



## Geofakten 8

■ Wasser

### Hinweise zur Anwendung numerischer Modelle bei der Beurteilung hydrogeologischer Sachverhalte und Prognosen in Niedersachsen

3. Auflage

Neuß, M. & Dörhöfer, G.

April 2009

*Numerische Modelle im Bereich der Hydrogeologie werden bei zahlreichen Fragestellungen eingesetzt. Die hierfür erforderlichen Voraussetzungen und Einschränkungen werden aus der Sicht einer hydrogeologischen Fachbehörde dargestellt. Besonders wichtig sind die Erstellung des hydrogeologischen Modells und die nachfolgende Diskretisierung des Untersuchungsraumes. Die Modellergebnisse sind durch Kontrollfunktionen abzusichern, auf Fehler zu betrachten und zu dokumentieren.*

Grundwassermodell, Diskretisierung, Randbedingungen, Systemeigenschaften, Grundwasserbilanz, Kalibrierung, Validierung, Hydrogeologie, Prognose.

#### 1. Anwendungsbereiche

Der Einsatz numerischer Strömungs- und Transportmodelle in der Hydrogeologie ist inzwischen fast zu einer Standardanwendung geworden. Die Modelle können – je nach Fragestellung – einen sehr komplexen Charakter haben und setzen daher eine gute Kenntnis des zu untersuchenden Raumes voraus. Modelle werden von zahlreichen Anwendergruppen benutzt, beispielsweise

- Wasserwirtschaftsinstitutionen,
- Ministerien, Fachbehörden, Landkreisen,
- Wasserbeschaffungsverbänden,
- Ingenieurbüros,
- Bergbau,
- Industrie,
- Abfallwirtschaftsinstitutionen,
- Forschung,
- Altlasten- und Bodenschutzinstitutionen.

Modelle werden bevorzugt für die folgenden hydrogeologischen Anwendungsbereiche eingesetzt:

- Ermittlung und Darstellung der Grundwasserströmung,
- Abgrenzung von Einzugs- und Schutzgebieten,
- Prognose und Bewertung der Auswirkungen von Grundwasserentnahmen,
- Bilanzierung und Bewirtschaftung von Grundwasservorkommen,

- Beurteilung der Wechselwirkung Grundwasser/oberirdische Gewässer,
- Beschreibung von Dichteschichtungen im Grundwasser,
- Beschreibung und Prognose von Ausbreitungsvorgängen im Grundwasser.

In allen diesen Bereichen sind Modelle inzwischen zu fundierten Entscheidungshilfen geworden. Für ihren Einsatz sind Daten und Überlegungen zum Verständnis der mitunter komplizierten Geologie von grundlegender Bedeutung, aus der die konzeptionellen Modellvorstellungen über die hydrogeologischen Verhältnisse abgeleitet werden müssen. Die Berücksichtigung von Transportparametern und die Beschreibung der Transportprozesse sind derzeit zwar noch auf Einzelfälle beschränkt, gewinnen aber zunehmend an Bedeutung.

Es wird deshalb erforderlich, einen Minimalkatalog von Anforderungen an dieses Werkzeug zu formulieren, um u. a. einen bestimmten Leistungsstandard zu gewährleisten (detailliertere Anforderungen sind in der Technischen Regel W 107 (DVGW 2004) beschrieben). Darüber hinaus soll aufgezeigt werden, wo das LBEG als Staatlicher Geologischer Dienst (SGD) zukünftig Daten zur Verfügung stellen kann. Es liegen bereits Arbeitsunterlagen zu technischen und fachlichen Aspekten der Modellierung vor (DVWK 1985, FH-DGG 2000, KINZELBACH et. al. 1996), die zu den Modellvoraussetzungen und der Erstellung der hydrogeologischen Modellvorstellung wertvolle Informationen liefern. Hier sollen die wesentlichen Gesichtspunkte

te aus der Sicht der hydrogeologischen Fachbehörde Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG) dargestellt werden.

## 2. Modellkonzept

### 2.1 Dimensionalität

Je nach Aufgabenstellung sowie der geologischen und hydrogeologischen Situation können Modelle unterschiedlicher Dimensionalität stationär oder instationär eingesetzt werden:

- 1-D-Modelle für spezielle, oft lokal begrenzte oder prinzipielle Fragestellungen,
- 2-D-Modelle bei einfachem geologischem Bau und entsprechender Fragestellung unter Vernachlässigung vertikaler Gradienten (diese Entscheidung sollte begründet werden),
- 3-D-Modelle bei kompliziertem hydrogeologischem Bau, beim Auftreten von nennenswerten vertikalen Gradienten und entsprechender Fragestellung, z. B. Wechselwirkung mit oberirdischen Gewässern.

### 2.2 Hydrogeologisches Modell

Das hydrogeologische Modell ist die konzeptionelle Visualisierung der hydrogeologischen Verhältnisse. Es enthält abstrahierte Darstellungen zur geologischen Struktur des Untergrundes und seiner hydraulischen Eigenschaften sowie zur chemischen Beschaffenheit des Grundwassers und der durchströmten Gesteine. Das hydrogeologische Modell ist eine Idealisierung und Vereinfachung der realen Bedingungen und entspringt den Überlegungen des bearbeitenden Hydrogeologen. Es ist die Vorstufe der Diskretisierung und muss daher alle wesentlichen Informationen enthalten. Die hierfür erforderlichen Modelleingabedaten und Randbedingungen erlauben die Zerlegung des Raumes (ggf. auch der Zeit) in diskrete Elemente. Die anschließenden Schritte der Kalibrierung und der Validierung (s. u.) stellen eine wichtige Ergänzung zur Fortentwicklung des hydrogeologischen Modells dar. Im Einzelnen lassen sich die Schritte zur Entwicklung des numerischen Modells aus dem hydrogeologischen Modell – entsprechend der Fragestellung – wie folgt definieren:

- Skalierung des Modellraumes (s. 2.2.1),
- Darstellung des Untergrundes (1 D, 2 D oder 3 D, s. 2.2.2),
- Differenzierung nach hydrostratigrafischen Einheiten (s. 2.2.3),
- Diskretisierung in Raum und ggf. Zeit (s. 2.2.4),

- Vorgabe der Bedingungen an allen Modellrändern (s. 2.2.5),
- Definition von Anfangsbedingungen (s. 2.2.6).

Die Umsetzung des konzeptionellen hydrogeologischen Modells aus den Basisdaten zur gesättigten und ungesättigten Zone zeigt Abbildung 1.

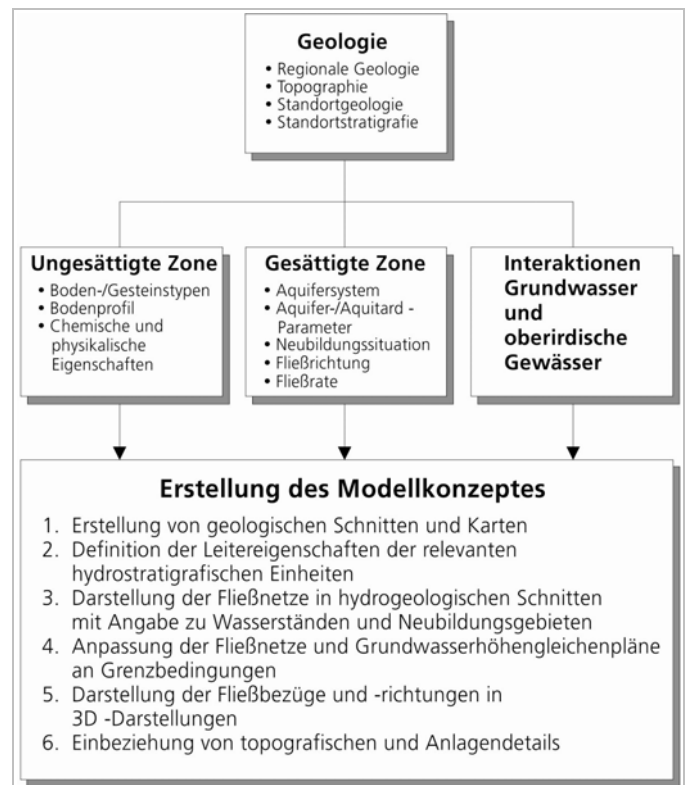


Abb. 1: Prozess der Entwicklung des hydrogeologischen Modells, umgezeichnet nach SARA (1993).

#### 2.2.1 Skalierung des Modellraumes

Die Wahl der Größe des Modellraumes wird von der Aufgabenstellung sowie von der Verfügbarkeit hydrogeologischer Daten bestimmt und muss folgenden Kriterien genügen:

- Der zu betrachtende Modellraum muss vollständig erfasst werden.
- Der Modellraum (das Untersuchungsgebiet) ist so zu bemessen, dass er deutlich größer als das Berechnungsgebiet und auch größer als das Aussagegebiet ist (DVWK 1985).
- Eine Beeinflussung der gewählten Modellränder ist auszuschließen oder zu minimieren. Auswirkungen auf Modellränder durch Maßnahmen im Aussagegebiet sind zu diskutieren.

Ein Modellraum mit ungenügender Datendichte ist nicht geeignet, Nachbildungen von Strukturen oder Verhaltensweisen der Natur zu ermöglichen. In diesem Fall muss gemeinsam mit dem Hydrogeologen und unter Berücksichtigung der erforderlichen Aussagegenauigkeit eine Strategie zur Datenverdichtung entwickelt und umgesetzt werden, denn Modelle ersetzen nicht die Datenerhebung und entbinden nicht von Entscheidungen (HOFFMANN 1991). In solchen Fällen ist der Ausdruck „Numerische Abschätzung“ eher angebracht. Deshalb sollte die Auswirkung der Randbeeinflussung diskutiert werden.

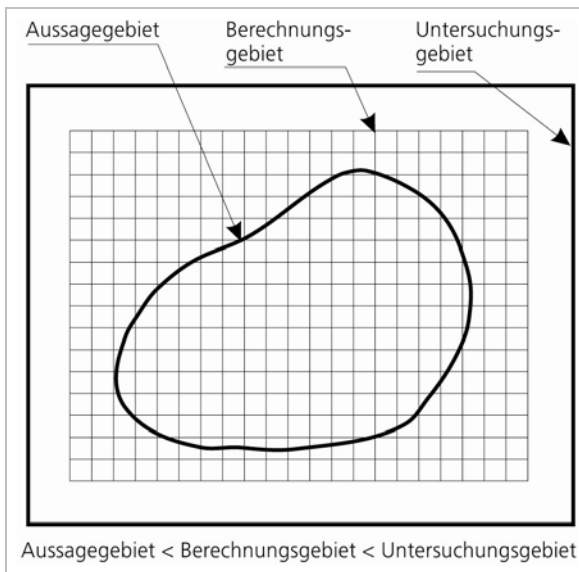


Abb. 2: Skalierung des Modellraums, umgezeichnet nach DVWK (1985).

## 2.2.2 Darstellung des Untergrundes

Bei der Anwendung von Modellen in der gesamten oben genannten Breite ist die Verfügbarkeit der relevanten Eingabedaten an möglichst zentraler Stelle und in weitgehend aufbereiteter Form wünschenswert. Gerade diesen Teil können die Staatlichen Geologischen Dienste mit ihren Flächen- und Punktdaten zur Geologie, zur Hydrogeologie und zur Dynamik des Grundwassers gut wahrnehmen. Dies setzt aber eine verstärkt am Bedarf orientierte Aufbereitung der Daten und die Bereitstellung von funktionalen Schnittstellen voraus. Das Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG) hat begonnen, sich auf diese neuen Erfordernisse auszurichten.

- Die Flächendaten zu Böden und zur Oberflächengeologie werden in mehreren Maßstabsebenen digital vorgehalten. Sie können als ArcView- oder ArcInfo-Files im Exportformat abgegeben werden.

- Die Aufbereitung des mitteltiefen Untergrundes, wie er bei der Modellierung meist benötigt wird, ist noch nicht so weit fortgeschritten. Allerdings stehen die Bohrdatenbank mit über 260 000 Bohrungen und rund 200 aufbereitete regionale Schnitte zur Verfügung. Diese beiden Datenmengen können eine Diskretisierung unterstützen.
- Umfangreiche geophysikalische Daten (z. B. Geoelektrik, Seismik, Geomagnetik, Bohrlochmessdiagramme) ergänzen das Aufschlussmaterial im Archiv des LBEG.
- Hydrogeologische Karten enthalten Informationen über die Lage der Grundwasseroberfläche, hydrogeologische Räume und Teilräume, das Schutzpotenzial der Grundwasserüberdeckung und über die Grundwasserbeschaffenheit.
- Das von KUNKEL & WENDLAND 1999 entwickelte Verfahren GROWA zur Ermittlung der Grundwasserneubildung ist weiter entwickelt worden. Ergebnisse dieses Verfahrens in der Version von 2006 sind beim LBEG erhältlich. Die digitalen Daten können direkt in die Modelle übernommen werden.
- Der Fachbereich Bodenkunde bietet zusätzlich Daten zur Sickerwasserrate aus dem Boden an.

Im LBEG ist damit begonnen worden, in ausgewählten Räumen 3-D-Untergrundmodellierungen zu erarbeiten. Mit diesem digitalen Datenbestand können im Zusammenhang mit der Regionalisierung des mitteltiefen Untergrundes von Norddeutschland in Zukunft der Aufbau und die Datenbestückung von Modellen erheblich gestrafft werden. Bisher sind aber nur wenige Gebiete verfügbar.

Andererseits werden die Fachbüros dazu aufgerufen, bei der Modellerstellung verstärkt 3-D-Untergrundmodelle zu erarbeiten und mit dem Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie auszutauschen.

### Hinweis

Einschränkend muss allerdings festgestellt werden, dass bei der Modellierung detaillierter Fragestellungen (wie z. B. eines Wasserschutzgebietes oder eines CKW-Schadens) i. d. R. eine Ergänzung durch lokale projektbezogene geologische und hydrogeologische Erkundungsdaten erfolgen muss, da der Datenbestand des LBEG einen der-

art großen Abbildungsmaßstab normalerweise nicht befriedigend auflösen vermag.

### 2.2.3 Differenzierung nach hydrostratigrafischen Einheiten

Für die Vereinheitlichung der Ansprachen und die Digitalisierung geologischer und hydrogeologischer Informationen hat das LBEG eine Tabelle der relevanten hydrostratigrafischen Einheiten entwickelt (REUTTER 2000), die für den Lockergesteinsbereich auch mit den Nachbarländern abgestimmt und veröffentlicht wurde (MANHENKE et al. 2001). Eine überarbeitete Version, erweitert um die Festgesteinsgebiete, wurde von REUTTER 2005 vorgestellt. Die Verständigung auf einheitliche hydrostratigrafische Einheiten ist eine grundlegende Bedingung für die Erfassung der Raumstrukturen des Untergrundes, zudem eine wesentliche Voraussetzung für einen schnellen Zugriff zu Modelleingabedaten. Entscheidend ist die Zuordnung der hydrostratigrafischen Einheiten zu den Schichtabschnitten in den Bohrungen, die für die Darstellung in Schnitten benutzt werden.

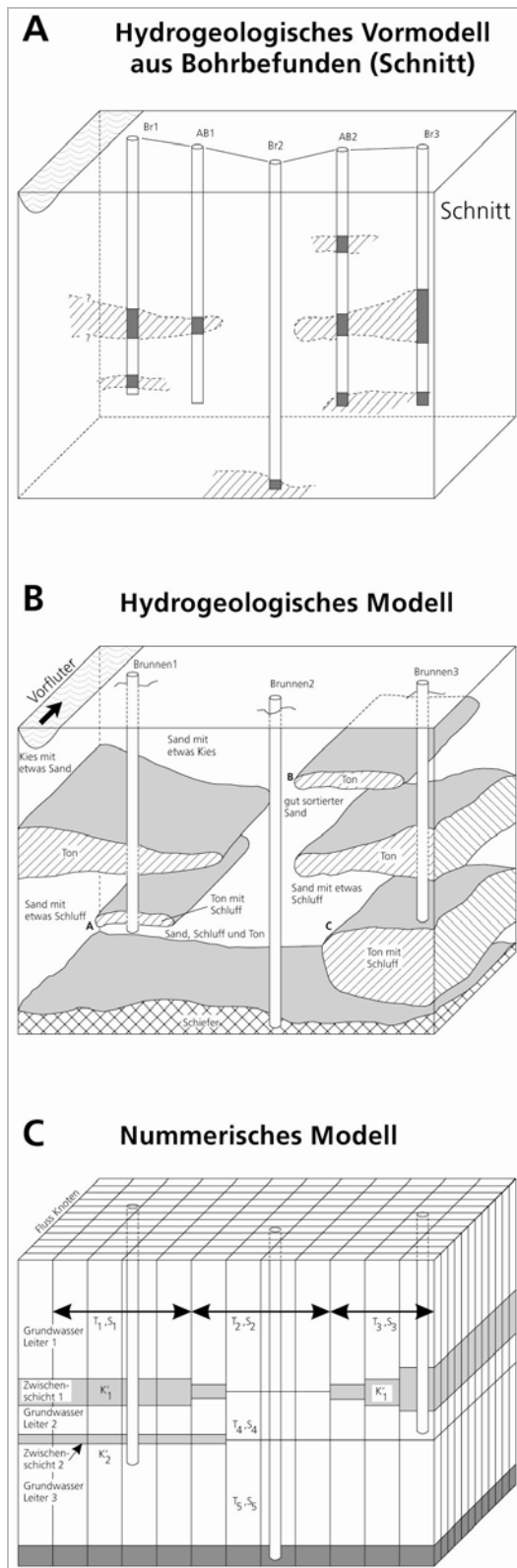


Abb. 3: Schritte zur Diskretisierung des numerischen Modells (C) aus hydrogeologischem Vormodell (A) und Modell (B), ergänzt nach ANDERSON & WOESSNER (1992).

### 2.2.4 Diskretisierung in Raum und Zeit

Die Diskretisierung des zu untersuchenden Raumes in einzelne Berechnungselemente ist die Grundlage für alle weiteren Schritte und erfordert daher besondere Sorgfalt und hydrogeologischen Sachverstand. In diesem Zusammenhang ist auch über den Berechnungsansatz zu entscheiden:

- Finite-Elemente (FE)-Methode,
- Finite-Differenzen (FD)-Methode,
- Finite-Volumen (FV)-Methode.

Die Wahl des Berechnungsansatzes richtet sich nach der Aufgabenstellung und nach der verfügbaren Software. Bei ausreichender Datendichte lassen sich lokal feine Diskretisierungen im Bereich betrachteter Objekte mit der FE-Methode leichter und besser realisieren (Speicherplatz- und Rechenzeitoptimierung, naturnähere Abbildung). Eine sehr feine Auflösung bei geringerer Datendichte suggeriert lediglich eine präzisere Modellaussage, die in Wirklichkeit nur eine bessere Auflösung der Interpolation numerischer Ergebnisse ist. Die so erzielte Aussage ist nicht belastbarer, als die einer größeren Diskretisierung, und ist zu vermeiden.

Bei nennenswerten nachgewiesenen vertikalen Gradienten in einem Aquifersystem sind diese, auch in „nur“ einstöckigen Systemen, bei der vertikalen Diskretisierung zu berücksichtigen.

Die Berücksichtigung der Wechselbeziehungen zwischen oberirdischen Gewässern und dem Grundwasser kann eine eigene Modellebene er-

forderlich machen, wenn eine Beeinflussung oberflächennaher Bereiche durch einen Störimpuls (z. B. eine zu prognostizierende Grundwasserentnahme) auf die freie Wasseroberfläche nicht auszuschließen ist und dieser Einfluss durch die gewählte Randbedingung in der „Grundwasserebene“ nicht mehr aufzulösen ist.

Grundsätzlich ist es erforderlich, dass für eine Modelldiskretisierung geologische und/oder hydrogeologische Schnitte angefertigt werden, die es erlauben, die Umsetzung des hydrogeologischen Sachverhaltes in ein Modell zu ermöglichen und auch zu dokumentieren.

Für das Ergebnis der Modellierung der Grundwasserströmung spielen die Raumlagen besonders hoch und besonders gering leitfähiger Schichtkomplexe eine große Rolle. Die dreidimensionale Nachbildung des hydrogeologischen Untersuchungsraumes kann letztlich nur unvollständig erfasst werden; eng vernetzte Schnitte schaffen jedoch eine gute Voraussetzung für das Verständnis des Raumes.

Am Beginn der Erfassung der Strukturen des Untergrundes steht in der Regel

- die Zusammenstellung aller wesentlichen Bohrdaten im Untersuchungsgebiet (vgl. Abb. 3),
- die Heranziehung weiterer Daten zur Struktur des Untergrundes, insbesondere geophysikalischer Daten und vorinterpretierter Strukturpläne,
- die Kompilation ausgewählter Daten zu einem Vormodell (Abb. 3 A), das noch wesentlich auf Rohdaten basiert.

Die für die eigentliche hydrogeologische Modellierung (Abb. 3 B) zu nutzenden hydrogeologischen Schnitte müssen einige wesentliche Anforderungen erfüllen:

- Richtung in oder quer zur bekannten oder erwarteten regionalen Grundwasserströmung,
- Einpassung auf die Schnittlinie liegender oder projizierter Bohrungen,
- vertikale Abgrenzung von Schichten mit ähnlichen Durchlässigkeitseigenschaften,
- hydrostratigrafische Zuordnung relevanter hydrogeologischer Einheiten,
- widerspruchsfreie Geologie und Hydrostratigrafie an den Kreuzungspunkten der Schnitte,

- Angabe zu den Grundwasserständen und zum Porenwasserdruck an den Belegpunkten unter Berücksichtigung von datierten Messungen,
- Erstreckung der Schnitte deutlich über das Berechnungsgebiet (Abb. 2) hinaus, um die Randbedingungen definieren und beschreiben zu können.

### Hinweis

Die Regionalisierung von Eingabedaten für die Diskretisierung muss unbedingt auf Plausibilität geprüft werden, weil es sonst zu Problemen bei der Kalibrierung und der Ergebnisinterpretation kommen kann (MEYER 1996). Bei der Erstellung von flächigen interpretierten und regionalisierten Darstellungen sind die genaue Lage der Belegpunkte und der jeweilige dort angetroffene Wert (z. B. Standrohrspiegelhöhe, Mächtigkeit, Höhenlage) anzugeben.

### 2.2.5 Vorgabe der Bedingungen an allen Modellrändern

Ein Strömungs- oder Transportmodell benötigt an allen Modellrändern Vorgaben zu den hydraulischen Bedingungen an diesen Rändern. Diese Vorgaben sind aus Naturdaten und aus der Interpretation des hydrogeologischen Sachverhaltes bzw. des hydrogeologischen Modells abzuleiten. Neben der Vorgabe von Systemeigenschaften bestimmen die Randbedingungen die Zuverlässigkeit der Aussagen des nachgebildeten Systems entscheidend.

Es wird zwischen drei Arten von Randbedingungen unterschieden:

- Festpotenzialrand (Dirichlet'sche Randbedingung),
- Zu- oder Abstromrand (Neumann'sche Randbedingung),
- potenzialabhängige Zusickerung (Cauchy'sche Randbedingung).

Randbedingungen sind grundsätzlich durch Naturmessungen zu definieren. Ränder sollten so formuliert werden, dass sie einfache Randbedingungen ergeben und plausibel sind. Sie sind zu begründen.

Oberirdische Gewässer sollten entweder als eigene Modellebenen, als Zu-/Abstromrand oder als potenzialabhängige Zusickerung nach Naturmessungen vorgegeben werden.

Die Modellbasis ist mit ihrer Randbedingung zu beschreiben und aus hydrogeologischer Sicht zu diskutieren.

Die Grundwasserneubildung auf dem oberen Modellrand des Aquifersystems ist eine sensible Größe. Sie sollte aus validierten Daten zur Grundwasserneubildung (s. o.) übernommen werden, kann aber auch aus bodenkundlichen Untersuchungen, Wasserhaushaltsbetrachtungen oder nach hydrogeologischen Untersuchungsergebnissen in Verbindung mit Klimadaten speziell hergeleitet werden. Diese Ergebnisse sind nachvollziehbar darzustellen und zu diskutieren.

In der Regel werden vertikale Ränder durch Festpotenziale, Wasserscheiden oder Stromlinien definiert. Das setzt voraus, dass diese Festlegungen durch Naturmessungen in ausreichender Dichte belegbar sind und als relativ sichere Interpretationen vorliegen. Allerdings wird man auf Schätzungen angewiesen sein, wenn diese Datendichte nicht mehr ausreichend ist und/oder das darzustellende System differenzierter wird. Dies ist oft der Fall, wenn mit dem Auftreten von nennenswerten vertikalen Gradienten zu rechnen ist und diese durch fehlende Naturmessungen nicht belegbar sind, wie es z. B. in Zwischenschichten, die eine deutlich geringere hydraulische Leitfähigkeit aufweisen, der Fall ist. Auch in solchen Fällen können weitere Erkundungen erforderlich werden.

### **2.2.6 Definition von Anfangsbedingungen**

Anfangsbedingungen beschreiben die Bedingungen, die zu Beginn instationärer Bedingungen herrschen; hierzu zählen der Quellterm, unterschiedliche Randpotenziale oder Wassermengen auf den Rändern und Entnahmen. Sollten instationäre Modellrechnungen erforderlich sein, so sind zusätzlich zu den oben beschriebenen Daten (s. 2.2.5) Vorgaben zur zeitlichen Diskretisierung erforderlich.

Das bedeutet, dass die Randbedingungen in der vorgegebenen zeitlichen Auflösung zumindest bereichsweise bekannt sind oder zumindest abgeschätzt werden können.

Die betrachteten Zeitintervalle müssen gleich oder ähnlich sein. Die Abschätzung ist plausibel und nachvollziehbar zu begründen. Auch hier ist ein weiterer Erkundungsbedarf in Form von Messreihen nicht auszuschließen.

## **3. Systemeigenschaften**

### **3.1 Hydraulische Grundlagendaten**

Zur Erstellung von Strömungsmodellen sowie deren Kalibrierung und Validierung werden Naturdaten und abgeleitete Daten als Eingabedaten benötigt. Dies sind neben den o. a. Daten zur Modellgeometrie und zu den Systemeigenschaften (einschließlich Anisotropie) sowie zu den Randbedingungen und gegebenenfalls Anfangsbedingungen im Wesentlichen hydraulische Daten.

Für die Kalibrierung werden Daten zu Wasserständen und Abflussmengen (Kontrollfunktionen) benötigt. Diese werden beim Niedersächsischen Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz (NLWKN) vorgehalten. Das LBEG verfügt in seinem Datenbestand über Daten zu den hydraulischen Basisparametern, mit denen die Erstellung von Strömungsmodellen erheblich vereinfacht und beschleunigt werden kann.

Dies sind zum einen petrografische Angaben zu Schichtenverzeichnissen der Bohrdatenbank. Die Ermittlung von hydraulischen Systemeigenschaften aus der Abfolge der Schichtenverzeichnisse kann durch so genannte Standard- $k_f$ -Werte direkt durch ein automatisiertes Retrieval aus der Bohrdatenbank erfolgen.

Weiterhin liegen im Archiv des LBEG viele direkte Messungen der hydraulischen Leitfähigkeiten definierter Schichtabschnitte oder Räume vor. Die hydraulischen Tests an einzelnen Brunnen bzw. Bohrungen können in der Regel bestimmten Schichten zugeordnet werden (Slug-/Bail-Tests, Versickerungsversuche, Einpressversuche etc). Die Daten aus Pumpversuchen haben einen stärkeren Raumbezug und müssen daher bezüglich der Übertragbarkeit auf bestimmte Schichten interpretiert werden.

### **3.2 Daten zu Ausbreitungsrechnungen**

Für den Fall einer Ausbreitungsmodellierung sind darüber hinaus Angaben zu Ausbreitungsparametern, wie z. B. zur Porosität, Dispersion, Diffusion, Sorption, sowie zum Quellterm und zu entsprechenden Kontrollfunktionen erforderlich. Die für diese Modellaussagen erforderlichen Daten sind derzeit noch nicht in der vergleichsweise dichten Datenbelegung wie die zur Grundwasserströmung im Archiv des LBEG aufbereitet worden. Die Abschätzung von Bandbreiten kann nur im regionalen Maßstab erfolgen, für detaillierte Modellaussagen sind nach wie vor diskrete Untersuchungsergebnisse die sichersten Eingangsdaten.

## 4. Ergebnisse und Interpretationen

### 4.1 Modellkalibrierung

Da bei einer Modellierung in keinem Fall alle erforderlichen Eingabedaten (Systemeigenschaften und Rand-/Anfangsbedingungen) bereits zu Beginn vollständig und naturnah zur Verfügung stehen, sind beim ersten Rechenlauf noch keine naturnahen Ergebnisse (Standrohrspiegelhöhen und Bilanzen) zu erwarten.

Durch Vergleich der numerisch ermittelten Lösung mit den gemessenen und interpretierten Kontrollfunktionen und anschließender Variation von Eingabedaten ist die Modellaussage zu optimieren. Dieser Vorgang ist ein sensibler Teil der Modellierarbeiten, denn er setzt hydrogeologischen Sachverstand einerseits und ein hohes Maß an Kritikfähigkeit andererseits voraus.

Kontrollfunktionen sind in der Regel Verteilungen von Standrohrspiegelmessungen in der Fläche und deren Interpretationen in den jeweiligen betrachteten Raumlagen der dargestellten Schichten des gesamten Untersuchungsgebiets (Abb. 2), zumindest über den als Grundwasserleiter ausgewiesenen Bereichen. Diese Darstellungen sollen für jeden Grundwasserleiter alle Messdaten nach Lage und Wert enthalten. Die interpolierten Wasserstandsverteilungen werden heute oft mit Inter- und Extrapolationssoftware erzeugt; das Ergebnis dieser Berechnungen ist mitunter schwer vermittelbar, weil das Ergebnis oftmals zu starr ist und der sachverständige hydrogeologische Input fehlt. Darum ist es unverzichtbar, die Softwarelösung nach fachlichen Gesichtspunkten zu prüfen und gegebenenfalls anzupassen.

Als zusätzliche Kontrollfunktion ist eine Bilanzierung von entweder über die Modellränder oder über Vorfluter ab- oder zuströmende Wassermengen heranzuziehen. Zumindest bei Vorflutern ist ein Vergleich von gemessenen und berechneten Wassermengen, sofern Messungen vorliegen, erforderlich. In kleinräumigen Modellgebieten ist dies zwingend erforderlich. Als Ergebnis ist eine Gesamtwasserbilanz zu formulieren, die als Modellaussage immer zur Verfügung steht. Diese „gerechnete“ Bilanz ist mit Naturmessungen, der angesetzten Grundwasserneubildung und geschätzten Mengen, die über weitere Ränder strömen, zu diskutieren. Die Bilanz muss plausibel sein.

Die Variation von Systemeigenschaften oder Randbedingungen mit dem Ziel, eine optimale Übereinstimmung von „gerechneten“ und „gemes-

senen“ Ergebnissen zu erzielen, erfordert Erfahrung. Es ist in keinem Fall ausreichend, nur an den Modellelementen oder deren Knoten, die repräsentativ für einen Punkt der Kontrollfunktion stehen, eine ausreichende Übereinstimmung zu erzielen. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass zwischen einzelnen Belegpunkten Bereiche mit von der Natur abweichenden Gefälleverhältnissen erzeugt werden. Variationen dürfen nur in den Bandbreiten erfolgen, die auch realitätsnah sind; dies gilt in besonderem Maße für die Verteilung der Grundwasserneubildung.

Die Kontrollfunktionen stellen die Interpretationen optimaler Lösungen dar, die vom Experten definiert wurden und die es nachzuvollziehen gilt. Dies gilt für stationäre Verhältnisse genauso wie für instationäre Bedingungen.

### Hinweis

Bei der Darstellung des Ergebnisses der Modellkalibrierung ist es erforderlich, nicht nur die Abweichungen von punktförmigen Messergebnissen gegen Berechnungsergebnisse zu dokumentieren, sondern auch die Abweichungen „gemessen zu gerechnet“ in der Fläche (HOFFMANN 1991, MEYER 1996). Mit dieser Darstellung ist die Bewertung der Modellkalibrierung in der gesamten durch das Modell erfassten Fläche (Berechnungsgebiet) einfacher und verständlicher (Abb. 4). Eine übliche Darstellung, bei der lediglich die Messergebnisse an Fixpunkten gegen die Berechnungsergebnisse an entsprechenden Modellzellen (oder Modellknoten) dargestellt werden, ist zwar nicht falsch, erreicht aber bei dem Nachweis der Güte der Modellanpassung nur ein Teilziel.

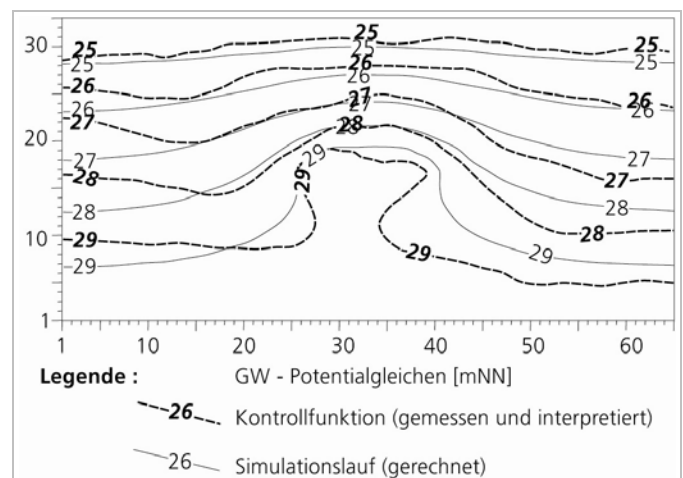


Abb. 4: Vergleich berechneter und gemessener Grundwassergleichen, umgezeichnet aus MEYER (1996).

## 4.2 Modellvalidierung

Der Nachweis, dass ein kalibriertes Modell „prognosefähig“ ist, erfolgt durch eine Validierung. Das bedeutet, dass mit mindestens einem unabhängigen Datensatz im Modellgebiet, der nicht für die Kalibrierung verwandt wurde, ein weiterer Rechenlauf erzeugt wird (DVWK 1999). Wenn dieses Ergebnis ein zur Kalibrierung plausibles Ergebnis aufweist, wird das kalibrierte Modell i. d. R. eine ausreichende Genauigkeit vorweisen. Sollte dies nicht der Fall sein, so ist die Kalibrierung zu überprüfen.

Die Validierung ist häufig leider bisher zu wenig beachtet worden; für eine nachvollziehbare Modellierung ist sie jedoch ein wesentlicher Bestandteil der Argumentationskette einer (ggf. justiziablen) Modelluntersuchung.

## 4.3 Prozessing

Modellergebnisse mit den heutigen Softwarelösungen erlauben ein teilweise exzellentes Prä- und Postprozessing. Dies kann dafür genutzt werden, um die Bandbreiten der Ein- und Ausgabedaten nicht nur bereitzustellen, sondern auch entsprechend darzustellen. Dabei sind Interpretationen zum Verhalten des Modells bei unterschiedlichen Parameterkombinationen eine wertvolle Hilfe für die Beurteilung der Aussageschärfe.

## 4.4 Fehlerbetrachtung

Die numerischen Fehler eines Rechenmodells werden weniger von der mathematischen Lösung als von der Diskretisierung bestimmt. Dies ist bei der Diskretisierung zu berücksichtigen. Allerdings setzt die lokale Datendichte hier Grenzen, denn eine sehr feine Auflösung erzeugt nur formal eine größere Genauigkeit.

Die Darstellung von Standrohrspiegelhöhenverteilungen und auch deren Differenzen gegenüber gemessenen und interpretierten Daten ist leicht möglich. Sie dient dem besseren Verständnis, auch gegenüber den Auftraggebern, die für gewöhnlich nicht über diese Spezialkenntnisse verfügen können. Dennoch muss immer wieder darauf hingewiesen werden, dass ein Modell in keinem Fall die natürlichen Verhältnisse exakt abbilden kann.

## 4.5 Sensitivitätsanalyse

Für die Beurteilung der Abbildungsschärfe eines Modells sind generelle Aussagen nicht möglich. Hier ist der Einfluss einzelner Parameter in Form von Sensitivitätsanalysen zu untersuchen, wie es

MEYER (1996) beispielhaft dargestellt hat. In kritischen Fällen kann durch die Vorgabe von extremen Parameterkombinationen ein konservativer Fall des entsprechenden Problems beschrieben oder stochastisch erzeugte Datensätze mit plausiblen Bandbreiten verwendet werden.

## 4.6 Dokumentation

Modelluntersuchungen sind in der Regel komplex und werden in zahlreichen Verfahren verwandt. Deshalb ist eine komplette Dokumentation, auch im Hinblick auf einen mittelfristigen Einsatz, zwingend erforderlich. In ihr müssen alle Eingabedaten nachvollziehbar angegeben und Annahmen erläutert werden, sie sollen auch für die Auftraggeber, die oft mit diesem Spezialgebiet nicht vertraut sind, lesbar sein. Ein Grundwassermodell (oder Ausbreitungsmodell) kann „langlebig“ sein. Aus diesem Grunde wird man es später, wenn im Projekt neue Daten erhoben oder andere Randbedingungen (z. B. Grundwasserentnahmen) vorgesehen werden, weiter verdichten und verbessern wollen. Dies und eine weitergehende Modellpflege sind nur mit einer verlässlichen Dokumentation möglich. Da die Modelle heutzutage Produkte einer ausgereiften Software sind, sollten die zusammengestellten Datensätze dem Auftraggeber zur Verfügung gestellt werden. Einzelne Arbeitsschritte, vom Beginn der Modellerstellung bis zur Prognose, sind gesondert darzustellen. Hierzu gehören z. B.:

- Aufgabenstellung,
- Begründung des Modellansatzes,
- Erstellung der hydrogeologischen Modellvorstellung,
- Dokumentation der Eingabedaten,
- Darstellung und Begründung der gewählten Randbedingungen,
- Darstellung der Kalibrierung mit Diskussion von schwer zu kalibrierenden Bereichen,
- Darstellung der Validierung und der Sensitivitätsanalyse,
- Ergebnisdarstellung mit Diskussion.

## 5. Ausblick

Im Grundsatz sind bereits in DVWK (1985), FH-DGG (2000) und DVGW (2004) die Voraussetzungen dargelegt worden, die bei der Modellierung der Grundwasserströmung und der Erstellung des hydrogeologischen Modells zu beachten sind. Aus der Sicht des LBEG wird ergänzend und im Hin-



blick auf die heutige Verfügbarkeit moderner Software formuliert, was derzeit erforderlich ist, welche Daten beim Staatlichen Geologischen Dienst verfügbar sind und wie bei einzelnen Modelluntersuchungen in Niedersachsen verfahren werden soll. Noch immer muss beachtet werden, dass eine komfortable Software und deren relativ einfache Bedienbarkeit das erforderliche Fachwissen nicht ersetzen können. Eine enge Zusammenarbeit zwischen Hydrogeologen und Modellerstellern ist die Grundlage für eine gezielte und sichere Problemlösung.

## Literatur

- ANDERSON, M. P. & WOESSNER, W. W. (1992): Applied Groundwater Modeling. – 381 S.; San Diego (Academic Press).
- DVWK (1985): Voraussetzungen und Einschränkungen bei der Modellierung der Grundwasserströmung. – Merkblätter zur Wasserwirtschaft **206**, 27 S., 11 Abb., 1 Taf.; Hamburg (Parey).
- DVWK (1999): Numerische Modelle von Flüssen, Seen und Küstengewässern. – DVWK-Schriften **127**, 440 S., 96 Abb., 17 Tab.; Bonn.
- DVGW (2004): Aufbau und Anwendung numerischer Grundwassermodelle in Wassergewinnungsgebieten. – Technische Regel, Arbeitsblatt **W 107**; Bonn.
- FH-DGG (2000): Hydrogeologische Modelle. Ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros und Fachbehörden. – FH-DGG, Hydrogeol. Beiträge **10**, 36 S., 5 Abb., 2 Tab.; Hannover.
- HOFFMANN, B. (1991): Einsatz hydraulischer Modelle bei der Lösung hydrogeologischer Probleme. – Nds. Akad. Geowiss. Veröff. **7**: 66–78, 6 Abb.; Hannover.
- KINZELBACH, W., VOSS, A., RAUSCH, R., SAUTY, J.-P., CHIANG, W. H., CORDES, C., FANG, S. Z. (1996): Altlastenhandbuch des Landes Niedersachsen, Materialienband Berechnungsverfahren und Modelle. – herausgegeben vom Niedersächsischen Landesamt für Ökologie (NLÖ), Hildesheim und dem Niedersächsischen Landesamt für Bodenforschung (NLfB), Hannover, 216 S., 163 Abb., 11 Tab., mit CD-ROM; Berlin.
- KUNKEL, R. & WENDLAND, F. (1999): Das Weg-/Zeitverhalten des grundwasserbürtigen Abflusses im Elbeeinzugsgebiet. – Schriften Forschungszentrum Jülich, Reihe Umwelt/Environment **19**, 122 S., 11 Abb., 14 Kart., 4 Tab.; Jülich.
- MANHENKE, V., REUTTER, E., HÜBSCHMANN, M., LIMBERG, A., LÜCKSTÄDT, M., NOMMENSEN, B., PETERS, A., SCHLIMM, W., TAUGS, R. & VOIGT, H.-J. (2001): Hydrostratigrafische Gliederung des nord- und miteldeutschen känozoischen Lockergesteinsgebietes. – Z. angew. Geol. **47/3+4**, 2001: 146–152.
- MEYER, L. (1996): Generelle Sensitivitätsanalyse der Grundwasserströmung eines pleistozänen Rinnensystems. – Mitt. Inst. Wasserwirtschaft Uni Hannover **82**: 185–330, 48 Abb., 7 Tab., 12 Anl.; Hannover.
- REUTTER, E. (2000): Bedeutung hydrogeologischer Flächen- und Raumdaten der Landesaufnahme für die Wasserwirtschaft. – Arb.-H. Wasser 2000/**1**: 49–57, 5 Abb., 3 Tab.; Hannover (NLfB).
- REUTTER, E. (2005): Hydrostratigrafische Gliederung Niedersachsens. – Geofakten **21**: 10 S., 5 Abb., 2 Tab.; Hannover (NLfB).
- SARA, M. N. (1993): Standard Handbook for Solid and Hazardous Waste Facility Assessments. – 915 S., 498 Abb., 84 Tab.; Boca Raton (Lewiss).

---

## Impressum:

Die Geofakten werden vom Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG) herausgegeben und erscheinen unregelmäßig bei Bedarf. Der Bezug beim LBEG ist kostenlos.

Die bisher erschienenen Geofakten können unter <http://www.lbeg.niedersachsen.de> abgerufen werden.

© LBEG Hannover 2009

Nachdruck nur gegen Belegexemplar an:

Redaktion Geofakten  
Landesamt für Bergbau,  
Energie und Geologie  
Postfach 510153, 30631 Hannover  
Tel.: 0511/ 643 3588

Version: 30.04.2009

Die erste Auflage dieses Textes ist 2000 im damaligen Niedersächsischen Landesamt für Bodenforschung erschienen, die zweite Auflage im März 2007 im LBEG.

## Autoren

- M. Neuß (ehemals LBEG)
- Dr. G. Dörhöfer (ehemals LBEG)

Landesamt für Bergbau,  
Energie und Geologie  
Stilleweg 2, 30655 Hannover  
Internet: <http://www.lbeg.niedersachsen.de>