Stromrate über diese Randbedingung mehr als eine Größenordnung höher ist als der der übrigen. Der anfangs wasserungesättigte Deich nimmt dieses Wasser solange auf, bis der Porenraum gefüllt ist. Erst dann werden die Drainage (RB = +7) und der freie Auslauf (RB = -7) wirksam (ab ca. 20 Minuten). Nach einer Stunde Einstauzeit stellen sich stationäre Strömungsverhältnisse ein. Es strömt dann nur noch so viel Wasser in den Deich ein, wie durch die Drainage und den freien Auslauf abgeführt werden.

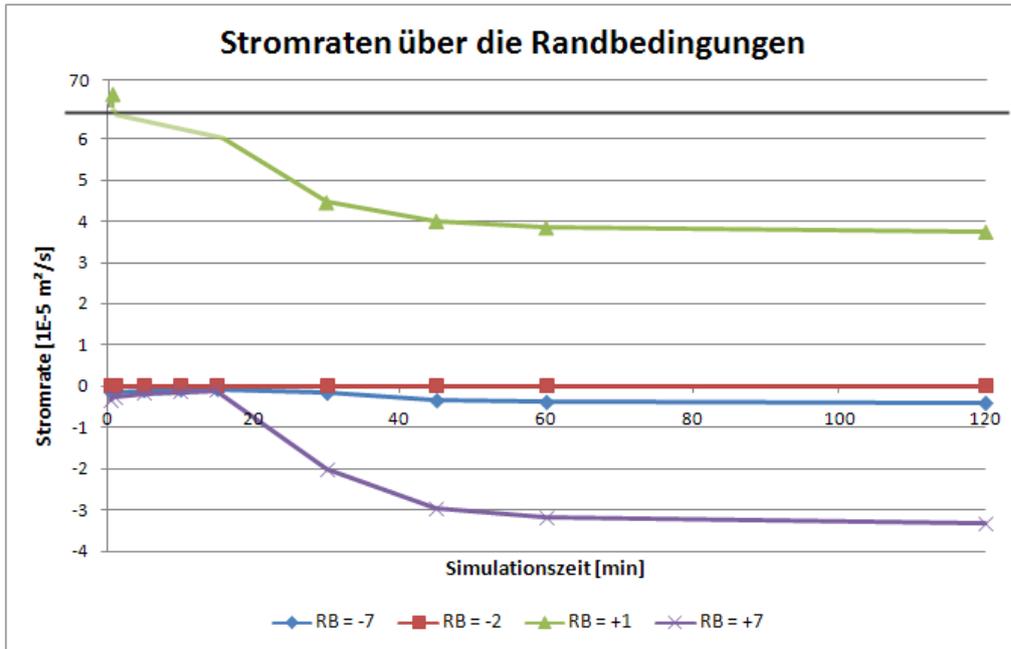


Abbildung 31: Volumenströme über die Randbedingungen. Zu erkennen ist der quasistationäre Zustand nach ca. 60 Minuten.

Abbildung 33 zeigt den quasi-stationären Zustand der Wassergehaltsverteilung nach einer Stunde Simulationszeit. Der Bereich der vollständigen Wassersättigung hat die Luftseite noch nicht erreicht und im Bereich der Drainage fällt der Wassergehalt ab, da das überschüssige Wasser dräniert.

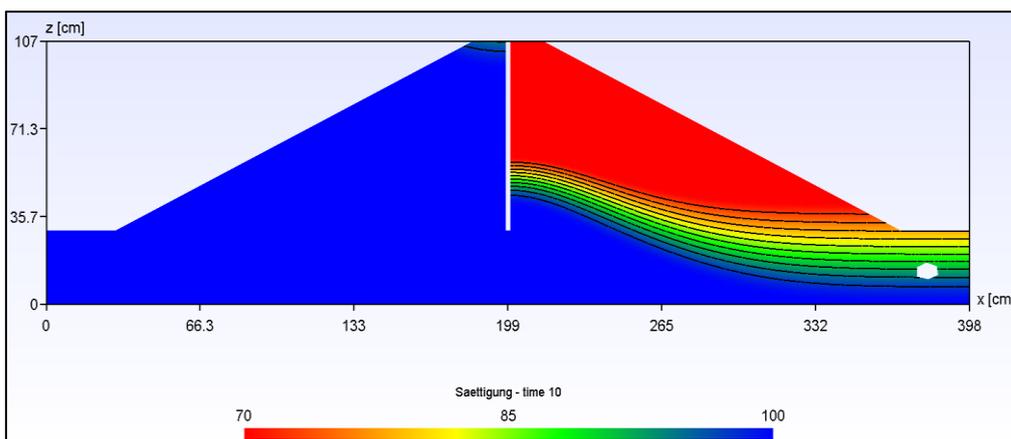


Abbildung 32: Verteilung des Wassergehalts nach 10 Minuten Einstau. Blaue Bereiche repräsentieren eine hohe Wassersättigung. Die Wirkung der Dichtwand ist deutlich erkennbar.

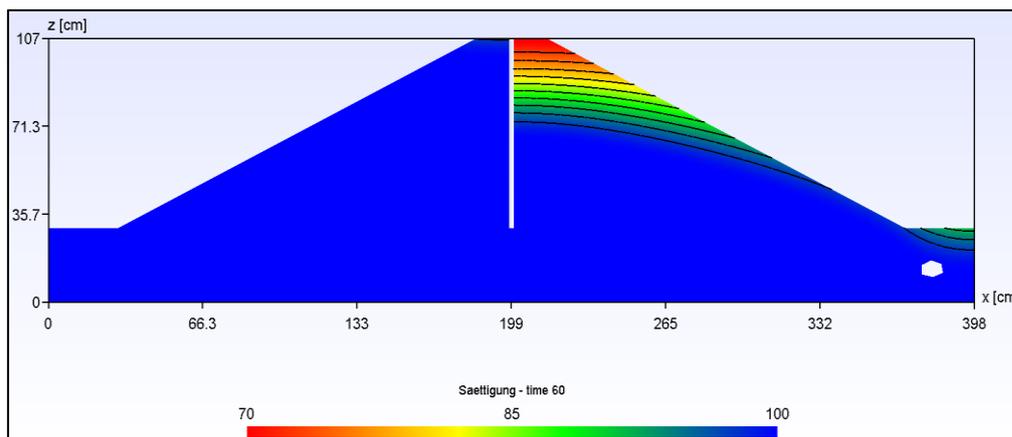


Abbildung 33: Verteilung des Wassergehalts nach 60 Minuten bei maximalem Einstau. Die Sickerlinie erreicht nahezu die luftseitige Böschung.

5.1.6 Zusammenfassung

Die Modellierung und Simulation der physikalischen Modellversuche mit PCSiWaPro sowie die anschließende Auswertung und Bilanzierung der Stromraten über die Randbedingung zeigen eine gute Übereinstimmung zwischen den Berechnungsergebnissen und den Aussagen in (Aigner, 2004). Die Bilanzen weisen plausible Werte auf. So zeigt sich im quasi-stationären Zustand nach einer Stunde Einstauzeit keine Speicherinhaltsänderung mehr. Der Zustrom an der Wasserseite ist in diesem Fall gleich der Summe aus Abstrom über die Dränage und dem freien Ablauf an der Luftseite des Deichkörpers. Die Sickerlinie erreichte innerhalb des Simulationszeitraums gerade die luftseitige Böschung, der beschriebene Modelldamm zeigte jedoch bereits eher Rutschungen, so dass angenommen werden kann, dass diese unter teilgesättigten Bedingungen erfolgten.

Verbesserungen in der Prognose der Standfestigkeit können sich durch die kombinierte Betrachtung von Wassergehalt im Deich und geotechnischen Berechnungen zur Rutschungsstabilität, Rissbildung, Gelände- und Böschungsbruch ergeben.

Ein Komplexbeispiel zur Dammdurchströmung, welches ebenfalls mit PCSiWaPro simuliert wurde, ist in (Hasan, 2013) beschrieben.

5.2 Modellgestützte Sickerwasserprognose mit unscharfen Eingangsdaten

Das Beispiel soll die Möglichkeiten zur Berücksichtigung unscharfer Eingangsdaten demonstrieren. Da es sich um den Anwendungsfall einer modellgestützten Sickerwasserprognose handelt, werden sowohl bodenhydraulische als auch Transportparameter berücksichtigt.

5.2.1 Standortbeschreibung und Modellaufbau

Bei Erkundungen am Standort einer ehemaligen chemischen Reinigung wurde in einer Grundwasserprobe eine LHKW-Konzentration (PER – Tetrachlorethen) von 9,9 µg/L nachgewiesen, was nahezu dem Prüfwert der Bundesbodenschutzverordnung (BBodSchV) von 10 µg/L entspricht. Es ist daher eine Sickerwasserprognose zu erstellen, wobei die Modelldaten (Schichtenaufbau und Geometrie) auf der Basis eines gebohrten Schichtprofils einer Grundwassermessstelle abgeleitet werden. Das Profil umfasst den Bereich der Transportzone innerhalb einer Geschiebemergel-/ Geschiebelehmschicht oberhalb des Kapillarsaums. Als Quellterm (Quelle der Schadstoffkonzentration) wird die anthropogene Auffüllung der oberen 1,5 m unter Geländeoberkante (GOK) angesehen. Die Modellierung des Stofftransportprozesses umfasst daher ausschließlich den Bereich der Geschiebebodenschicht. Die obere Randbedingung wird als Randbedingung 2. Art (Stromrate) festgelegt und repräsentiert die langjährige mittlere Grundwasserneubildungsrate. Die untere Randbedingung des Modells ist durch den Grundwasserspiegel charakterisiert und wird durch eine Randbedingung 1. Art mit konstanter Druckhöhe $p_h = 0$ cm im Modell abgebildet.

Am Standort der chemischen Reinigung wurde 20 Jahre lang produziert, sodass im Modell von einer Quellschüttdauer (Eintragsdauer in den Boden) mit dieser Zeitspanne gerechnet wurde. Die Quellkonzentration wird aus der maximal gemessenen Konzentration einer Bodenluftmessstelle abgeleitet, indem diese in eine entsprechende Sickerwasserkonzentration umgerechnet wird. Da zu Beginn der Simulation von einer schadstofffreien Transportzone ausgegangen wird und der zeitliche Verlauf der Konzentration an der Modellunterkante (Ort der Beurteilung) von Interesse ist, ist die Transportsimulation instationär zu berechnen.

5.2.2 Unsicherheiten der Modellparameter

Da es für den Geschiebeboden keine umfassenden Untersuchungen gibt, sind die Bodenparameter mit Unsicherheiten behaftet, welche es in der Simulation zu berücksichtigen gilt.

Im vorliegenden Fall wurden der VAN GENUCHTEN-Parameter n und die gesättigte hydraulische Leitfähigkeit K_s als unsicher eingestuft.

Auch für die Transportparameter liegen keine genaueren Untersuchungen vor. Aus der Literatur sind die Abbau- und Sorptionsparameter bekannt, welche jedoch bodenspezifische Werte annehmen können. Somit sind auch diese Unsicherheiten in der Sickerwasserprognose zu berücksichtigen.

Tabelle 11: Zusammenfassung der berücksichtigten Unsicherheiten in den Modellparametern

	Parameter			
	Bodenparameter		Transportparameter	
Unsicherheitsgrenzen (Zugehörigkeitswerte)	VAN GENUCHTEN-Parameter n (-)	gesättigte hydraulische Leitfähigkeit K_s in m/a	K_D (L/kg) (linearer Sorptionskoeffizient)	μ_w (d ⁻¹) (Abbau 1. Ordnung)
untere Grenze α_0 -Level	1,50	34,0	0,16	0,63
obere Grenze α_0 -Level	1,60	45,0	0,39	0,80
untere Grenze α_1 -Level	1,51	35,0	0,25	0,68
obere Grenze α_1 -Level	1,57	42,0	0,39	0,78

5.2.3 Ergebnisse

Als Ergebnis einer Sickerwasserprognose ist die Durchbruchkurve der Schadstoffkonzentration am Ort der Beurteilung (OdB) anzusehen. In Abbildung 34 sind die berechneten Kurven für die minimale und maximale Konzentration pro Zeitschritt am OdB dargestellt. Die Ergebnisse liegen in einer Auflösung von einem Jahr vor. Die Peaks in beiden Kurven unterscheiden sich nur um wenige Jahre, jedoch zeigt die Kurve der maximalen Konzentration einen erheblich steileren Anstieg und ein längeres Tailing nach dem Durchlaufen des Peaks. Deutlich zu sehen ist das Plateau bei der Kurve der Maximalkonzentration ab ca. 36 Jahren Simulationszeit. Auf die Ursache dieses Kurvenverlaufs wird im folgenden Abschnitt eingegangen.

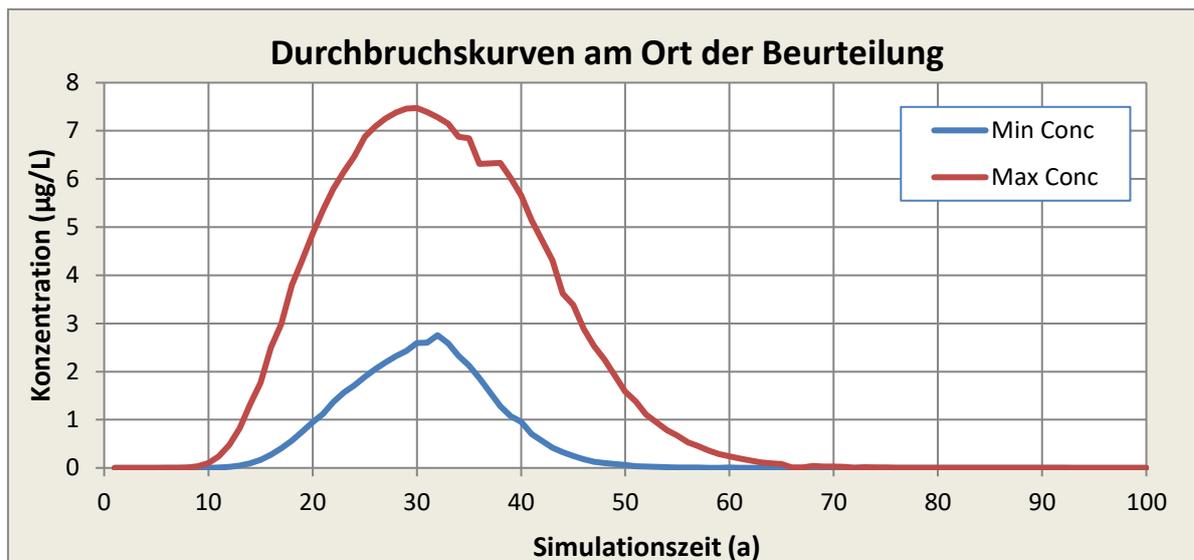


Abbildung 34: Durchbruchskurven als Ergebnis der Sickerwasserprognose

5.2.4 Probleme bei der Fuzzy-Modellierung mit NLPQLP

Bei der Durchführung der instationären Berechnungen mit dem Optimierer NLPQLP ergaben sich bei einigen Durchläufen unverhältnismäßig hohe Anzahlen von Iterationsaufrufen (Funktions- und Gradientenberechnungen). Statt der durchschnittlichen 2-10 Aufrufe pro Zeitschritt waren hier bis zu 3000 Auswertungen erforderlich. Eingehendere Untersuchungen zeigten, dass diese im Zusammenhang mit numerischen Oszillationen der Finiten-Elemente-Lösung auftreten. Die Oszillationen führen in der Folge zu einer mehrdeutigen Lösung für einen Parametersatz, sodass die daraus berechneten Gradienten und Funktionswerte nicht eindeutig sind und daher zu Schwingungen im Iterationsverhalten des Optimierers führen. Dies ist insbesondere problematisch, da durch die Unsicherheiten der Randbedingungen und Parameter bzw. deren Kombination auch dann Oszillationen entstehen können, wenn die räumliche und zeitliche Quantisierung den formalen Ansprüchen an einen stabilen Simulationslauf genügen. Neben der vom Optimierer zurückgegebenen Fehlermeldung sind solche Schwingungen auch in den Diagrammen der Ergebnisauswertungen zum Teil deutlich erkennbar (siehe Abbildung 34), z.B. als treppenartiger Verlauf oder als Ausreißer einer an sich stetig verlaufenden Kurve.

5.3 Test der Parallelisierung am synthetischen Beispiel

In Abschnitt 4.5 wurde auf die Parallelisierung des Simulationskerns eingegangen, der die numerische Lösung der partiellen Differentialgleichungen durchführt. Die aufwändige Numerik in Verbindung mit transienten Problemstellungen führen zu langen Rechenzeiten,

welche durch eine parallele Ausführung auf mehreren Prozessoren oder Prozessorkernen verkürzt werden können. Anhand eines synthetischen Beispiels soll die potentielle Beschleunigung der implementierten Parallelisierungsmethoden untersucht werden. Neben dem erreichten Speed Up wird auch ein Skalieren der Methoden mit wachsender Zahl an Finiten Elementen analysiert. Durch die Nichtlinearität von Gleichung (1) und des damit erforderlichen iterativen Lösungsprozesses beschränkt sich das Modell auf die Betrachtung des Wasserhaushalts, da dieser Bereich des Lösungsprozesses maßgeblich die Leistungsfähigkeit der Simulation beeinflusst. Die Simulationsrechnungen wurden auf einem PC mit 12 verfügbaren physischen CPU-Kernen und 24 GB RAM durchgeführt.

5.3.1 Modellbeschreibung

Das Modell simuliert die zweidimensionale transiente Infiltration von Wasser in einen homogenen, isotropen Boden. Die geometrischen Abmessungen betragen 100 cm in horizontaler und 200 cm in vertikaler Richtung. Zur Untersuchung der Skalierung wurden 2 Quantisierungen erstellt.

Tabelle 12: Charakterisierung der Modelle des synthetischen Beispiels

Bezeichnung	Anzahl Knoten	Anzahl Finite Elemente
Modell a	10.201	20.000
Modell b	100.701	200.000

5.3.2 Parametrisierung des Modells

Der Modellbereich ist mit einer Anfangsdruckhöhe von -100 cm ungesättigt. Am oberen Rand wird zentriert über eine Breite von 30 cm eine zeitkonstante Randbedingung 1. Art mit einem Randwert von -1 cm definiert. Am unteren Rand wird über die gesamte Breite eine Randbedingung 2. Art zugewiesen, damit Sickerwasser frei ablaufen kann (siehe Abbildung 36 links). Aufgrund des durch die Randbedingung entstehenden Gradienten strömt Wasser durch die obere Berandung in den Boden ein und sättigt diesen mit fortschreitender Simulationszeit nahezu auf.

Der homogene Boden weist Merkmale eines schluffigen Sandes auf und verfügt über die in Tabelle 13 definierten hydraulischen Parameter:

Tabelle 13: hydraulische Parameter des im Beispiel verwendeten Bodens

Φ (cm ³ /cm ³)	K _s -Wert (cm/d)	$\theta_{w,r}$ (-)	$\theta_{w,l}$ (-)	VAN-GENUCHTEN- Parameter α (cm ⁻¹)	VAN-GENUCHTEN- Parameter n (-)
0,43	25	0,08	0	0,04	1,56

Unter Verwendung der Retentionsfunktion sowie der Funktion der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit wurden die Funktionsgraphen in Abbildung 35 erzeugt.

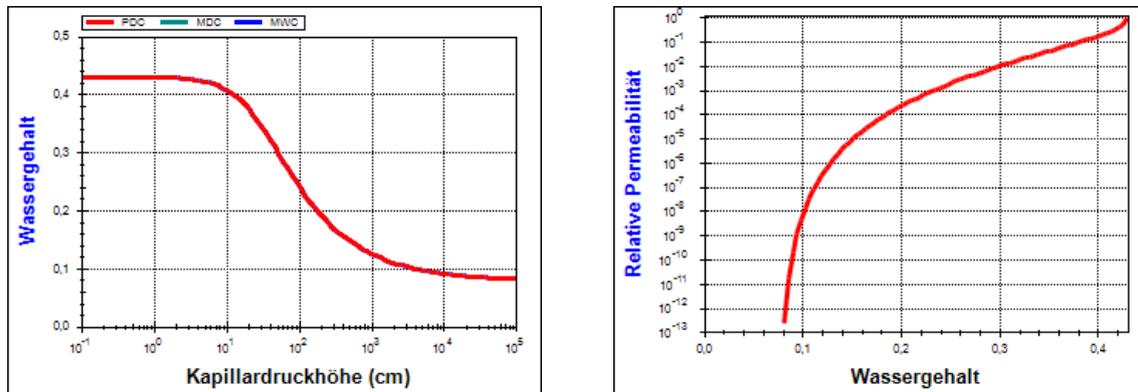


Abbildung 35: hydraulische Eigenschaften des im Beispiel verwendeten Bodens, dargestellt anhand der Retentionsfunktion (links) und der relativen Permeabilität (rechts)

5.3.3 Simulation und Auswertung

Die Simulationszeit des Modells wurde auf 2 Tage festgelegt. Für beide Modellquantisierungen galten identische Einstellungen hinsichtlich Iterationskriterium und Zeitschrittweitensteuerung. Da das Speichern von Modelldaten nur seriell erfolgen kann und damit die Ergebnisse verfälschen würde, wurde auf eine Ausgabe von Zwischenergebnissen während der Testsimulationen verzichtet. In Abbildung 36 (rechts) ist exemplarisch die Druckhöhenverteilung nach 2 Tagen Simulationszeit dargestellt. Klar erkennbar ist, dass die Sättigungsfront die Bodensäule nur hälftig durchströmt hat.

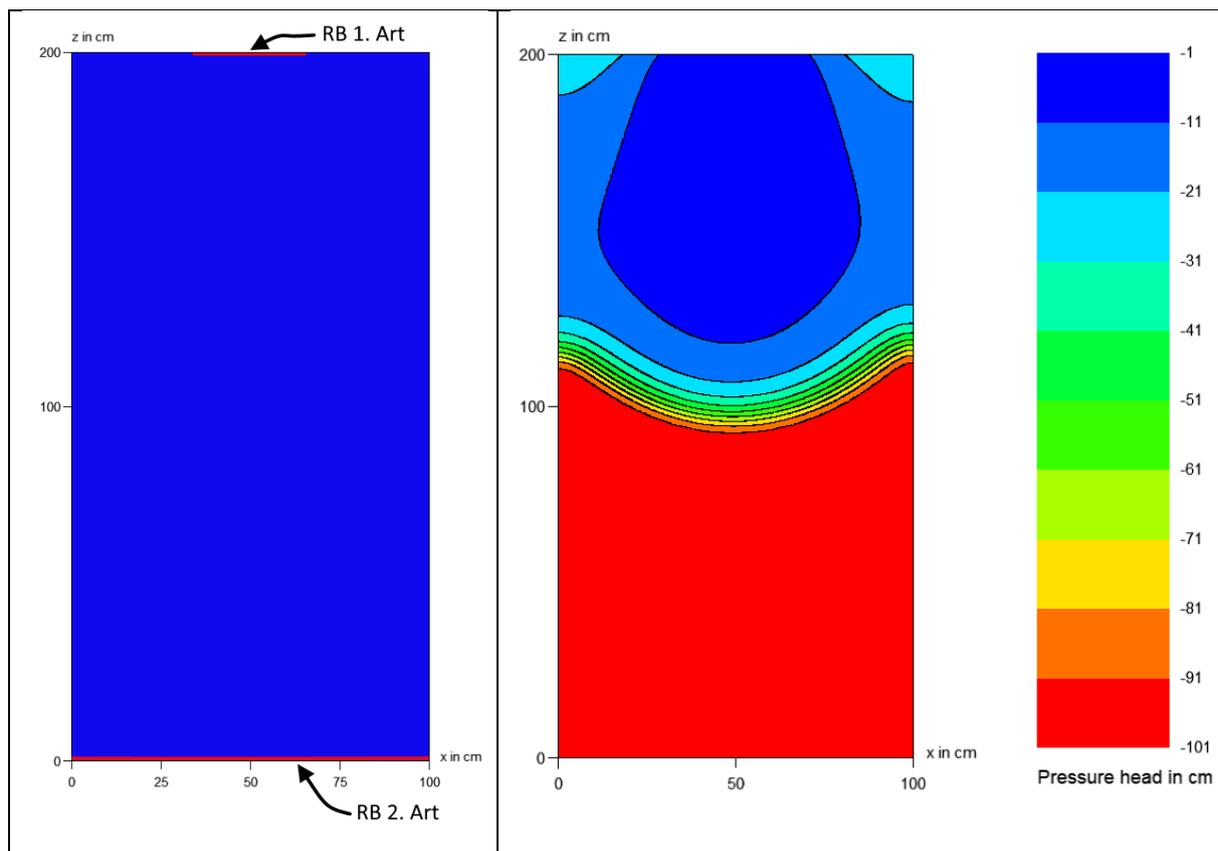


Abbildung 36: Lage und Art der Randbedingungen im Testmodell (links) sowie die Verteilung der Druckhöhe nach 2 Tagen Simulationszeit (rechts)

Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen bzgl. der Skalierung sind in Abbildung 37 dargestellt. Im linken Teil der Abbildung ist die benötigte Simulationslaufzeit in Abhängigkeit der Anzahl verwendeter CPU-Kerne dargestellt. Für Modell b ist die Verkürzung in der absoluten Rechenzeit deutlich erkennbar, während für Modell a aufgrund der Skalierung der Ordinate nahezu keine Beschleunigung erkennbar ist. Ergänzend dazu ist im rechten Teil der Abbildung der erreichte Speed Up dargestellt. Beide Modelle werden mit zunehmender Anzahl verwendeter Prozessorkerne beschleunigt. Die maximal erreichte Beschleunigung mit einem Faktor von 1,5 ist bei beiden Modellen bei einer Verwendung von 8 Prozessorkernen gegeben und nicht bei Vollaustastung (entspricht 12 CPU-Kernen), anschließend kommt es zu einer Verlangsamung der Rechengeschwindigkeit. Als Ursache für den eher geringen Speed Up können folgende Gründe genannt werden:

- Zeitaufwand zur Erzeugung der notwendigen Anzahl an Threads übersteigt den durch die Parallelisierung erzielten Zeitgewinn
- Der Anteil an seriellm Quellcode ist für eine weitere Beschleunigung zu hoch (Vorkonditionierung per LU-Zerlegung erfolgt immer seriell, Gesetz nach AMDAHL)

- Aufgrund der schwachen Besetzung der Koeffizientenmatrix und des unregelmäßigen Gitters ist bereits bei serieller Ausführung eine hohe Transferrate von und zum Hauptspeicher (RAM) erforderlich (Thum, et al., 2011). Durch die parallele Ausführung erhöhen sich die Anforderungen, da globale Variablen (Vektoren, Matrizen) auf die Prozessorkerne verteilt werden müssen und die maximale Speicherbandbreite erreicht wird.

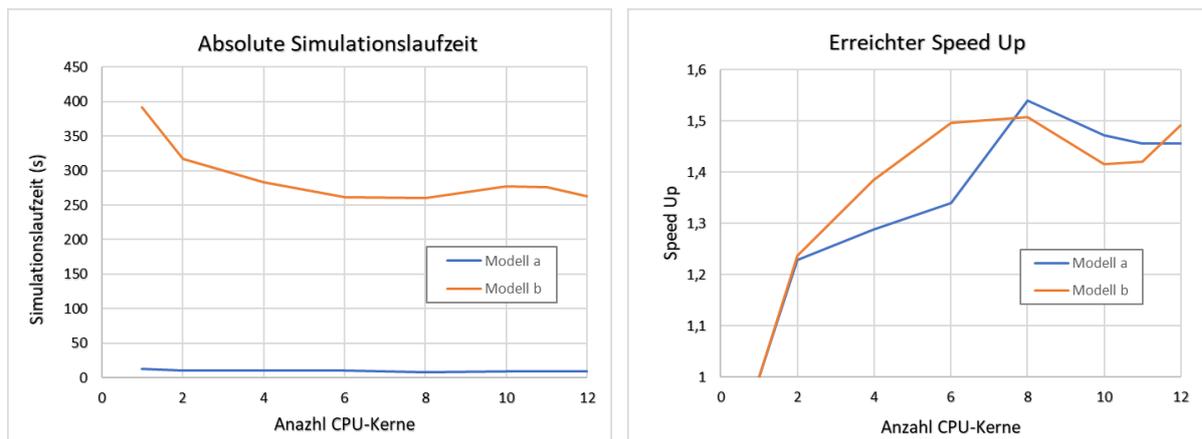


Abbildung 37: Darstellung der absoluten Simulationszeit (links) sowie des erreichten Speed Up (rechts) in Abhängigkeit von der Anzahl verwendeter CPU-Kerne

5.4 Zusammenfassung Anwendungsbeispiele

Im vorliegenden Kapitel wurden 3 Anwendungsbeispiele erläutert. Im ersten Beispiel wurde die instationäre Durchströmung eines Modelldamms beschrieben, dessen konstruktiver Aufbau und verwendete hydraulische Bodeneigenschaften einem physikalischen Experiment der Technischen Universität Dresden (Aigner, 2004) entnommen wurden. Bestandteil des Experiments war die Untersuchung verschiedener bautechnischer Maßnahmen (Dichtwand, luftseitige Dränage, Berme) zur Erhöhung der Dammstabilität bei konstantem Wassereinstau bzw. zur Verlängerung der Zeitspanne, bis ein Dammversagen eintrat. Diese Vorgaben wurden in einem numerischen Modell implementiert und anschließend simuliert. Im Postprocessing wurden die Volumenströme an den Rändern sowie die Wassergehaltsverteilung im simulierten Dammkörper ausgewertet.

Das zweite Anwendungsbeispiel erläuterte die Durchführung einer Sickerwasserprognose mit unscharfen Eingangsparametern in Form einiger Boden- und Transportparameter (K_s , vGP n , K_d sowie μ_w). Da deren Werte aus der Literatur entnommen wurden, sind diese mit Unsicherheiten behaftet, welche in der numerischen Simulation zu berücksichtigen waren.

Die berechneten Durchbruchkurven für die Konzentration des Schadstoffs PER am Ort der Beurteilung zeigen deutlich die Wirkung der Unsicherheiten der Eingangsparameter auf die Simulationsergebnisse und können als Hüllkurven interpretiert werden. Bei der Simulation wurden auch Probleme sichtbar, die durch Oszillationen bei der Transportberechnung auftraten, dadurch den gradientenbezogenen Suchalgorithmus des verwendeten Optimierers NLPQLP beeinträchtigten und im Ergebnis zu einem stufenförmigen Verlauf der Durchbruchkurven führen. Die grundsätzliche Information im Kurvenverlauf bleibt jedoch erhalten und lässt eine Interpretation der Ergebnisse zu.

Im dritten Beispiel wurde anhand zweier synthetischer Modelle (Modell a, Modell b) der Einfluss der Parallelisierung der numerischen Lösung auf die Simulationszeit untersucht. Die beiden Modelle bilden die Infiltration von Wasser in die Bodenzone ab und weisen identische Rand- und Anfangsbedingungen sowie bodenhydraulische Parameter auf. Der Unterschied in den Modellen besteht in der unterschiedlichen Quantisierungsschrittweite, um den Einfluss der Größe des Gleichungssystems auf die Skalierung zu testen: Modell a enthält 20.000 Dreieckselemente, Modell b 200.000 Dreieckselemente. Zusätzlich wurde die Anzahl verwendeter CPU-Kerne bis hin zur Vollauslastung variiert, um den maximalen Speed Up zu identifizieren. Auf dem Testsystem wurde ein maximaler Speed Up von 1,5 für beide Modellsetups erreicht, sodass letztlich eine Einsparung von 50 % Rechenzeit erzielt werden kann. Auffällig ist dabei, dass dieser Wert nicht bei Vollauslastung des Testsystems erreicht wird, sondern für beide Modelle bei 66 % der verwendeten Systemressourcen. Die Ursachen hierfür liegen sowohl in der Hard- als auch der Softwareseite begründet.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Ein wesentlicher Aspekt dieser Arbeit ist die Entwicklung des Simulationsprogramms PCSiWaPro. Ursprünglich als Werkzeug zur modellgestützten Sickerwasserprognose entwickelt, ist das Einsatzgebiet der Software jedoch erheblich weiter gefasst, welches unter anderem in den Anwendungsbeispielen verdeutlicht wird.

Ausgehend von der Bedeutung der ungesättigten Zone unter anderem für die Agrarwirtschaft, wurden die mathematischen Grundlagen erläutert sowie Ansätze zur numerischen Lösung der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungen für den Wasserhaushalt und den Stofftransport diskutiert. Dabei konnte auf das bestehende Simulationsprogramm SWMS_2D (Šimunek, et al., 1994) und dessen Erweiterung durch (Kemmesies, 1995) aufgebaut werden. Das Programm PCSiWaPro ist in der Lage, die Strömungs- und Stofftransportprozesse in der ungesättigten Zone stationär oder instationär abzubilden. Das Modellgebiet kann aufgrund des gewählten numerischen Verfahrens, der Methode der Endlichen Elemente, unregelmäßig geformt sein und lokale oder gebietsweise Netzverfeinerungen aufweisen. Die Abbildung der Prozesse erfolgt in zwei Dimensionen: horizontal-eben, vertikal-eben oder rotationssymmetrisch.

Den Bodenwasserhaushalt bzw. Strömungsprozess des Wassers bildet das Programm über die RICHARDS-Gleichung (Richards, 1931) ab und damit ist in der Lage, auch teilgesättigte Bereiche bei der Simulation zu berücksichtigen. Der vorliegende numerische Ansatz bedingt die Kenntnis zweier Funktionen, um die bodenhydraulischen Eigenschaften beschreiben zu können: die Saugspannungs-Sättigungs-Kurve (Retentionsfunktion) sowie die Funktion der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit. Die Verwendung des geschlossenen Ansatzes nach VAN GENUCHTEN (van Genuchten, 1980) und LUCKNER (Luckner, et al., 1989) ermöglicht die Beschreibung beider Kurven mit einem Satz aus Parametern. Basierend auf diesen Grundlagen wurde der von DURNER (Durner, 1992) entwickelte Ansatz zur Implementierung einer Dual-Porosität eingeführt. Gemessene Werte der Saugspannungs-Sättigungskurve sowie der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit multi-modaler Böden können damit durch Parameterfitting gut funktional beschrieben werden, gleichzeitig bleiben numerisch günstige Eigenschaften wie Monotonie und Stetigkeit erhalten.

Die Beschreibung des Transports eines im Wasser gelösten Migranten erfolgt mit Hilfe der Konvektions-Dispersions-Gleichung, welche um Terme für Adsorption und Abbau nullter sowie erster Ordnung in flüssiger und fester Phase ergänzt wird, sodass Retardation und Reaktionen Berücksichtigung finden können. Die Adsorption von Stoffen wird durch eine allgemeine Sorptionsgleichung beschrieben und ermöglicht die Betrachtung der nichtlinea-

ren Isothermen nach LANGMUIR (Langmuir, 1916), FREUNDLICH (Freundlich, 1906) sowie des linearen Ansatzes.

Ein Fokus der Programmentwicklung lag unter anderem auf der Implementierung einer grafischen Benutzeroberfläche (GUI). Die GUI sollte mehrere Merkmale aufweisen, welche die Modellierung vereinfachen sollen. Neben einer datenbankgestützten Datenhaltung für die Modell- und Ergebnisdaten ist die Anwenderunterstützung sowie das Abfangen von Eingabefehlern wichtig. Die Anforderungen des Projekts Sickerwasserprognose (Gräber, et al., 2007) wurden unter anderem durch die Entwicklung eines Assistenten umgesetzt, der in 5 Schritten zum Ergebnis einer computergestützten Sickerwasserprognose führt. Weiterhin wurden Werkzeuge und Schnittstellen implementiert, die den Anwender bei der Abschätzung von erforderlichen Eingabegrößen unterstützen. Beispielhaft genannt seien die Ermittlung der bodenhydraulischen Parameter durch Einbindung von Pedotransferfunktionen (Vereecken, et al., 1989) oder der DIN 4220 (DIN 4220:2008-11, 2008). Atmosphärische Randbedingungen wie Niederschlag und Evaporation können mit Hilfe eines gekoppelten Wettergenerators (Nitsch, et al., 2007) auf Basis realer Klimazeitreihen des DWD für beliebige Zeiträume generiert und in der Simulation verwendet werden.

Eingangsdaten für numerische Modelle, insbesondere im Boden- und Grundwasserbereich, sind oft nur unzureichend genau bekannt, müssen geschätzt werden oder weisen Fehler durch die zugrundeliegenden Messverfahren auf. Zusammengefasst können diese auch als unscharfe Eingangsdaten bezeichnet werden. Im Bodenbereich können sowohl Randbedingungen als auch bodenhydraulische Parameter und Stofftransportparameter als unscharfe Eingangsdaten genannt werden. Um derartige Unschärfen auch in den Berechnungsergebnissen von numerischen Simulationen ausweisen zu können, wurde die Fuzzy-Set-Theorie (Schulz, 1997) verwendet, die eine Zuordnung der Unsicherheiten über sogenannte α -Schnitte ermöglicht. Für jeden unscharfen Parameter kann dessen Schwankungsbreite definiert und in der Simulation berücksichtigt werden. Die Ausweisung der Unschärfen im Ergebnis erfolgt unter Angabe des sich ergebenden Minimums und Maximums der berechneten Größe (Druckhöhe, Konzentration). Durch die Nichtlinearität der betrachteten Prozesse selbst, aber auch durch die Parametrisierung (Retentionsfunktion, nichtlineare Sorption, Abbau erster Ordnung) von Bodenhydraulik und Stoffeigenschaften war die Einbindung eines nichtlinearen Algorithmus (NLPQLP) erforderlich (Schittkowski, 2006). Das in (Schulz, 1997) vorgestellte Verfahren wurde auf die Betrachtung instationärer Prozesse erweitert, um insbesondere Ergebnisse aus der Stofftransportsimulation (Durchbruchkurven) adäquat berücksichtigen zu können. Insgesamt zeigt sich das vorgestellte Verfahren relativ robust und benötigt in der Regel nur sehr wenige Berechnungen, um die

Minima und Maxima eines Zeitschritts zu ermitteln. Problematischer wird es, falls numerische Oszillationen das Simulationsergebnis beeinflussen und damit keine eindeutige Zuordnung der daraus berechneten Sensitivitäten durch NLPQLP erlauben. In diesem Fall steigt die Zahl der benötigten Iterationen eines Zeitschritts und der Verlauf der Durchbruchkurven zeigt einen plateauartigen oder treppenförmigen Charakter.

Die Veröffentlichungen anderer Autoren (Helm, 2008), (Hasan, 2013) oder (Guo, 2015) und die in dieser Arbeit beschriebenen Anwendungsbeispiele zeigen, dass das Programm in verschiedenen Fachbereichen eingesetzt werden kann. Dennoch zeigt sich in einigen Aspekten noch Bedarf weiterführender Untersuchungen und Entwicklungen, die in der vorliegenden Arbeit nicht behandelt wurden und an dieser Stelle kurz erwähnt seien.

Obwohl die dominante Strömungsrichtung in der Bodenzone vertikal gerichtet ist und viele Probleme auch ein- oder zweidimensional simuliert werden können, ist für bestimmte Anwendungen die Betrachtung der dritten Raumdimension erforderlich. Zwei Beispiele sollen dies verdeutlichen. Die durch Saugkerzen erzeugte, lokal begrenzte, Drainage führt zu einer erhöhten Saugspannung und damit einem veränderten Strömungsfeld im Nahbereich der Kerze (Umströmen), welches adäquat nur im dreidimensionalen Raum abgebildet werden kann. Als Grundlage geotechnischer Standsicherheitsbetrachtungen von Kippenböschungen im Sanierungsbergbau dienen Potential- und Sickerlinien, um Liegenddrücke und die Lage der freien Grundwasseroberfläche beurteilen zu können. Grundsätzlich erfolgt die gutachterliche Auswertung mithilfe zweidimensionaler Schnittdarstellungen, die wiederum aus den Ergebnissen vertikal-ebener Simulationen erzeugt werden. Für eine korrekte Aussage ist Voraussetzung, dass der Schnitt parallel zur Strömungsrichtung verläuft. Diese Voraussetzung ist jedoch nicht immer gegeben, sodass eine Komponente des Strömungsfeldes unberücksichtigt bleibt und unzureichende Ergebnisse liefern kann. Eine gesamtheitliche Betrachtung des Strömungsfeldes in 3D bietet die Möglichkeit, die für die gutachterliche Auswertung verwendeten Schnittdarstellungen quasi beliebig zu definieren, ohne Einbußen in der Aussagekraft zu verursachen.

Die nichtlinearen Eigenschaften der RICHARDS-Gleichung sowie der dadurch erforderliche Aufwand zur numerischen Lösung erschweren den Einsatz in hydrologischen oder hydrogeologischen Großraummodellen, wie sie beispielsweise im Grundwasserbereich möglich sind. Die insbesondere durch große Gradienten auftretenden Oszillationen können durch feine Quantisierungen und kleine Zeitschritte minimiert und eliminiert werden, führen jedoch gleichzeitig zu sehr großen Gleichungssystemen, auch bereits bei kleinräumigen 3D-Modellen. Die Verwendung von Finiten Elementen 2. Ordnung mit nichtlinearen Ansatz-

funktionen, des NEWTON-Verfahrens als Ergänzung zum verwendeten Picard-Verfahren oder der Einsatz von GPGPU (Aissa, 2017) zur effizienteren Parallelisierung haben das Potenzial, auch großskalige Problemstellungen mit komplexen Randbedingungen simulieren zu können. Grundlage dafür ist unter anderem eine Datenhaltung, welche mit umfangreichen Datenmengen umgehen kann. Dies ist mit dem aktuell verwendeten JET-basierten Datenbanktreiber nur begrenzt gegeben: Modell- und Ergebnisdatenbanken dürfen maximal 2 GB an Größe erreichen; die Programmarchitektur ist aufgrund des Datenbanktreibers auf 32 Bit begrenzt, sodass nicht mehr als 2 GB RAM adressiert werden können. Im Hinblick auf die Entwicklungen in der IT und der zur Verfügung stehenden Hardware-Ressourcen erscheint eine derartige Einschränkung nicht mehr zeitgemäß und kann mit einer künftigen Umstellung des Datenbanktreibers (z.B. aus dem Open-Source-Bereich) umgangen werden.

Bislang kann bei Transportsimulationen jeweils nur eine Stoffkomponente berücksichtigt werden. Sind mehrere Stoffe zu betrachten, muss für jeden Stoff ein entsprechendes Modell erzeugt und simuliert werden, reaktiver Stofftransport ist nicht möglich. Eine Weiterentwicklung von PCSiWaPro sollte den konservativen Mehrkomponententransport implementieren, um zunächst den Aufwand an Simulationen zu reduzieren. Ein weiterer Schritt sollte die Kopplung eines reaktiven Simulators wie PhreeqC (Parkhurst, et al., 2013) umfassen, damit z.B. Folgen der Pyritverwitterung in bergbaubeeinflussten Gebieten simuliert und die Wirksamkeit von eventuellen Sanierungsmaßnahmen abgeschätzt werden können.

Die an dieser Stelle beschriebenen Szenarien und Problemstellungen als Motivation zur weiteren Programmentwicklung sind als Vorschläge gedacht und erheben sicherlich keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Letztlich sollte sich eine Weiterentwicklung des Programms PCSiWaPro aus den Anforderungen der ingenieurtechnischen Praxis ableiten sowie aktuelle Erkenntnisse aus der Wissenschaft berücksichtigen.

7 Literaturverzeichnis

- Aigner Detlef** Auswertung von Untersuchungen über den Einsatz einer Gummispundwand sowie einer Sickerleitung an einem durchströmten Modelldeich [Bericht] : Gutachten / Institut für Wasserbau und Technische Hydromechanik. - Dresden : Technische Universität Dresden, 2004.
- Aissa Mohamed** GPU-accelerated CFD Simulations for Turbomachinery Design Optimization [Report]. - Delft : Delft University of Technology, 2017.
- Amdahl Gene** Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large-Scale Computing Capabilities [Conference] // AFIPS Conference Proceedings. - 1967. - Vol. 30. - pp. 483–485.
- Bárdossy Andras [et al.]** Fuzzy Logic in Hydrology and Water Resources [Article] // Fuzzy Logic in Geology. - [s.l.] : Elsevier Inc., 2003. - ISBN 9780124151468.
- Barrett Richard [et al.]** Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods [Buch]. - Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1993. - Bd. 2. - ISBN 978-0-898713-28-2.
- Barth Christoph** Die Wirksamkeit der Kapillarsperre als Deponieoberflächenabdichtung - Feldversuche auf der Deponie Bayreuth // Dissertation. - München : Ludwig-Maximilians-Universität München, 2003. - Bd. Fakultät Geowissenschaften.
- Beims Ulrich, Luckner Ludwig und Nitsche Claus** Beitrag zur Ermittlung von Parametern von Migrationsprozessen in der Boden- und Grundwasserzone [Artikel] // Wissenschaftliche Zeitschrift der TU Dresden. - 1982. - 31. - S. 211-217.
- Blankenburg René und Gräber Peter-Wolfgang** Consideration of parameters and boundary conditions uncertainties in water balance and solute transport simulation [Artikel] // IAHS Publication. - Leipzig : ModelCARE, 2012. - 85-92 : Bd. 355.
- Blankenburg René und Gräber Peter-Wolfgang** Modelling the Flow Processes in unsaturated porous Media for Predicting the Water Content Distribution in Levees and Earth Dams [Konferenz] // 7th EUROSIM Congress. - Prague : EUROSIM, 2010. - Bde. ISBN 978-801-01-04588-6.
- Blankenburg René und Gräber Peter-Wolfgang** Untersuchungen zum Eintragsverhalten von Fluorid in das Grundwasser auf Braunkohletagebaukippen mit dem Simulationsprogramm PCSiWaPro [Artikel] // Freiberg Online Geology. - Freiberg : TU Bergakademie Freiberg, 2015. - Berg- und Hüttenmännischer Tag. - Bde. ISSN 1434-7512.
- Blankenburg René, Gräber Peter-Wolfgang und Kemmesies Oliver** SiWaPro DSS - A Computer Aided Leachate Forecast Tool [Konferenz] // Consoil. - Mailand : Umweltforschungszentrum Leipzig, 2008.
- Blankenburg René, Gräber Peter-Wolfgang und Mansel Holger** Modellierung von Strömungsprozessen in variabel gesättigten porösen Medien zur Bestimmung der Wassergehaltsverteilung in Dämmen und Deichen [Konferenz] // 7. Symposium Umweltgeotechnik im Rahmen der Fachsektionstage Geotechnik. - Würzburg : Deutsche Gesellschaft für Geotechnik e.V., 2017.

- Blankenburg René, Gräber Peter-Wolfgang und Nitsch Benjamin** Instationäre Strömungs- und Transportmodellierung in der ungesättigten Bodenzone durch Anwendung synthetischer Zeitreihen mittels SiWaPro DSS [Konferenz] // DECHEMA e.V.. - Frankfurt am Main : Proceedings, 2007.
- Blankenburg René, Holthaus Benjamin und Gräber Peter-Wolfgang** Ausweisung von Parameter- und Randbedingungsunsicherheiten in den Berechnungsergebnissen von Simulationsprogrammen – APIS [Bericht]: Schlussbericht / Fachbereich Hydrowissenschaften. - Dresden : Technische Universität Dresden, 2010.
- Blankenburg René, Kemmesies Oliver and Gräber Peter-Wolfgang** SiWaPro DSS - a helpful software to simulate the behavior of MTBE in the unsaturated zone [Conference] // Symposium on Experience of Oil Contamination and Remediation in Japan and the EU. - Tokyo : Proceedings, 2005.
- Blankenburg René, Nitsch Benjamin und Gräber Peter-Wolfgang** Simulation des Wasserhaushaltes in Deichen unter besonderer Berücksichtigung der Prozesse im teilgesättigten Bereich [Konferenz] // ASIM STS. - Dresden : ASIM, 2009.
- Busch Karl-Franz, Luckner Ludwig und Tiemer Klaus** Geohydraulik [Buch]. - Berlin, Stuttgart : Gebrüder Borntraeger, 1993. - 3. neubearbeitete Auflage : Bd. Lehrbuch der Hydrogeologie Band 3. - ISBN 3-443-01004-0.
- Celia Michael A., Bouloutas Efthimios T. and Zarba Rebecca L.** A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation [Article] // Water Resources Research. - Washington D.C. : American Geophysical Union, July 1990. - 7 : Vol. 26. - pp. 1483-1496.
- Chapra Steven C. und Canale Raymond P.** Numerical Methods for Engineers [Buch]. - New York : McGraw-Hill, 2006. - Bd. Fifth Edition.
- Diersch Hans-Jörg G.** FEFLOW - Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media [Book]. - Heidelberg, New York : Springer-Verlag, 2014.
- Diersch Hans-Jörg G.** Finite-Element-Galerkin-Modell zur Simulation zweidimensionaler konvektiver und dispersiver Stofftransportprozesse im Boden [Buch]. - Berlin : Acta Hydrophysica, 1981. - Bd. XXVI (1).
- DIN 4220:2008-11** Bodenkundliche Standortbeurteilung - Kennzeichnung, Klassifizierung und Ableitung von Bodenkennwerten (normative und nominale Skalierungen). - Berlin : Beuth Verlag GmbH, November 2008.
- Durner Wolfgang [et al.]** Determination of Parameters for Flexible Hydraulic Functions by Inverse Modeling [Book Section] // Proceedings International Workshop on Characterization and Measurement of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media / book auth. Genuchten Martinus Thomas, Leij F. J. and Wu L.. - Riverside : University of California, 1999.
- Durner Wolfgang** Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure [Article] // Water Resources Research. - Hoboken, USA : John Wiley and Sons, 1994. - 2 : Vol. 30.

- Durner Wolfgang** Predicting the unsaturated hydraulic conductivity using multi-porosity water retention curves [Buchabschnitt] // Indirect Methods for Estimating the Hydraulic Properties of Unsaturated Soils / Buchverf. van Genuchten Martinus Thomas, Leij F. J. und Lund L. J.. - Riverside : University of California, 1992.
- Euler Barbara, Kemmesies Oliver und Gräber Peter-Wolfgang** 2D-Modelling of flow processes in the unsaturated zone of wetlands // International Groundwater Symposium. - Istanbul : IAHR, 2008.
- Fredlund Delwyn G. und Rahardjo Harianto** Soil Mechanics for Unsaturated Soils [Buch]. - New York : John Wiley & Sons, 1993. - Bd. I.
- Freundlich Herbert** Über die Adsorption in Lösungen [Buch]. - Leipzig : Wilhelm Engelmann, 1906. - S. 98.
- Fugro** Unternehmenswebseite Fugro [Online] // GeODin - Softwareseite. - Fugro, 2014. - 26. Juli 2014. - <http://www.geodin.com>.
- Gamma Erich [et al.]** Entwurfsmuster. Elemente wiederverwendbarer objektorientierter Software [Buch]. - München : Addison-Wesley, 2002. - 2. Edition : Bd. 1. - ISBN 3-8273-1862-9.
- Geuzaine Christophe and Remacle Jean-Francois** Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities [Article] // International Journal for Numerical Methods in Engineering. - 2009. - Issue 11. - Vol. 79. - pp. 1309-1331.
- Gräber Peter-Wolfgang [et al.]** SiWaPro DSS - Beratungssystem zur Simulation von Prozessen der unterirdischen Zonen [Buchabschnitt] // Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften / Buchverf. Wittmann Jochen und Müller Mike. - Leipzig : Shaker-Verlag, 2006.
- Gräber Peter-Wolfgang und Blankenburg René** Entwicklung eines computergestützten Beratungssystems zur Sickerwasserprognose [Bericht] : Schlussbericht / Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten ; Technische Universität Dresden. - Bonn : BMBF-Förderschwerpunkt "Sickerwasserprognose", 2007. - S. 82. - Förderkennzeichen 02WP0503.
- Gräber Peter-Wolfgang und Blankenburg René** Optimierung von Oberflächenabdichtungssystemen unter den Bedingungen der Klimaänderung [Artikel] // Müll und Abfall. - Berlin : Erich Schmidt Verlag GmbH & Co., 2010. - ISSN 0024-2957. - Bd. 1.
- Gräber, Peter-Wolfgang; Kemmesies, Oliver; Blankenburg, René; Euler, Barbara** Anforderungen an die Gestaltung von Oberflächenabdichtungssystemen unter hydrologischen Gesichtspunkten [Artikel] // Müll-Handbuch. - Berlin : Erich Schmidt Verlag GmbH & Co., 2009. - Kapitel 17.
- Gräber, Peter-Wolfgang; Meyer, Martin; Hassan, Issa; Sallwey, Jana; Blankenburg, René** Prognosis of groundwater recharge with PCSiWaPro under conditions of climate change [Conference] // Proceedings. - Bunbury : International Mine Water Association, 2012.

- Gropp W.** MPI (Message Passing Interface) [Buchabschnitt] // Encyclopedia of Parallel Computing / Buchverf. D. Padua. - Boston, MA : Springer, 2011.
- Guo Jinxing** Stability analysis of earth dams and dikes under the influence of precipitation and vegetation // Dissertation. - Dresden : Technische Universität Dresden, 2015.
- Guo Jinxing, Blankenburg René and Gräber Peter-Wolfgang** Simulation of Hydrological Processes in the Dump Slope of a Mining Pit for Landslide Forecasting [Conference] // Proceedings. - Santiago de Chile : 10th ICARD/ IMWA Symposium, 2015.
- Gustafson John L.** Reevaluating Amdahl's law [Article] // Communications of the ACM. - 1988. - 5 : Vol. 31.
- Hasan Issa** Modellierung von Strömungs- und Stofftransportprozessen bei Kombination der ungesättigten Bodenzone mit technischen Anlagen // Dissertation. - Dresden : Technische Universität Dresden, 2013.
- Hasan, Issa; Stefan, Catalin; Blankenburg, René; Gräber, Peter-Wolfgang; Werner, Peter** Estimation of Groundwater Recharge of Sewage Effluent using a coupled Water-Solute-Transport Model [Conference] // Proceedings. - Abu Dhabi : ISMAR 7, 2010.
- Haselsteiner Ronald, Conrad Marco und Strobl Theodor** Kriterien zur Ertüchtigung von Hochwasserschutzdeichen [Bericht] : Kolloquium / 5. Darmstadt-Berliner Baurechts-Kolloquium. - Darmstadt : [s.n.], 2002.
- Helm Björn** Modeling of Water and Mass Transport Dynamics for an Irrigated Arid Site // Diplomarbeit. - Dresden und Mendoza : Technische Universität Dresden, 2008.
- Junghanns Ralf, Blankenburg René und Gräber Peter-Wolfgang** Schadstoffbilanzierung mittels gekoppelter instationärer Strömungs- und Stofftransportmodelle des Bodens- und Grundwasserbereichs auf Basis generierter Zeitreihen [Buchabschnitt] // Symposium Simulationstechnik / Buchverf. Gnauck Albrecht und Luther Bernhard. - Cottbus : Shaker Verlag, 2009. - Bde. ISBN 978-3-8322-8509-8.
- Kemmesies Oliver and Blankenburg René** SiWaPro DSS: A Tool for Computer aided Forecasts of Leachate Concentrations [Conference] // Proceedings. - Riga : Riga Technical University, 2005.
- Kemmesies Oliver** Prozessmodellierung und Parameteridentifikation von Mehrphasenströmungsprozessen in porösen Medien [Buch]. - Dresden : Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V., 1995. - ISSN 1430-0176.
- Kemmesies Oliver, Blankenburg René and Gräber Peter-Wolfgang** Development of SiWaPro DSS for computer aided leachate forecast [Conference] // Proceedings of Consoil. - Bordeaux : Umweltforschungszentrum Leipzig, 2005.
- Kotakemori Hisashi [et al.]** Performance Evaluation of Parallel Sparse Matrix-Vector Products on SGI Altix 3700 [Article] // Lecture Notes in Computer Science. - Berlin Heidelberg : Springer Verlag, 2008. - Vol. 4315. - pp. 153-163.

- KP Ingenieurgesellschaft für Wasser und Boden mbH** BMBF-Förderschwerpunkt "Sickerwasserprognose", Vergleich der Transportmodelle [Bericht] : Abschlussbericht. - Gunzenhausen, Karlsruhe : TZW Technologiezentrum Karlsruhe, 2008. - S. 132.
- Krasner Glenn E. and Pope Stephen T.** A cookbook for using the model-view controller user interface paradigm in Smalltalk-80 [Article] // Journal of Object-Oriented Programming. - Denville : SIGS, 1988. - 3 : Vol. 1.
- Kruse Rudolf, Gebhardt Jörg und Klawonn Frank** Fuzzy-Systeme [Buch]. - Stuttgart : Teubner, 1993.
- Langergraber Günter and Šimunek Jirka** Reactive Transport Modeling of Subsurface Flow Constructed Wetland Using the Hydrus Wetland Module [Article] // Vadose Zone Journal. - Madison, WI : Soil Science Society of America, 2012. - Special Section: Reactive Transport Modeling. - 11 : Vol. 2.
- Langmuir Irving** The Constitution and Fundamental Properties of Solids and Liquids [Artikel] // Journal of the American Chemical Society. - Washington : American Chemical Society, 1916. - 11 : Bd. 38.
- Luckner Ludwig und Schestakow Wsewolod M.** Migration Processes in the Soil and Groundwater Zone [Buch]. - Leipzig : Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1991.
- Luckner Ludwig, van Genuchten Martinus Thomas and Nielsen D. R.** A Consistent Set of Parametric Models for the Two-Phase Flow of Immiscible Fluids in the Subsurface [Article] // Water Resour. Res. - 1989. - 25(10). - pp. 2187-2193.
- Mattersteig Stephan** Experimentelle Bestimmung der Saug-Sättigungsbeziehung des Kapillarblocks und die Planung einer Kipprinne, sowie deren entsprechenden Versuchsaufbau // Diplomarbeit. - Dresden : Technische Universität Dresden, 2006.
- Mendoza Carl A., Therrien René und Sudicky Edward A.** ORTHOFEM User's Guide [Bericht]. - University of Waterloo, Ontario, Canada : Waterloo Centre for Groundwater Research, 1991.
- Meyer, Martin; Sallwey, Jana; Blankenburg, René; Gräber, Peter-Wolfgang** Coupling of unsaturated and saturated Soil Zone Models to simulate the Water Balance [Conference] // SGEM Conference. - Albena, Bulgaria : [s.n.], 2012.
- Meyer, Martin; Sallwey, Jana; Blankenburg, René; Gräber, Peter-Wolfgang** Implementing parallelism into an unsaturated soil zone simulation model [Article] // Scientific Journal. - Riga : Riga Technical University, 2012. - Boundary Field Problems and Computer Simulation. - 51 : Vols. ISSN 2255-9124.
- Millington R. J. und Quirk J. P.** Permeability of porous solids [Artikel] // Transactions of the Faraday Society. - [s.l.] : Faraday Society, 1961. - Bd. 57. - S. 1200-1207.
- Möller Bernd and Reuter Uwe** Uncertainty Forecasting in engineering [Book]. - Berlin : Springer Verlag, 2007. - p. 202. - 978-3-540-37173-1.
- Möller Bernd und Beer Michael** Fuzzy Randomness; Uncertainty in Civil Engineering and Computational Mechanics [Buch]. - Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2004.

- Möller Bernd, Beer Michael and Liebscher Martin** Fuzzy analysis as alternative to stochastic methods - theoretical aspects [Proceedings] // 4th German LS-DYNA Forum, DNYA more. - Bamberg : [s.n.], 2005. - pp. 29-43.
- Möller Bernd, Graf Wolfgang and Beer Michael** Fuzzy structural analysis using alpha-level optimization [Article] // Computational Mechanics. - 2000. - 26. - pp. 547-565.
- Mualem Yechezkel** A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media [Artikel] // Water Resources Research. - [s.l.] : AGU, 1976. - 3 : Bd. 12.
- Nemes A. [et al.]** Description of the unsaturated soil hydraulic database UNSODA version 2.0 [Artikel] // Journal of Hydrology. - Netherlands : Elsevier, 2001. - 251. - S. 151-162.
- Nitsch Benjamin, Gräber Peter-Wolfgang und Kemmesies Oliver** Anwendung synthetischer Niederschlagszeitreihen bei der Strömungsmodellierung in der ungesättigten Bodenzone [Buchabschnitt] // Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften / Buchverf. Wittmann Jochen und Müller Mike. - Berlin : Shaker-Verlag, 2007.
- Nitsch Benjamin, Kemmesies Oliver and Gräber Peter-Wolfgang** Groundwater recharge balancing under the conditions of climatic changes [Conference] // International Groundwater Symposium. - Istanbul : IAHR, 2008.
- OpenMP Architecture Review Board** OpenMP Application Program Interface [Book]. - 2008. - Vol. Version 3.0.
- Parkhurst David L. and Appelo C. A. J.** Description of input and examples for PHREEQC version 3—A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations [Report]. - book 6, chapter A43 : U.S. Geological Survey, 2013.
- Pühl Stefan** Beitrag zur Entwicklung einer computergestützten Beratung für die Ausweisung von Grundwasserschutzgebieten [Bericht] : Dissertation / Fakultät Forst-, Geo und Hydrowissenschaften ; Technische Universität Dresden. - Dresden : Bundesumweltstiftung Osnabrück, 2000. - S. 164.
- Pühl Stefan und Gräber Peter-Wolfgang** Ausweisung von Grundwasserschutzgebieten unter Anwendung von numerischen und wissensbasierten Methoden [Buchabschnitt] // Proceedings 10. Symposium Simulationstechnik. - Dresden : [s.n.], 1996.
- Radcliffe David. E. and Šimunek Jiri** Soil Physics with Hydrus - Modeling and Applications [Book]. - Boca Raton : CRC Press, 2010. - ISBN 978-1-4200-7380-5.
- Remacle Jean-Francois [et al.]** Efficient visualization of high-order finite elements [Artikel] // International Journal for Numerical Methods in Engineering. - New York : John Wiley & Sons Ltd., 2007. - 4 : Bd. 69.
- Richards Lorenzo Adolph** Capillary Conduction of Liquids Through Porous Mediums [Article] // Physics. - New York : Cornell University, 1931. - 5 : Vol. 1.

- Richter M., Swaboda D. und Bilek F.** Durchführung von Probenahmen auf der IAA Ostausfahrt Böhlen und laborativer Untersuchungen als Grundlage einer Sickerwasserprognose [Bericht]. - Dresden : Grundwasserforschungsinstitut Dresden, 2010.
- Sallwey, Jana; Meyer, Martin; Gräber, Peter-Wolfgang; Blankenburg, René** Coupling of Unsaturated and Saturated Soil Zone Models to estimate Groundwater Recharge in Mining Areas [Conference] // International Groundwater Symposium. - Kuwait : IAHR, 2012. - Vol. 7.
- Schaap Marcel G., Feike J. Leij und van Genuchten Martinus Thomas** ROSETTA: a computer program for estimating soil hydraulic parameters with hierarchical pedotransfer functions [Artikel] // Journal of Hydrology. - 2001. - 3-4 : Bd. 251.
- Schittkowski Klaus** NLPQLP: A Fortran implementation of a sequential quadratic programming algorithm with non-monotone line search - user's guide [Book]. - Bayreuth : University of Bayreuth, 2006.
- Schulz Karsten and Huwe Bernd** Uncertainty and sensitivity analysis of water transport modelling in a layered soil profile using fuzzy set theory [Article] // Journal of Hydroinformatics. - 1999. - 01 : Vol. 2. - pp. 127-138.
- Schulz Karsten** Modellierung von Unsicherheiten bodenphysikalischer und hydrochemischer Prozesse mit Hilfe der Fuzzy-Set-Theorie [Buch]. - Aachen : Shaker Verlag, 1997.
- Šimunek J., Vogel T. and van Genuchten M. Th.** The SWMS_2D Code for Simulating Water Flow and Solute Transport in Two-Dimensional Variably Saturated Media [Report] : Research Report / Agricultural Research Service ; U.S. Salinity Laboratory. - Riverside, California : U.S. Department of Agriculture, 1994. - p. 216. - Version 1.21.
- Šimunek Jiri, van Genuchten Martinus Thomas and Šejna Miroslav** Development and Applications of the HYDRUS and STANMOD Software Packages and Related Codes [Article] // Vadose Zone Journal. - [s.l.] : Soil Science Society of America, 2008. - 2 : Vol. 7.
- Sohr Antje [et al.]** Grundwasser - Altlasten aktuell [Journal]. - Dresden : Sächsisches Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie, 2009. - 37/2009.
- Sohr Antje, Fahl Jens und Blankenburg René** Vergleich von Sickerwasserprognoseprogrammen, Teil A [Artikel] // Grundwasser-Altlasten aktuell. - Dresden : LfULG Sachsen, 2009. - Schriftenreihe. - Bd. 37.
- Spitz Karlheinz und Moreno Joanna** A Practical Guide to Groundwater and Solute Transport Modelling [Buch]. - New York : John Wiley & Sons, 1996.
- Thum Peter, Hesch Wayne and Stüben Klaus** LMG2: Accelerating the SAMG Multigrid-Solver in MODFLOW [Conference] // MODFLOW and MORE. - Golden, Colorado : The Integrated Groundwater Modeling Center, 2011.
- van Genuchten Martinus Thomas** A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils [Article] // Soil Science Soc. Am. Journal. - 1980. - 44. - pp. 647-652.

- van Genuchten Martinus Thomas** A numerical model for water and solute movement in and below the root zone [Report]: Research Report No 121 / U.S. Salinity laboratory, USDA, ARS. - Riverside, California : [s.n.], 1987.
- van Genuchten Martinus Thomas, Leij F. J. und Yates S. R.** The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils [Bericht]: EPA Report 600/2-91/065. - Riverside, California : U.S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, 1991.
- Verbraucherschutz Bundesministerium der Justiz und für Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung** [Verordnung zum Bundesbodenschutzgesetz]. - www.gesetze-im-internet.de : [s.n.], 1999.
- Vereecken Harry. [et al.]** Estimating the soil moisture retention characteristic from texture, bulk density and carbon content [Article] // Soil Science. - 1989. - No. 6 : Vol. 148. - pp. 389-403.
- Vogel Tomas und Cislerova Milena** On the Reliability of Unsaturated Hydraulic Conductivity Calculated from the Moisture Retention Curve [Artikel] // Transport in Porous Media. - Dordrecht, The Netherlands : Kluwer Academic Publishers, 1988. - 15 : Bd. 3.
- Wang Herbert F. and Anderson Mary P.** Introduction into Groundwater Modeling - Finite Difference and Finite Element Methods [Book]. - San Diego : Academic Press, 1982.
- Wickramanayake Kamal** Software View [Online]. - Juli 17, 2010. - Januar 30, 2014. - <http://www.swview.org/blog/mvc-design-pattern-or-architectural-pattern>.

Eigene Veröffentlichungen

- Blankenburg René, Benjamin Holthaus und Peter-Wolfgang Gräber. *Ausweisung von Parameter- und Randbedingungsunsicherheiten in den Berechnungsergebnissen von Simulationsprogrammen – APIS* [Bericht]: Schlussbericht Teil TU Dresden / Fachbereich Hydrowissenschaften. - Technische Universität Dresden, 2010.
- Blankenburg, René, Oliver Kemmesies, and Peter-Wolfgang Gräber. *SiWaPro DSS - a helpful software to simulate the behavior of MTBE in the unsaturated zone*. Proceedings, Tokyo, Japan: Symposium on Experience of Oil Contamination and Remediation in Japan and the EU, 2005.
- Blankenburg, René, Peter-Wolfgang Gräber und Benjamin Nitsch. *Instationäre Strömungs- und Transportmodellierung in der ungesättigten Bodenzone durch Anwendung synthetischer Zeitreihen mittels SiWaPro DSS*. Konferenzbeitrag, Frankfurt am Main: DECHEMA e.V., 2007.
- Blankenburg, René, Peter-Wolfgang Gräber, and Oliver Kemmesies. *SiWaPro DSS - A Computer Aided Leachate Forecast Tool*. Proceedings, Consoil, Mailand: Umweltforschungszentrum Leipzig, 2008.

Blankenburg, René, Benjamin Nitsch und Peter-Wolfgang Gräber. *Simulation des Wasserhaushaltes in Deichen unter besonderer Berücksichtigung der Prozesse im teilgesättigten Bereich*. Konferenzbeitrag zur ASIM STS-Tagung, Dresden, 2009.

Blankenburg, René, Peter-Wolfgang Gräber. *Modelling the Flow Process in unsaturated porous Media for predicting the Water Content Distribution in Levees and Earth Dams*. Proceedings, 7th EUROSIM Congress, ISBN 978-801-01-04588-6, 978-80-01-04589-3, Prague, 2010.

Blankenburg, René, Peter-Wolfgang Gräber. *Consideration of parameters and boundary conditions uncertainties in water balance and solute transport simulation*. Proceedings ModelCARE Leipzig, IAHS Publ. 355, 85-92, 2012.

Blankenburg, René, Peter-Wolfgang Gräber. *Untersuchungen zum Eintragsverhalten von Fluorid in das Grundwasser auf Braunkohlentagebaukippen mit dem Simulationsprogramm PCSiWaPro*. Berg- und Hüttenmännischer Tag, Freiberg Online Geology, ISSN 1434-7512, TU Bergakademie Freiberg, 2015.

Blankenburg René, Peter-Wolfgang Gräber und Holger Mansel. *Modellierung von Strömungsprozessen in variabel gesättigten porösen Medien zur Bestimmung der Wassergehaltsverteilung in Dämmen und Deichen*. 7. Symposium Umweltgeotechnik im Rahmen der Fachsektionstage Geotechnik. Würzburg. Deutsche Gesellschaft für Geotechnik e.V., 2017.

Gräber, Peter-Wolfgang, René Blankenburg, Oliver Kemmesies, und Stefanie Krug. „SiWaPro DSS - Beratungssystem zur Simulation von Prozessen der unterirdischen Zonen.“ In *Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften*, von Jochen Wittmann und Mike Müller, Herausgeber: Mike Müller, 225-234. Leipzig: Shaker Verlag, 2006.

Gräber, Peter-Wolfgang, René Blankenburg. *Optimierung von Oberflächenabdichtsystemen unter den Bedingungen der Klimaänderung*. Müll und Abfall, Jahrgang 2010, Heft 1, Seite 25, Erich Schmidt Verlag GmbH & Co., Berlin, ISSN 0027-2957, 2010.

Gräber, Peter-Wolfgang, Oliver Kemmesies, René Blankenburg und Barbara Euler. *Anforderungen an die Gestaltung von Oberflächenabdichtungssystemen unter hydrologischen Gesichtspunkten*. Müll-Handbuch, Kapitel 17, Erich Schmidt Verlag Berlin, 2009.

Graeber, Peter-Wolfgang, Martin Meyer, Issa Hasan, Jana Sallwey, and René Blankenburg. *Prognosis of groundwater recharge with PCSiWaPro under conditions of climate change*. International Mine Water Association Annual Conference 2012, Bunbury, Australia, 2012.

Guo, Jinxing, René Blankenburg, and Peter-Wolfgang Gräber. *Simulation of Hydrological Processes in the Dump Slope of a Mining Pit for Landslide Forecasting*. Proceedings of 10th ICARD /IMWA Symposium, Santiago de Chile, 2015.

Hasan, Issa, Catalin Stefan, René Blankenburg, Peter-Wolfgang Graeber, and Peter Werner. *Estimation of Groundwater Recharge of Sewage Effluent Using a Coupled Water-Solute Transport Model*. ISMAR 7, Abu Dhabi, 9.-13.10. 2010.

- Jianfeng, Xu, René Blankenburg, und Peter-Wolfgang Gräber. „Simulation der Sickerwasserdynamik bei der Dammdurchströmung mit SiWaPro DSS.“ Projektarbeit, Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten, Technische Universität Dresden, Dresden, 2008, 37.
- Junghanns, Ralf René Blankenburg und Peter-Wolfgang Gräber. *Schadstoffbilanzierung mittels gekoppelter instationärer Strömungs- und Stofftransportmodelle des Boden- und Grundwasserbereichs auf Basis generierter Zeitreihen*. ASIM Tagung, 20. Symposium Simulationstechnik, BTU Cottbus, Albrecht Gnauck und Bernhard Luther; Shaker-Verlag, ISBN 978-3-8322-8509-8, 2009.
- Kemmesies, Oliver, and René Blankenburg. *SiWaPro DSS: A Tool for Computer Aided Forecasts of Leachate Concentrations*. Riga: Riga Technical University, 2005.
- Kemmesies, Oliver, René Blankenburg, and Peter-Wolfgang Gräber. *Development of SiWaPro DSS for computer aided leachate forecast*. Proceedings, Consoil, Bordeaux: Umweltforschungszentrum Leipzig, 2005.
- Meyer Martin, Jana Sallwey, René Blankenburg, Peter-Wolfgang Graeber. *Coupling of Unsaturated and saturated Soil Zone Models to simulate the Water Balance*. SGEM Conference (Surveying, Geology & Mining, Ecology, Management), Albena, Bulgaria, 2012.
- Meyer, Martin, Jana Sallwey, René Blankenburg, and Peter-Wolfgang Gräber. *Implementing parallelism into an unsaturated soil zone simulation model*. Boundary Field Problems and Computer Simulation, S. 25-29, 51/2012 Scientific Journal of Riga Technical University, ISSN 2255-9124, 2012.
- Sallwey, Jana, Martin Meyer, Peter-Wolfgang Gräber, and René Blankenburg. *Coupling of Unsaturated and Saturated Soil Zone Models to Estimate Groundwater Recharge in Mining Areas*. 7. IAHR International Groundwater Symposium, Kuwait, 2012.
- Sohr, Antje, Jens Fahl, René Blankenburg. *Vergleich von Sickerwasserprognoseprogrammen, Teil A*. In: Sohr, A.; Gruhne, S.; Böhm, A.; Zweig, M.; Ihling, H. (Autorenkollektiv): Grundwasser – Altlasten aktuell, LfULG Sachsen, Schriftenreihe, Heft 37/2009, S. 58-64.

8 Anhang

8.1 Beschreibung der Klassen zur Datenverwaltung

8.1.1 Klasse „clsDatenbank“

Die Klasse „clsDatenbank“ enthält Methoden, um Verbindungen mit den physischen Datenbanken aufzubauen oder zu schließen sowie neue Datenbanken zu erstellen. Durch die Verwendung als Treiber werden bis auf die Verbindungsdaten keinerlei Modelldaten gespeichert.

8.1.2 Klasse „clsSprachDB“

Die Klasse „clsSprachDB“ repräsentiert den Teil der Systemdatenbank, der Texte, Hinweise und Übersetzungen (Zeichenketten) beinhaltet. Programmtechnisch werden diese in einem Dataset im Hauptspeicher abgelegt und über SQL-Befehle abgerufen. Die Verbindung zu Systemdatenbank ist unidirektional, da nur lesend zugegriffen wird. Durch die Datenhaltung im Hauptspeicher ist ein Abfragen der sprachspezifischen Zeichenketten zur Programmlaufzeit ohne merkliche Verzögerung seitens des Anwenders durchführbar.

8.1.3 Klasse „clsSystemDB“

Diese Klasse beinhaltet den verbleibenden Teil der Systemdatenbank und umfasst allgemeine Angaben zu Modelldaten, wie z.B. Einheiten und deren Umrechnungsfaktoren, Parameterdaten für den Strömungs- und Stofftransportprozess sowie die Definition der Randbedingungen. Die Verbindung zur Systemdatenbank ist ebenfalls nur lesend und daher unidirektional.

8.1.4 Klasse „clsSpeicherDB“

Diese Klasse führt Abfragen von und zur physischen Datenbank aus, die von der Klasse RAMDB angefordert werden. Die enthaltenen Methoden erstellen und füllen das Dataset bzw. speichern die geänderten Daten in die Datenbank. Diese Trennung von Datenhaltung (RAMDB) und den Methoden zu ihrer Verarbeitung (clsSpeicherDB) widerspricht im eigentlichen Sinn dem Grundsatz der Objektorientierung. Es hat sich jedoch während der Entwicklung gezeigt, dass sich insbesondere Datenbankoperationen zur Speicherung der Daten sehr gut optimieren lassen, indem die SQL-Befehle derart zusammengesetzt werden, dass der Datenbanktreiber diese vor der Ausführung kompilieren kann.

8.1.5 Klasse „RAMDB“

In dieser Klasse werden die Tabellen instanziiert, die in der Projektdatenbank enthalten sind (jeweils realisiert durch die .NET-Klasse Datatable) und in einem Dataset-Container abgelegt. Ebenso werden die Beziehungen der Tabellen, Primär- und Fremdschlüssel ebenfalls übernommen bzw. programmtechnisch erstellt. Damit ist die Konsistenz der abgerufenen sowie der erzeugten Daten sowohl in der Speicherdatenbank als auch in der physischen Datenbank gewährleistet. Über die bidirektionale Verbindung (Methodenauffufe) zur Klasse „clsSpeicherDB“ erfolgt der Datenaustausch mit der physischen Datenbank. In Abbildung 3 ist im oberen rechten Teil der Inhalt hierarchisch aufgeführt. Diese Hierarchie zeigt die Relationen der Tabellen, welche datenbankseitig über Beziehungen realisiert werden (Abbildung 4). Im Folgenden sollen kurz die Inhalte der Tabellen erläutert werden.

8.2 Beschreibung der Tabellen der Projektdatenbank

Im Folgenden werden die einzelnen Tabellen der Projektdatenbank aufgegliedert und kurz inhaltlich beschrieben.

Tabelle „Projekte“

Alle Angaben zu einem Projekt werden hier abgelegt: Name, Beschreibung des Projektes, evtl. geographische Lage, Bearbeiter, Auftraggeber, Aktenzeichen.

Tabelle „Varianten“

Dient zur Vorhaltung relevanter Informationen der Berechnungsvarianten. Insbesondere sind auch modellweite Einstellungen vorzufinden. Folgende Einträge sind in der Tabelle enthalten: Name der Variante; Beschreibung; verwendetes Koordinatensystem; Einheiten für Länge, Zeit und Masse

- Einstellungen zur Strömungssimulation: Betrachtung stationärer/instationärer Strömung; Betrachtung Pflanzenwurzelentzug; Verwendung atmosphärischer Randbedingungen; Berechnung der inversen Lösung (indirekte Parameteridentifikation); Anfangszeitrittweite; minimal/maximal erlaubte Zeitschrittweite; Faktor zur Erhöhung/Verringerung der Zeitschrittweite; Startzeitpunkt der Simulation; maximal erlaubte Anzahl an Iterationen pro Zeitschritt; maximal erlaubter absoluter/relativer Druckhöhenunterschied während der Iterativen Lösung der RICHARDS-Gleichung;
- Einstellungen zur Stofftransportsimulation: Betrachtung Stofftransport (immer instationär), Verwendung künstlicher Dispersion zur Verringerung von Oszillationen; Verwendung der Upstream-Wichtung zur Verringerung von Oszillationen; Einstellung des Peclet-Courant-Kriteriums; absolute/relative zulässige Konzentrationsänderung an einem Knoten bei iterativer Lösung(im Falle nichtlinearer Sorption); Dauer des konstanten Schadstoffeintrags als Stufenfunktion; Zeitwichtungsfaktor (implizit, explizit, Crank-Nicolson); Verwendung von Nichtgleichgewichtssorption
- Einstellungen zur Wasseraufnahme durch Pflanzenwurzeln: Druckhöhe, ab der Pflanzenwurzelentzug auftreten kann; Druckhöhe, bis zu welcher Pflanzenwurzelentzug maximal auftreten kann; Druckhöhe, bis zu welcher Transpiration maximal auftreten kann; permanenter Welkepunkt; potentielle Verdunstungsrate (Evaporation); potentielle Transpirationsrate

Tabelle „Ausgabezeiten“

Diese Tabelle beinhaltet die Zeitpunkte, zu denen Simulationsdaten (Wassergehalt, Druckhöhe, Konzentration) aller Knoten sowie Randbedingungen (Stromraten, Volumenstrom,

mittlere Konzentration sowie Fracht) in die Ausgabedatenbank geschrieben werden (notwendig für das Post-Processing).

Tabelle „Beobachtungspunkte“

Die Messwerte und dazugehörigen Zeitpunkte werden in dieser Tabelle eingetragen. Neben den Koordinaten, an denen der Messwert erhoben wurde, ist auch die Art des Messwerts in kodierter Schreibweise erfasst.

Tabelle „Bodenparameter“

Für jeden Boden ist eine Reihe von Parametern anzugeben, dessen hydraulische Eigenschaften „charakterisieren“. Neben bodenphysikalischen Parametern sind auch die van-Genuchten-Parameter zur Beschreibung der Saugspannungs-Sättigungsbeziehung anzugeben.

Tabelle „Elemente“

In dieser Tabelle sind die vom Programm zur Simulation verwendeten Elemente aufgeführt. Jedes Element besteht aus mehreren Knoten, welche wiederum durch ihre Knotennummer identifiziert werden.

Tabelle „FEKnoten“

Diese Tabelle speichert die Informationen für die grafische Benutzeroberfläche des Netzgenerators. Alle eingegebenen Punkte (Rand, interne Kurven), Randknoten des generierten Netzes, Referenzkoordinaten, Markierungsrechtecke für Anfangsbedingungen werden eingetragen und beim Start des Netzgenerators ausgewertet und entsprechend dargestellt (Rekonstruktion des generierten Netzes und der Nutzereingaben).

Tabelle „FESegmente“

Diese Tabelle speichert Hilfsinformationen zur Unterstützung der GUI und keine direkten Modelldaten. Es werden alle über die grafische Oberfläche des Netzgenerators eingegebenen „Linien“ gespeichert. Diese Linien stellen die Verbindungen zwischen zwei Eingabepunkten dar und definieren gleichzeitig auch die Eingaberichtung (mathematisch positiv oder negativ). Dies ist für die Aufbereitung der Eingabedaten notwendig, bevor diese an den Netzgenerator übergeben werden.

Tabelle „Knoten“

Die für die Simulation verwendeten Knoten des Finite-Elemente-Netzes werden in dieser Tabelle gespeichert. Pro Knoten werden Knotennummer, Koordinaten, Kodierung der Strömungsrandbedingungsart, Anfangsbedingungen für Druckhöhe und Konzentration gespeichert. Zusätzlich können Skalierungsfaktoren für Druckhöhe, Wassergehalt und hyd-

raulische Leitfähigkeit definiert werden. Über die Materialnummer wird dem Knoten eine definierte Bodenart (Bodenschicht) aus der Tabelle „Bodenparameter“ zugewiesen. Der Parameter „Beta“ spezifiziert die potentielle Wasseraufnahme durch Pflanzenwurzeln am jeweiligen Knoten.

Tabelle „Randbedingungskonzentrationen“

Diese Tabelle kennzeichnet die Zuordnung von konstanten Stoffeinträgen bzw. Höhe der Konzentration über die Randbedingungen. Die jeweiligen Randbedingungen sind durch einen Eintrag (Kodierung der Strömungsrandbedingung) definiert.

Tabelle „Randbedingungszeiten“

Diese Tabelle beinhaltet Einträge für die atmosphärischen Randbedingungen, welche durch Zeitpunkte definiert werden. Jeder dieser Zeitpunkte stellt einen Wechsel des Wertes an der Randbedingung dar. Angegeben werden können Werte für: potentielle Transpiration; potentielle Evaporation; Niederschlag; Konzentration von gelöstem Schadstoff im Niederschlag; Schadstoffkonzentrationen über die Randbedingungen +3 und -3; kleinste erlaubte Druckhöhe an der Bodenoberfläche

Tabelle „Stoffparameter“

Parameter, welche für die Charakterisierung des Schadstoffes verwendet werden, sind in dieser Tabelle abgelegt. Dazu gehören Lagerungsdichte; Dispersivität in longitudinaler und transversaler Richtung; Diffusionskoeffizient in Wasser sowie Luft; Abbauparameter nullter und erster Ordnung (in fester, wässriger und gasförmiger Phase); Parameter zum Sorptionsverhalten des Schadstoffes

8.3 Beschreibung der Tabellen der Systemdatenbank

Der Abschnitt listet die Tabellen der Systemdatenbank auf und erläutert den Inhalt. Wo möglich, wurde der Tabellename entsprechend dem gespeicherten Inhalt gewählt. Auf eine alphabetische Auflistung wurde zugunsten einer thematischen Zuordnung verzichtet. Viele der aufgeführten Daten könnten auch im Quelltext des Programms gespeichert werden. Diese Vorgehensweise birgt jedoch den Nachteil, dass nachträgliche Änderungen oder Ergänzungen nur durch eine neue Programmversion verfügbar gemacht werden können und ist damit nicht sehr flexibel.

Tabelle „Datentabellen“

Enthält eine Auflistung der Tabellen sowie dazugehörigen Spalten und Datentypen der Projektdatenbank sowie der „RAMDB“. Wird eine neue Projektdatenbank durch das Programm erstellt (nach Vorgabe durch den Anwender), werden anhand der Einträge die entsprechenden Tabellen mit den Spalten erstellt.

Tabelle „Beziehungsdefinitionen“

Listet die Zuordnung der Primär- und Fremdschlüssel auf, welche in der Projektdatenbank und „RAMDB“ die Tabellen untereinander in Beziehung setzen. Darüber hinaus werden die Eigenschaften der Beziehungen definiert: Weitergabe von Aktualisierungen dem Löschen von Primärschlüsseln.

Tabelle „Ausgabetablen“

Beschreibt die Tabellen sowie deren Struktur in der Ausgabedatenbank. Bei jeder Simulation wird vom Programm PCSiWaPro anhand dieser Daten eine neue Ausgabedatenbank erzeugt. Die Tabellen stehen untereinander nicht in Beziehung.

Tabelle „Formulare“

Die Tabelle enthält die Namen der Dialogfelder des Programms, deren Inhalt durch die Mehrsprachigkeit der Benutzeroberfläche angepasst werden muss. Jedem Dialog wird ein eindeutiger Index (FormularID) vergeben, der in der Tabelle „Sprachen“ verwendet wird.

Tabelle „Sprachen“

In dieser Tabelle sind die Übersetzungen der Dialoge gespeichert. Die Zuordnung zu den jeweiligen Dialogen aus Tabelle „Formulare“ erfolgt über die FormularID. Jedes Dialogfenster kann aus mehreren Steuerelementen bestehen, die eine Übersetzung des zugehörigen Textes erforderlich machen. Steuerelemente sind z.B. Schaltflächen oder Bezeichnungsfelder (Label). Zu jedem Steuerelement werden die Übersetzungen in den verfügbaren Sprachen abgelegt. Die Sprachen sind in einzelnen Spalten organisiert und ermöglichen

dadurch eine direkte Abfrage per SQL. Da die Zeichencodierung in MS Access in Unicode erfolgt, können z.B. auch arabische Buchstaben oder asiatische Zeichen enthalten sein. Soll dem System eine weitere Landessprache hinzugefügt werden, ist die Struktur der Tabelle um eine Spalte zu erweitern.

Tabellen „Längeneinheiten“, „Masseneinheiten“ und „Zeiteinheiten“

Diese Tabellen enthalten die im Programm PCSiWaPro vorkommenden Einheiten. Gespeichert sind jeweils der Einheitenname (z.B. Gramm), die verwendete Abkürzung (z.B. g) sowie der Umrechnungsfaktor. Der Umrechnungsfaktor ist für die jeweilige Standardeinheit (Sekunde, Zentimeter und Gramm) mit 1.0 definiert und für alle anderen enthaltenen Einheiten entsprechend dem gültigen Faktor. Damit ergibt sich die Möglichkeit, direkt zwischen Einheiten umzurechnen. Auch zusammengesetzte Einheiten wie m/s können z.B. in m/d sehr flexibel umgerechnet werden, ohne dass jede erdenkliche Kombination von Einheiten gespeichert sein muss.

Tabelle „Strömungsrandbedingungsarten“

Die Tabelle enthält eine Auflistung der im Programm PCSiWaPro implementierten Randbedingungen für das Strömungsproblem. Die Randbedingungen werden programmintern durch Zahlenwerte unterschieden, die mit der Indizierung in der Tabelle identisch sind. Zusätzlich ist für den Anwender eine Erläuterung hinterlegt, welche im Randbedingungseditor angezeigt wird. Einige Randbedingungen beeinflussen auch den Stofftransport, können jedoch eher als Beschränkung interpretiert werden.

Tabellen „DIN4220_HydraulischeParameter“ und „DIN4220_Durchlässigkeitsbeiwerte“

Die beiden Tabellen enthalten die in der DIN 4220 (DIN 4220:2008-11, 2008) definierten bodenhydraulischen Parameter für 38 verschiedene Bodenarten. Neben einem eindeutigen Index sind das Kurzzeichen, Langname, Restwassergehalt, gesättigter Wassergehalt und die nutzbare Feldkapazität als hydraulische Werte enthalten. Darüber hinaus sind die für die Beschreibung der Saugspannungs-Sättigungskurve erforderlichen Van-Genuchten-Parameter α und n enthalten. Die für die Funktion der ungesättigten Leitfähigkeit notwendige gesättigte hydraulische Durchlässigkeit ist abhängig von der Trockenrohdichte und in der DIN entsprechend aufgelistet. Daher ist für eine entsprechende Zuordnung eine zusätzliche Tabelle implementiert worden (DIN4220_HydraulischeDurchlässigkeitsbeiwerte). Diese enthält für jede Bodenart den gesättigten Durchlässigkeitsbeiwert in [m/s], aufgegliedert in 3 Klassen der Trockenrohdichte.

Tabellen „Bodenarten_Farben“ und „Farbdefinitionen“

Diese Tabellen beinhalten Daten für die grafische Darstellung und Beschriftung der in der DIN 4220 definierten Bodenarten. Verwendet werden diese beim Import von GeODin-Datenbanken (Fugro, 2014), einem weit verbreiteten Erfassung- und Verwaltungsprogramm für geologische Aufschlüsse.

Tabelle „Texturdreiecke“

In der Tabelle sind Daten gespeichert, die ebenfalls zur grafischen Darstellung der in der DIN 4220 definierten Bodenarten verwendet werden. Die Daten repräsentieren die Flächen des Bodens in einem Bodenartendiagramm, welches durch den Massenanteil Schluff sowie den Massenanteil Tonaufgespannt wird.

Tabellen „Stoffgruppen“ sowie „Anorganik“ und „Organik“

Das Programm verfügt über eine Schadstoffdatenbank, welche dem Anwender für einige Stoffgruppen die Parameter liefert, die für die Simulation des Stofftransports (z.B. bei einer Sickerwasserprognose) erforderlich sind. Die Daten wurden zumeist der Literatur entnommen und können daher nicht mit denen für eine spezifische Altlast bestimmten Laborwerten verglichen werden. Sie ermöglichen jedoch eine Abschätzung in erster Näherung. Neben der Untergliederung in verschiedene Stoffgruppen (z.B. PAK, MKW, LHKW oder Schwermetalle) wird zusätzlich in organische (Tabelle Organik) und anorganische (Tabelle Anorganik) Stoffe unterschieden. Gespeichert sind unter anderem Sorptionskoeffizienten (lineare sowie Freundlich-Isotherme), Abbauwerte 1. Ordnung für die wässrige Phase, Diffusionskoeffizienten und die Prüfwerte nach Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) zur Bewertung von Altlastverdachtsflächen.

8.4 Beschreibung der Tabellen der Ergebnisdatenbank

Tabelle „Ergebnisse“

Angaben zu allen Knoten an den gegebenen Ausgabezeitpunkten gespeichert

- Zeitpunkt
- Nummer des FE-Knotens
- Koordinaten (horizontal und vertikal)
- Druckhöhe
- Potentialhöhe
- Wassergehalt
- Sättigung
- Durchfluss
- Konzentration
- Sorbierte Konzentration
- Temperatur
- Horizontale und vertikale Geschwindigkeitskomponenten

Tabelle „Laufzeitinformationen“

Angaben zum numerischen Verlauf der Simulation:

- Anzahl der Iterationen pro Zeitschritt
- Kumulierte Iterationen
- Wasserbilanz
- Kumulierte eingehende und ausgehende Stromrate

Im Fall der Stofftransportsimulation zusätzlich:

- Courant- und Peclet-Zahl (Stabilitätskriterien)
- Kumulierter Abbau nullter sowie erster Ordnung
- Kumulierter Stoffmenge, die durch Pflanzenwurzeln aufgenommen wurde

Tabelle „Randbedingungen“

Angaben ähnlich zu Tabelle „Ergebnisse“, hier jedoch ausschließlich für FE-Knoten, welche mit einer Randbedingung (interne Randbedingungskodierung $\neq 0$) belegt wurden. Mit den Angaben in dieser Tabelle können die Zustände an den Randbedingungen ausgewertet werden:

- Laufende Nummer bei Zählung der Randbedingungsknoten (lokal)
- Nummer des FE-Knotens (global)

Anhang

- Koordinaten (horizontal sowie vertikal)
- Kodierung der Strömungsrandbedingung
- Durchfluss
- Strömungsgeschwindigkeit (resultierende Komponente)
- Druckhöhe
- Potentialhöhe
- Wassergehalt
- Sättigung
- Konzentration
- Temperatur

Tabelle „Simulationslaufkennung“

Speicherung einer eindeutigen Kennung für den Simulationslauf, die gleiche Kennung wird in der Projektdatenbank in der entsprechenden Variante gespeichert. Dies dient der eindeutigen Identifizierung bei der Auswertung der Simulationsdaten. Die Kennung setzt sich zusammen aus dem Benutzerlogin des Windowskontos, gefolgt vom aktuellen Datum und der Startuhrzeit der Simulation.

Tabelle „Beobachtungspunkte“

Bei indirekter Parameteridentifikation werden in diese Tabelle alle berechneten Werte für die in der Eingabedatenbank definierten Beobachtungspunkte eingetragen. Ausgegeben werden

- Koordinaten des Beobachtungspunkts
- Beobachtungszeit
- Art des Messwerts (Kodierung für Wassergehalt, Druckhöhe, Konzentration, Volumenstrom über Randbedingung)
- Berechneter Wert

Bei Vorgabe eines Volumenstroms ist keine Koordinatenangabe erforderlich.

Es ist keine Voraussetzung, dass die anzugebenden Koordinaten mit einem FE-Knoten zusammenfallen müssen. In diesem Fall wird der berechnete Wert aus den begrenzenden FE-Knoten interpoliert.

Die Tabelle kann auch verwendet werden, ohne dass eine indirekte Parameteridentifikation berechnet wird, um an einem beliebigen Punkt im Modellraum zu einem gegebenen Zeitpunkt einen berechneten Wert ausgeben zu lassen.

Tabelle „Protokolleinträge“

Die Tabelle enthält Informationen, falls bei der Simulation folgende Ereignisse bzw. Probleme auftreten:

- unzureichende Randbedingungen (Hinweis, dass nur eine Art Randbedingung zum aktuellen Simulationszeitpunkt existiert)
- Massen- bzw. Wasserbilanzfehler (Eintrag erfolgt, wenn größer 5 %)
- numerische Fehler (Über- oder Unterlauf oder ähnliche Vorkommnisse)

Zusammen mit der Einstufung der Schwere des Fehlers und dem Hinweistext soll der Nutzer in die Lage versetzt werden, Einstellungen entsprechend anzupassen und das Modell zu verbessern.

Im Fall der Durchführung einer indirekten Parameteridentifikation werden zusätzlich folgende Tabellen angelegt (nicht in Abbildung 6 enthalten):

Tabelle „Korrelationskoeffizienten“

Speicherung der Korrelationskoeffizienten der freien Parameter

Tabelle „Chi Quadrat“

Speicherung der Abweichungen des Suchprozesses der Parameteridentifikation

Tabelle „Parameter“

Diese Tabelle dient der Speicherung der Konfidenzintervalle der zu identifizierenden (freien) Bodenparameter. Angegeben werden Startwerte, aus der Identifikation bestimmter Wert, oberer sowie unterer Grenzwert.

Tabelle „Sensitivitäten“

In diese Tabelle wird die Sensitivität des Ergebnisses (Druckhöhe, Wassergehalt, Konzentration) bzgl. der freien Parameter eingetragen. Außerdem erfolgt die Speicherung der zeitlichen Abfolge der Messwerte, berechneten Werte sowie der Differenzen.

8.5 Weitere Eingabedialogfelder

Dieser Abschnitt listet weitere Dialogfelder auf, die im Hauptteil aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht dargestellt werden.

8.5.1 Projektinformationen

Standortinformationen (Nr. 0)

Standortbeschreibung

Bezeichnung
Dammversuch

Zusatz
keine Angaben

Vorhabenbeschreibung
keine Angaben

Geographische Lage

Hochwert 5500000 m Rechtswert 4500000 m

Aktenzeichen 123456

Auftraggeber keine Angaben

Datum 15.03.2008 Projektbearbeiter Student

OK Cancel

Abbildung 38: Dialogfeld zur Beschreibung der Standort- oder Projektinformationen

8.5.2 Dialogfeld Ausgabezeitpunkte

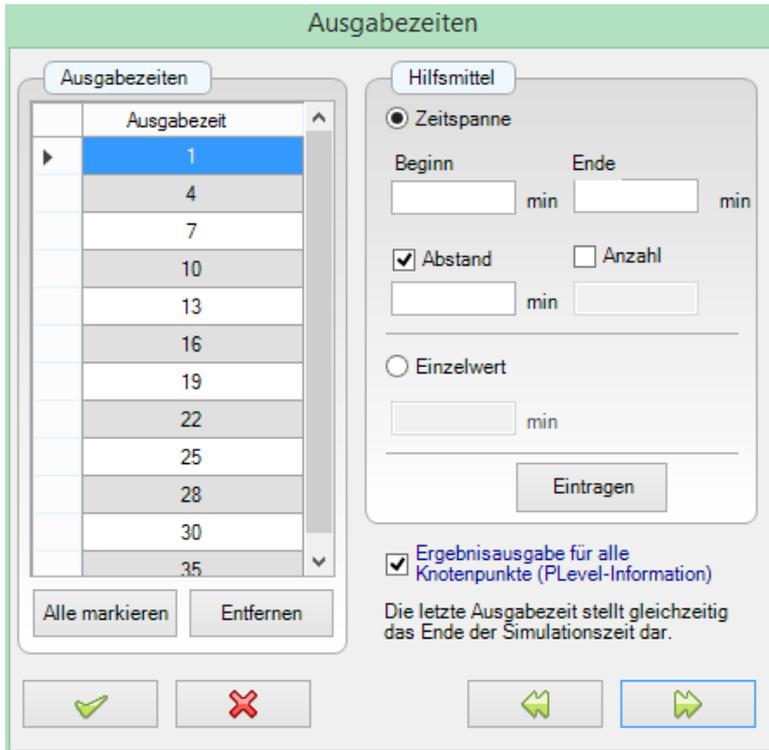


Abbildung 39: Dialogfeld zur Definition der Speicherzeitpunkte

8.5.3 Dialogfeld Simulationssteuerung

Simulationssteuerung

Zeitinformationen

Startdatum Startzeit min

Anfangszeitweite min

Grenzen der Zeitschritte Min: min
Max: min

Multiplikationsfaktor, falls ≤ 3 Iterationen

Multiplikationsfaktor, falls ≥ 7 Iterationen

Iterationskriterien

Max. Anzahl Iterationsschritte

Absoluter Iterationsfehler cm

Relativer Iterationsfehler

Optionen für Stofftransport

Lösungsschema

Bei nichtlinearer Sorption

Absoluter Iterationsfehler Konzentration g/l

Relativer Iterationsfehler Konzentration

Stabilität und Oszillation

Upstream weighting verwenden

Verwendung künstlicher Dispersion

Stabilitätskriterium (PeCr)

Abbildung 40: Dialogfeld zur Steuerung der numerischen Lösung

8.5.4 Dialogfeld Materialparameter

Materialparameter

1/2

Schichtansprache (DIN 4022)

Bodenart (DIN 4220)
 Ss; NFK: 20,3

Schadstoff
 nicht festgelegt

Hydraulik | Stofftransport | Bewuchs

Bodenspezifische Parameter

Trockenrohddichte	ρ_b	<input type="text" value="1,5"/>	g/cm ³
Diffusionskoeffizient	D_M	<input type="text" value="0"/>	cm ² /min
Diffusionskoeffizient in Luft	D_L	<input type="text" value="0"/>	cm ² /min
Longitudinale Dispersivität	δ_L	<input type="text" value="10"/>	cm
Transversale Dispersivität	δ_T	<input type="text" value="2"/>	cm

Sorptionsparameter

Sorptionsisotherme FREUNDLICH-Isothe ▾

Freundlich - Koeffizient	K_F	<input type="text" value="1,2"/>	µg(1-n)/n/kg
Freundlich - Exponent	q	<input type="text" value="0,67"/>	
Henry-Koeffizient (Gasphase) K <input type="text" value="0"/> [-]			

Abschätzfunktionen

Schadstoffdatenbank

Reaktionsparameter

Zerfallskonstante 0. Ordnung (gelöst)	γ_w	<input type="text" value="0"/>	[-]
Zerfallskonstante 0. Ordnung (fest)	γ_s	<input type="text" value="0"/>	[-]
Zerfallskonstante 0. Ordnung (Gasphase)	γ_g	<input type="text" value="0"/>	[-]
Zerfallskonstante 1. Ordnung (gelöst)	μ_w	<input type="text" value="0"/>	1/min
Zerfallskonstante 1. Ordnung (fest)	μ_s	<input type="text" value="0"/>	1/min
Zerfallskonstante 1. Ordnung (Gasphase)	μ_g	<input type="text" value="0"/>	1/min

✓
✗

↶
↷

Abbildung 41: Dialogfeld Materialparameter zur Definition der Stofftransportparameter

Materialparameter

Pflanze:

Druckhöhe bei max. Pflanzenwurzelentzug: cm

Breite Verdunstungsoberfläche: cm

Verdunstungsparameter der Variante

Druckhöhe für Start Pflanzenwurzelentzug: cm

Druckhöhe P2H: cm

Druckhöhe P2L: cm

Druckhöhe am Welkepunkt: cm

Potentielle Transpirationsrate r2H: cm/min

Potentielle Transpirationsrate r2L: cm/min

Entzug [-]

Druckhöhe [cm]

Abbildung 42: Dialogfeld Materialparameter zur Definition der Parameter für den Pflanzenwurzelterm

8.6 Messwerte für Beit-Netofa-Ton

Die Messwerte wurden aus (van Genuchten, 1980) für den Boden mit der Bezeichnung „Beit Netofa clay“ übernommen.

Obs. No.	Pressure head	Water content	Weighting coefficient
1	1.400	.4450	1.0000
2	3.850	.4200	1.0000
3	5.900	.4000	1.0000
4	8.200	.3820	1.0000
5	13.000	.3700	1.0000
6	17.000	.3600	1.0000
7	21.000	.3540	1.0000
8	25.000	.3460	1.0000
9	31.000	.3400	1.0000
10	40.500	.3350	1.0000
11	57.000	.3220	1.0000
12	80.000	.3000	1.0000
13	110.000	.2700	1.0000
14	130.000	.2600	1.0000
15	160.000	.2400	1.0000

	Pressure head	Conductivity	Weighting coefficient
16	.0120	.1000E+01	1.0000
17	.0550	.9000E+00	1.0000
18	.1700	.6900E+00	1.0000
19	.2800	.4200E+00	1.0000
20	.4600	.3000E+00	1.0000
21	.7000	.1950E+00	1.0000
22	1.0000	.1400E+00	1.0000
23	2.0000	.7200E-01	1.0000
24	3.0000	.3800E-01	1.0000
25	4.6000	.2000E-01	1.0000
26	5.5000	.1150E-01	1.0000
27	7.0000	.5500E-02	1.0000
28	10.0000	.1850E-02	1.0000

8.7 Simulationslaufzeiten für Parallelberechnung

Laufzeiten der Modelle in s

Anzahl CPU	Modell a	Modell b	Speed Up a	Speed Up b
1	13,4	392	1	1
2	10,9	317	1,2293578	1,23659306
4	10,4	283	1,28846154	1,38515901
6	10	262	1,34	1,49618321
8	8,7	260	1,54022989	1,50769231
10	9,1	277	1,47252747	1,41516245
11	9,2	276	1,45652174	1,42028986
12	9,2	263	1,45652174	1,4904943

8.8 Vorgabe unscharfer Eingabewerte

8.8.1 Eingabe unscharfer Bodenparameter

PCSiWaPro beschreibt die hydraulischen und bodenphysikalischen Eigenschaften eines Bodens über 9 einzelne Parameter. Es soll zudem möglich sein, für jeden Parameter dreiecks- oder trapezförmige Zugehörigkeitsfunktionen vorzugeben. Folgendes Eingabeformat wurde daher gewählt:

```
Thr ths  tha thm Alfa  n      Ks      Kk      thk
.01 0.45  .0  0.45 .01  1.6   26.495  26.495  0.45
.01 0.45  .0  0.45 .09  2.6   26.495  26.495  0.45
.01 0.45  .0  0.45 .04  2.3   26.495  26.495  0.45
.01 0.45  .0  0.45 .06  2.3   26.495  26.495  0.45
```

Die erste Zeile stellt die linke Berandung des α_0 -Levels dar, die zweite Zeile die rechte Berandung des α_0 -Levels. Die Zeilen 3 und 4 stellen die entsprechenden Werte für den α_1 -Level dar. Im obigen Beispiel sind die Parameter *Alfa* (hier: van-Genuchten-Parameter) und *n* als Fuzzy-Zahlen angegeben, wobei *Alfa* trapezförmig ist und *n* in Dreiecksform (die Werte des α_1 -Levels sind identisch) vorgegeben wird. Die Intervallgrenzen, die aus den jeweiligen α -Schnitten berechnet werden, stellen die oberen und unteren Beschränkungen für den Optimierungsalgorithmus NLPLQP dar. Die unscharfen Parameter werden aus einer separat zu erstellenden Eingabedatei „MatInformation.in“ vom Steuerprogramm ausgelesen, um die programmtechnischen Änderungen im Simulationsprogramm so gering wie möglich zu halten und damit eine möglichst allgemeingültige Verwendbarkeit zu erhalten.

8.8.2 Vorgabe unscharfer Transportparameter

Die Vorgabe der Stofftransportparameter erfolgt analog zur Definition der Bodenparameter. Insgesamt können 20 Parameter zur Beschreibung des Stofftransports definiert werden, getrennt für boden- und stoffspezifische Parameter. Zum Einlesen durch das Steuerprogramm werden diese ebenfalls in der Datei „MatInformation.in“ direkt nach den Bodenparametern abgelegt.

```
Bulk.d. DispL  DispT  Frac  (1...NMat)
1.7      0.68   0.068   1.0
1.7      0.68   0.068   1.0
1.7      0.68   0.068   1.0
```

Anhang

```
1.7      0.68      0.068      1.0
Dif.w.   Dif.g.   -----
(1.solute)
0.0      0.0
0.0      0.0
0.0      0.0
0.0      0.0
KS Nu Beta Henry SnkL1 SnkS1 SnkG1 SnkL1' SnkS1' SnkG1' SnkL0 SnkS0 SnkG0
Alfa
.16 0.0 1.0 0.0 0.63 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
.46 0.0 1.0 0.0 0.80 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
.25 0.0 1.0 0.0 0.68 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
.39 0.0 1.0 0.0 0.78 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
```

Die Vorgabe von Fuzzy-Zahlen in Dreiecks- oder Trapezform ist hier ebenfalls über die Definition der entsprechenden Zugehörigkeitswerte möglich (wie im vorigen Abschnitt).

8.8.3 Vorgabe unscharfer Randbedingungen

Das Simulationsprogramm PCSiWaPro kann unterschiedliche Strömungsrandbedingungen berücksichtigen. Diese lassen sich in Randbedingungen DIRICHLET (1. Art) und NEUMANN (2. Art) untergliedern. Randbedingungen 1. Art stellen dabei auf den Modellrand wirkende Druckhöhen dar, während Randbedingungen 2. Art durch Volumenströme über den Rand beschrieben werden. Die Zuweisung der einzelnen Randbedingungsarten erfolgt in PCSiWaPro über eine Kodierung mit vorzeichenbehafteten Integer-Zahlen, wobei positive Werte als Randbedingung 1. Art gewertet werden. Der Wert 0 sowie negative Zahlen bedeuten Randbedingungen 2. Art.

Da auch hier sowohl trapez- als auch dreiecksförmige Zustandsfunktionen vorgegeben werden sollen, wurde das folgende Eingabeformat gewählt:

```
RB-Code   $\alpha_0$ -links   $\alpha_0$ -rechts   $\alpha_1$ -links   $\alpha_1$ -rechts
1         -8.0         8.0         -3.0         2.0
-1        -0.2         0.2         -0.05        0.1
```

Die Angaben sind in der Datei „BCInformation.in“ vorzunehmen, wobei die Reihenfolge der RB-Kodierung keine Rolle spielt. Es müssen zudem nicht zu jeder im Modell vorhandenen Randbedingung Daten eingegeben werden. Das Layout wurde hier von einer zeilenweisen auf eine spaltenweise Vorgabe geändert, da die Anzahl der Randbedingungen im Gegen-

Anhang

satz zu den Boden- und Transportparametern a priori nicht bekannt ist. Wie im vorigen Abschnitt gilt auch hier, dass die aus den α -Schnitten berechneten Intervallgrenzen die jeweiligen Beschränkungen für den Optimierungsalgorithmus darstellen.