

Digital - numerische und analoge Modellierung von Grundwasserströmungen

Diplomarbeit im Studiengang Mathematik
an der Universität Bremen

vorgelegt von:
Rainer Sieger

Bremen, den 24.11.1989

Vorwort zur PDF Version der Diplomarbeit

Eine Sendung im ZDF zum Jahrestag des Mauerfalls im Oktober 1989, brachte mich auf den Gedanken, mal wieder meine Diplomarbeit hervorzuholen. Diese schloss ich vor nunmehr 15 Jahren in diesen für Deutschland spannenden Tagen ab (siehe auch Seite 74) um sie am 24.11.1989 einzureichen.

Entstanden war diese Arbeit auf Anregung von Prof. Rüdiger Schäfer im Fachbereich Mathematik an der Universität Bremen. Geschrieben wurde sie mit dem Programm Signum!2 auf einem Atari ST mit externer 20 MB Festplatte. Der Ausdruck erfolgt auf einem Nec P6.

Die vorliegende Diplomarbeit wurde in einer Auflage von sieben Stück erstellt und ist daher bisher nicht öffentlich zugänglich gewesen. Neuste Scanner-Technik macht es heute möglich, aus dem (zerlegten) Original ein PDF zu erstellen und dieses über das Internet verfügbar zu machen.

Die abgedruckten Source-Codes der Programme existieren zwar noch auf Disketten, diese sind jedoch im Atari Format formatiert und in Ermangelung eines Rechners nicht mehr lesbar.

Schiffdorf, den 24.11.2004

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	1
Einleitung	4
1. Einführung in die Modellierung von Grundwasserströmungen in einem porösen Medium	
1.1 Hydrogeologische Grundlagen und Gesetze	6
1.1.1 Gesteine und Wasser	6
1.1.2 Porosität von Gesteinen	6
1.1.3 Grundwasserleiter und Grundwasserhemmer	7
1.1.4 Das Darcy'sche Gesetz	8
1.1.5 Darcy - Geschwindigkeit	10
1.1.6 Transmissivität	11
1.1.7 Speicherfähigkeit	12
1.2 Herleitung der Strömungsgleichung	14
1.2.1 Darcy - Geschwindigkeit in verschiedenartigen Grundwasserleitern	14
1.2.2 Massenbilanz	14
1.2.3 Zu - und Abflüsse	16
1.2.3.1 Äußere Zu - und Abflüsse	16
1.2.3.2 Innere Zu - und Abflüsse	17
1.2.4 Einige für die Hydrogeologie wichtige Sonderfälle der Strömungsgleichung	17
Literaturangabe zum Kapitel 1	20
2. Differenzenverfahren zur numerischen Behandlung von Grundwasserströmen in gesättigten Grundwasserleitern	
Einleitung	21
2.1 Bildung finiter Differenzenapproximationen einer Funktion f	21
- Satz von Taylor	21
- Vorwärts- und Rückwärts-Differenzenapproximation	22
- Fehlerordnung	22
- Zentrale Differenzen	22
2.2 Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung über einem Gebiet G im \mathbb{R}^2	22
- Diskretisierungsgitter, Notation	23
- Differenzenapproximation einer Poisson-Gleichung	23
- Gleichung für inneren Gitterpunkt (Fünf-Punkt-Stern)	24

- Randbedingungen von partiellen Differentialgleichungen	24
- Beispiel (Poisson-Gleichung unter Dirichletschen Randbedingungen)	25
2.3 Dirichlet'sche und Neumann'sche Randbedingungen in der Hydrogeologie	25
- Dirichlet'sche Randbedingungen	25
- Neumann'sche Randbedingungen	25
- Anpassung des Diskretisierungsgitters an den Randverlauf	26
2.4.1 Diskretisierung der Strömungsgleichung für stationäre Situationen unter Dirichlet-Randbedingungen	26
- für den isotropen Sonderfall	27
2.4.2 Diskretisierung der Strömungsgleichung für stationäre Situationen unter Neumann-Randbedingungen	27
2.4.2.1 Modellierung eines undurchlässigen Randes	27
- Beispiel	28
2.4.2.2 Modellierung eines durchlässigen Randes	29
2.5 Diskretisierung der Strömungsgleichung für anisotrope und inhomogene Grundwasserleiter in stationären Situationen	29
2.6 Berechnung der Transmissivitäten T_J und T_I	31
Literaturangabe zum Kapitel 2	35
3. Numerische Verfahren zur Lösung von speziellen linearen Gleichungssystemen	
Einleitung	36
3.1 Gewinnung einer allgemeinen Iterationsvorschrift	36
3.2 Das Jacobi-Verfahren (Gesamtschritt-Verfahren)	38
3.3 Das Gauß-Seidel-Verfahren (Einzelschritt-Verfahren)	40
3.4 Das SOR-Verfahren	42
3.5 Wahl des optimalen Relaxationsparameters	43
3.6 Lösung der Strömungsgleichung mit dem SOR-Verfahren	46
3.6.1 Beweis der Konvergenz des SOR-Verfahrens für spezielle LGS	46
3.6.2 Modifizierter Gauß-Seidel-Algorithmus	49
- Gauß-Seidel-Algorithmus nach Kinzelbach	52
3.7 Wahl eines für das SOR-Verfahren optimalen Relaxationsparameters ω_{opt} für die durch Diskretisierung der Strömungsgleichung entstehenden linearen Gleichungssysteme	52

3.7.1 Bestimmung durch Versuch (Methode 1)	53
3.7.2 Bestimmung von ω_{opt} mit Satz von Young (3.39) (Methode 2)	55
3.7.3 Methode von Carré	56
3.7.4 Abschätzung von ω_b nach Moler	58
3.7.5 Beispiele zu den einzelnen Verfahren	58
Literaturangabe zum Kapitel 3	61
4. Ein einfaches Analogmodell für die Behandlung stationärer Grundwasserströme In gesättigten Grundwasserleitern	62
4.1 Äquivalenz von Widerstandsnetzen und Differenzgleichungen der Diskretisierung für stationäre Situationen	62
4.2 Skalierung des analogen Modells	63
4.3 Behandlung unterschiedlicher Randbedingungen im analogen Modell	64
4.4 Ein Beispiel	66
4.4.1 Das Anwendungsbeispiel	66
4.4.2 Modellierung des Anwendungsbeispiels	66
4.4.3 Versuchsergebnisse	68
Literaturangabe zum Kapitel 4	71
Anhang 1 – Modellierung und Simulation von Grundwasserströmen auf einem Gebiet	72
1. Beispiel	72
2. Beispiel	77
Literaturangabe zum Anhang 1	81
Anhang 2 – Ein analoges Modell im praktischen Versuch	82
Versuchsmaterial	82
Versuchsaufbau	82
Schaltplan	83
Versuchsdurchführung	85
Versuchsergebnisse	85
Literaturangabe zum Anhang 2	85
Anhang 3 – Der "Young - Test"	87
Algorithmus	87
Literaturangabe zum Anhang 3	91
Anhang 4 – Anleitung zum Programm GWF (Grundwasserfluß)	92
Anleitung	92
Literaturangabe zum Anhang 4	97

Korrekturen zur vorliegenden Diplomarbeit

Kapitel 1, S.19

$$(1.19) \quad m_{Ex} = \rho(x,y,z) \cdot v_x(x,y,z) \cdot \Delta y \Delta z \cdot \Delta t \quad [\text{kg}]$$

Kapitel 2, S.29 unten

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x(y,x) \cdot \frac{\partial h(y,x)}{\partial x} \right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y(y,x) \cdot \frac{\partial h(y,x)}{\partial y} \right)$$

Kapitel 3, S.37, Algorithmus (3.4)

8) $x^{(k)}$ ist eine Näherung von x^* .

Kapitel 3, S.40 unten

$$(3.17) \quad \begin{aligned} x &= (I - (D + E)^{-1} A) x + (D + E)^{-1} b \\ \Leftrightarrow x &= (I - L)^{-1} U x + (D + E)^{-1} b \\ \Leftrightarrow (I - L) x &= U x + (I - L)(D + E)^{-1} b \\ \Leftrightarrow x - Lx &= U x + D^{-1} b \\ \Leftrightarrow x &= Lx + U x + D^{-1} b \end{aligned}$$

Kapitel 3, S.41 unten

Ist die Iterationsmatrix J des Jacobi-Verfahrens nichtnegativ $J \geq 0$, so gilt außerdem der Satz von Stein und Rosenberg ([1], S.247). Dabei ist die Jacobi-Iterationsmatrix J insbesondere dann nichtnegativ, wenn die Koeffizientenmatrix A des LGS positive Diagonalelemente und nichtpositive Nichtdiagonalelemente besitzt: $a_{i,i} > 0$, $a_{i,k} \leq 0$ für $i \neq k$ ([1], S.247). Eine Matrix mit diesen Eigenschaften bezeichnet man auch als L-Matrix ([4], S.42).

Kapitel 3, S.43 unten

Satz ([4], S.125)

(3.31) Sei die Matrix A eine L-Matrix. Konvergiert das Jacobi-Verfahren (d.h. $S(J) < 1$) und ist $0 < \omega_1 \leq \omega_2 \leq 1$, dann gilt

$$S(H(\omega_2)) \leq S(H(\omega_1)) < 1.$$

Bemerkung: ([4], S.126)

Ist A eine L-Matrix und konvergiert das Jacobi-Verfahren, dann ist die Funktion $S(H(\omega))$ für $0 \leq \omega \leq 1$ monoton fallend. Unter der Annahme, daß die von ω abhängige Funktion $S(H(\omega))$ stetig ist, kann man erwarten, daß $S(H(\omega)) < 1$ für $0 < \omega \leq \bar{\omega}$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$. Die Bedingung $\bar{\omega} < 2$ wird durch die Aussage des Satzes (3.28) geliefert.

Kapitel 3, S.44 oben

Folgerung

(3.32) Sei die Koeffizientenmatrix A des linearen Gleichungssystems irreduzibel und das schwache Zeilensummenkriterium erfüllt (d.h., das Jacobi-Verfahren sei konvergent). Weiter sei A eine L-Matrix (damit ist die Iterationsmatrix J des Jacobi-Verfahrens insbesondere nichtnegativ). Wendet man unter diesen Voraussetzungen

den Satz (3.21) Absatz 2 an, dann ergibt sich mit der Bemerkung zum Satz (3.31):
Das SOR-Verfahren ist konvergent für alle $\omega \in (0, \bar{\omega}]$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$.

Kapitel 3, S. 46 unten und S. 47 oben

Satz

(3.42) Für alle durch Diskretisierung der Strömungsgleichung auf einem Gebiet G entstehenden linearen Gleichungssysteme konvergiert das SOR-Verfahren für $\omega \in (0, \bar{\omega}]$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$, wenn mindestens in einem Randpunkt von G der Wert der Lösungsfunktion h bekannt ist.

Beweis

Zu zeigen ist:

1. Das schwache Zeilensummenkriterium (3.14) ist für die Koeffizientenmatrix A des LGS immer erfüllt.
2. A ist irreduzibel (3.15b).
3. A ist eine L-Matrix.

Können die Punkte 1 und 2 gezeigt werden, so ist für dieses LGS das Jacobi-Verfahren nach (3.14) konvergent. Ist die Koeffizientenmatrix A zusätzlich eine L-Matrix, so existiert nach (3.32) ein Intervall $(0, \bar{\omega}]$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$ für dessen Elemente ω das SOR-Verfahren konvergiert, d.h. $S(H(\omega)) < 1$.

Kapitel 3, S. 48 unten und S. 49 oben

Zu 3) Die Koeffizientenmatrix A ist eine L-Matrix, wenn sie positive Diagonalelemente und nichtpositive Nichtdiagonalelemente besitzt, d.h.

$$a_{l,l} > 0 \quad \text{für } l = 1, 2, \dots, n$$

und

$$a_{l,m} \leq 0 \quad \text{für } l \neq m$$

Diese Bedingung ist für alle Punkte, deren w -Werte zu berechnen sind, durch die Gleichung (2.33) erfüllt. Wird A nach der Betrachtung in 2) nur für solche Punkte gebildet, so ist die Koeffizientenmatrix A eine L-Matrix. \square

Kapitel 3, S. 49, Algorithmus (3.44)

8) $w^{(k)}$ ist eine Näherung von w^* .

Kapitel 3, S. 54, Algorithmus (3.54)

11) $\lambda^{(k)}$ ist eine Näherung von $S(T)$.

Anhang 2, S. 82

2 regelbare, stabilisierte Netzgeräte 27 V/ 0.5 A

(Eigenbau aus stabilisierten Netzblock, Labor-Netzregelkarte Hötronik-Nr.25/3, 10-Gang-Präzisionspotentiometer)

1 Digitalvoltmeter (Votcraft "GS 6520 Multimeter", Fehlertoleranz: $\pm 0,5\% + 1$ Digit vom Meßwert)

1 Digitalvoltmeter (Monacor "DMT-5500", $R_i = 10 \text{ M}\Omega$, Fehlertoleranz: $\pm 0,05\% + 2$ Digit vom Meßwert)

2 Digitalvoltmeter (BBC "MA 5D", Fehlertoleranz: $\pm 0,05\% + 1$ Digit vom Meßwert)

Einleitung

Die Wissenschaft von der Hydrologie wäre relativ einfach, wenn das Wasser nicht in der Lage wäre, die Erdoberfläche zu durchdringen.

Harold E. Thomas

(aus: Ralph C. Heath "Einführung in die Grundwasser-Hydrologie")

Die Versorgung der Bevölkerung mit Trink- und Brauchwasser ist ein Problem zu dessen Lösung heute auf den Einsatz mathematischer Modelle, d.h. auf den Einsatz von Modellierungen der natürlichen Gegebenheiten mit Hilfe mathematischer Gleichungen nicht mehr verzichtet werden kann.

Die Wasserversorgung aus Grundwasservorkommen erfordert neben der Kenntnis der Bodenstrukturen und den natürlichen Zu- und Abflußmengen auch die Simulation der Verhältnisse im Boden, die unter dem Einfluß künstlicher Maßnahmen entstehen würden. So ist z.B. die Berechnung von Grundwasserabsenkungen im Bereich von Entnahmehäusern ein wichtiges Werkzeug, um schon bei der Wahl eines neuen Brunnenstandortes später mögliche Umwelt- und Bausubstanzschäden zu minimieren bzw. zu verhindern.

Weitere Einsatzschwerpunkte der von der Hydrogeologie (der Lehre vom Verhalten des Wassers und der mit ihm in Verbindung stehenden Stoffe im Boden) gelieferten Modelle sind die Sanierung von Altlasten und die Abwasserentsorgung. Diese in den weiten Bereich des Grundwasserschutzes fallenden Themen werden in Zukunft verstärkt Beachtung finden müssen, wenn eine Trinkwasserversorgung auch für die nächsten Generationen gewährleistet werden soll.

Aufgabe dieser Arbeit war es, ausgehend von den Modellen von Kinzelbach [2] und Rushton/Redshaw [3] digital-numerische Verfahren zur Berechnung von Grundwasserströmungen zu realisieren und in stationären Situationen an einem Analog-Modell zu eichen.

Im ersten Kapitel wird zunächst eine kurze Einführung in die Modellierung von Grundwasserströmungen in einem porösen Medium gegeben. Am Ende dieses Kapitels steht dann die sogenannte "Strömungsgleichung" zur Verfügung. Diese Gleichung ist eine partielle Differentialgleichung (PDG) und ist bei einer Simulation von Grundwasserbewegungen unter verschiedenen Randbedingungen zu lösen.

Die Lösung dieser PDG kann man in der Regel für die in der Praxis interessanten Fälle nicht geschlossen angeben, sondern nur numerisch mit einem endlichen Fehler berechnen. Die für die Lösung von partiellen Differentialgleichungen relativ einfachen Differenzenverfahren werden im 2. Kapitel eingeführt und auf die Strömungsgleichung angewendet.

Bei der Anwendung von Differenzenverfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen entstehen in der Praxis mitunter sehr große lineare Gleichungssysteme (LGS). Im 3. Kapitel werden daher iterative Verfahren zur Lösung dieser Gleichungssysteme vorgestellt und auf

die durch Diskretisierung der Strömungsgleichung entstehenden LGS angewendet. Unter den iterativen Verfahren beschäftige ich mich ausführlich mit dem SOR-Verfahren sowie der Wahl eines optimalen Relaxationsparameters, für den die Anzahl der Iterationen des SOR-Verfahrens minimal wird.

Im 4. Kapitel wird abschließend ein analoges Modell nach Rushton/Redshaw vorgestellt, mit dem die Grundwasserpotentiale in einer stationären Situation bestimmt werden können. Dabei wird versucht, die Ergebnisse des mathematisch-numerischen und eines modifizierten analogen Modells aufeinander zu eichen.

Begleitend zur theoretischen Arbeit habe ich ausgehend von den Algorithmen von W. Kinzelbach ein Programmsystem entwickelt, das die Simulation von Grundwasserströmungen in einem Gebiet ermöglicht. Der vollständige Quellcode des Programms und das auf einem ATARI 1040 ST ablauffähige Programm liegen dieser Arbeit auf einer Diskette bei. Das in Kapitel 4 beschriebene analoge Modell ist von mir aufgebaut und erprobt worden.

1. Einführung in die Modellierung von Grundwasserströmungen in einem porösen Medium

Bevor eine Beschäftigung mit den mathematischen bzw. analogen Modellen zur Lösung von Grundwasserproblemen möglich ist, müssen zunächst einige Begriffe aus der Hydrogeologie erklärt und hergeleitet werden.

1.1 Hydrogeologische Grundlagen und Gesetze

1.1.1 Gesteine und Wasser

Gesteine, in denen Wasser gespeichert bzw. sich Wasser bewegen kann, setzen sich aus fester Materie und Hohlräumen zusammen. Der Begriff "Gestein" wird hier als Oberbegriff für jegliche Form von Erdreich, wie etwa Sand, Humus, Geröll, Lehm usw., benutzt.

Grundsätzlich unterscheidet man zwei Arten von Gesteinen :

- poröse Lockergesteine
- Festgesteine

Die porösen Lockergesteine können dabei als eine Ansammlung einzelner Gesteinskörper aufgefaßt werden, zwischen denen luft- und flüssigkeitsgefüllte Hohlräume auftreten. Die Größe der Gesteinskörper beträgt je nach Art der Ablagerung wenige Mikrometer (Ton < 2 µm) bis zu einigen Zentimetern (Gerölle > 6 cm) ([1], S.19f). Zu der Gruppe der porösen Lockergesteine gehören vor allem die Tone, Schluffe, Sande und Kiese. Das Grundwasser bewegt sich bei diesen Gesteinen innerhalb der entstandenen Hohlräume oder Poren zwischen den Gesteinskörpern. In Festgesteinen bewegt sich das Grundwasser dagegen in Klüften und Spalten.

In dieser Arbeit beschränke ich mich auf die Behandlung von Grundwasserströmungen in porösen Lockergesteinen.

1.1.2 Porosität von Gesteinen

Der Anteil von Hohlräumen am Gesamtvolumen eines Gesteins wird als Hohlraumanteil oder Porosität bezeichnet. Für den dimensionslosen Porositätsfaktor n gilt die Beziehung ([4], S.19):

$$(1.1) \quad n = \frac{(V_g - V_f)}{V_g} = \frac{V_h}{V_g}$$

mit n Porositätsfaktor $0 \leq n < 1$

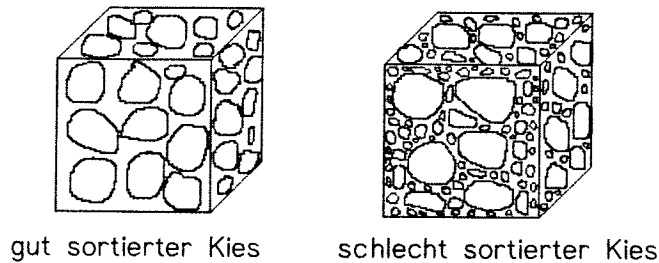
V_g Gesamtvolumen der Gesteinsprobe [m^3]

V_f Volumen der festen Bestandteile [m^3]

V_h Volumen der Hohlräume [m^3]

Die Porosität von Lockergesteinen hängt von der Korngrößenverteilung (Sortierung) und der Form der Gesteinskörper ab. Je besser dabei die Gesteinskörper sortiert sind, um so größer ist die Porosität des Gesteins ([1], S.92).

(Abb. 1.1)



Nur ein Teil der Hohlräume stehen für die Grundwasserbewegung zur Verfügung. Dieser Teil, der nach Abzug des Volumens an adhäsiv (Haftwasser) und kapillar gebundenem Wasser verbleibt, wird als effektiver, nutzbarer oder durchflußwirksamer Hohlraumanteil n_e bezeichnet ([1], S. 92). Die nutzbare Porosität ist zum Teil erheblich kleiner als die Gesamtporosität. Bei Tonen z.B. beträgt die nutzbare Porosität weniger als 0,05, obwohl die Gesamtporosität bei 0,55 liegt ([1], S. 93). Je gröber das Gestein ist, desto kleiner ist der Unterschied zwischen Gesamtporosität und effektiver Porosität.

Vom nutzbaren Hohlraumanteil ist wiederum nur ein Teil speichernutzbar. Der speichernutzbare Hohlraumanteil n_{sp} ist dabei der Teil, bei dem nur die bei Änderung der Grundwasserdruckspiegelhöhe entleerbaren oder auffüllbaren Hohlräume berücksichtigt sind ([1], S. 92).

1.1.3 Grundwasserleiter und Grundwasserhemmer

Bei der Betrachtung von Grundwasservorkommen beschäftige ich mich in dieser Arbeit nur mit Gesteinsschichten die als :

- Porengrundwasserleiter (kurz Grundwasserleiter oder GW-Leiter) und
- Grundwasserhemmer

bezeichnet werden.

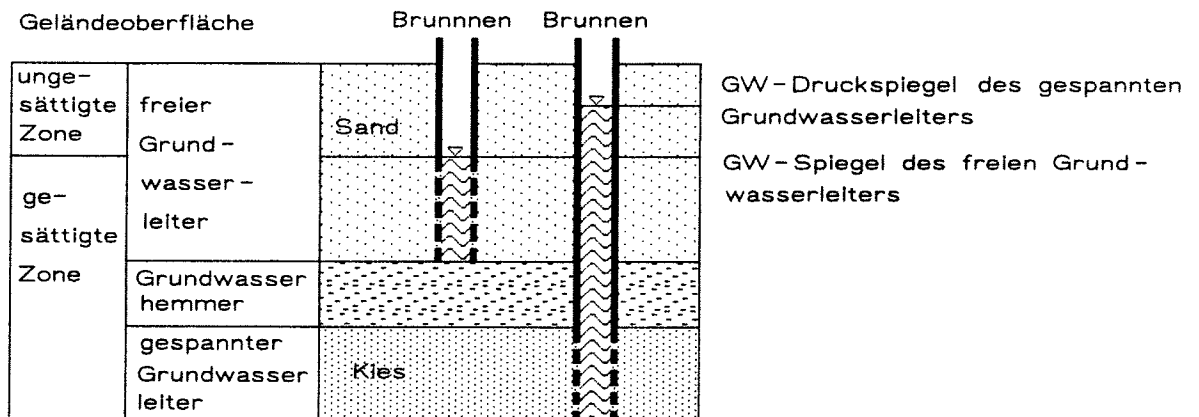
Ein Porengrundwasserleiter ist eine Gesteinsschicht aus porösen Lockergestein, in der Wasser fließen bzw. die Wasser in nennenswerten Mengen für Brunnen und Quellen liefern kann. Ein Grundwasserhemmer ist dagegen eine Schicht, die nur eine sehr geringe Wasserwegsamkeit besitzt und eine Grenze für die Bewegungen des Grundwasser bildet ([4], S. 17).

Darüberhinaus können drei Typen von Grundwasserleitern unterschieden werden:

- die ungespannten oder freien Grundwasserleiter
- die gespannten Grundwasserleiter und
- die halbgespannten Grundwasserleiter .

Dabei versteht man unter einem GW-Leiter mit freier Oberfläche eine Gesteinsschicht, deren Hohlräume nur zum Teil mit Wasser ausgefüllt sind. Die Oberfläche der gesättigten Zone (d.h. der Zone, in der alle Hohlräume mit Wasser gefüllt sind) kann ohne Beschränkung durch überlagerte Grundwasserhemmer steigen und fallen. Sind die Hohlräume des Grundwasserleiters vollständig gefüllt (d.h., der Leiter ist vollständig gesättigt) und wird dieser von einem Grundwasserhemmer nach oben abgeschlossen, so nennt man dieses Wasser gespannt bzw. bezeichnet den Grundwasserleiter als gespannt (siehe (Abb. 1.2)) ([4], S. 18). Bei halbgespannten Grundwasserleitern besitzt der Grundwasserhemmer noch eine nicht vernachlässigbare Wasserdurchlässigkeit.

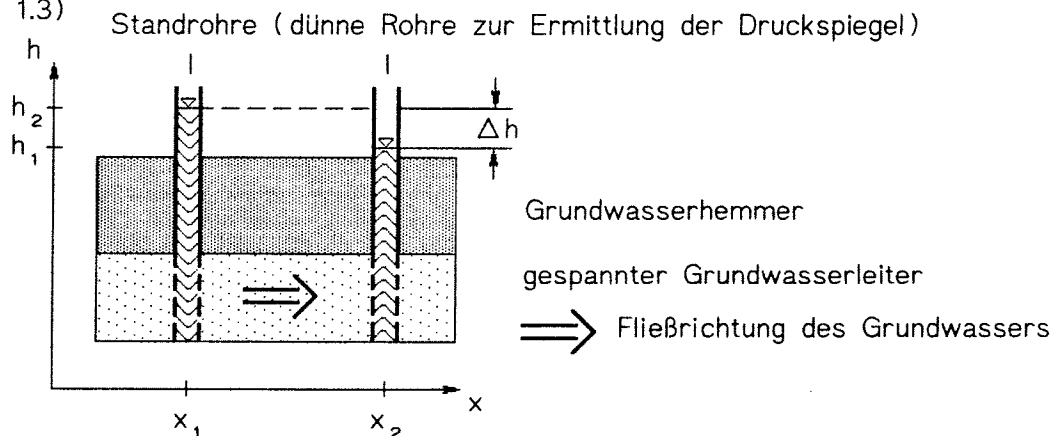
(Abb.1.2)



1.1.4 Das Darcy'sche Gesetz

Das Grundwasser in einem Grundwasserleiter bewegt sich immer von Orten mit höherem Grundwasser-Druckspiegel (d.h. höherer potentieller Energie) zu Orten mit niedrigerem Grundwasser-Druckspiegel (d.h. niedrigerer potentieller Energie). Während des Fließvorgangs erleidet das Wasser in Folge von Reibung an den Porenwänden des Gesteins einen Energieverlust. Bei gleichbleibendem Porenraum und unveränderter Dichte und Viskosität des Wassers gelten lineare Beziehungen zwischen der Fließgeschwindigkeit und dem Energieverlust durch Reibung je Wegeinheit ([1], S.99 f). Diese Proportionalität wurde erstmals von Henry Darcy (1803 - 1858) 1856 beschrieben ([1], S.100). Zur Verdeutlichung der nach ihm benannte Darcy-Gleichung betrachte man zunächst die (Abb. 1.3).

(Abb 1.3)



Aus der (Abb. 1.3) folgt eine Form des Gesetzes von Darcy

$$(1.2) \quad Q = -k_f \cdot A \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \quad [\text{m}^3/\text{s}]$$

mit k_f Durchlässigkeitsbeiwert [m / s]
 A Querschnittsfläche des betrachteten Grundwasserleiters senkrecht zur Strömungsrichtung [m²]

$\Delta h = (h_2 - h_1) = (h(x_2) - h(x_1))$ Differenz der Standrohrspiegel [m]

$\Delta l = \Delta x = (x_2 - x_1)$ Abstand der Standrohre [m]

Q durch den Querschnitt A bewegtes Wasservolumen pro Zeiteinheit [$\frac{m^3}{s}$]

Bemerkung:

Da in der skizzierten Situation (Abb. 1.3) der Quotient $\Delta h/\Delta l$ kleiner Null ist, das durch den Querschnitt A bewegte Wasservolumen pro Zeiteinheit jedoch größer Null sein soll, wurde in der Gleichung (1.2) ein negatives Vorzeichen eingeführt.

Die Proportionalitätskonstante in dieser Gleichung ist der sogenannte Durchlässigkeitsbeiwert k_f . Er hängt sowohl von der spezifischen Durchlässigkeit (Permeabilität) des durchflossenen Gesteins als auch von den spezifischen Eigenschaften der Flüssigkeit (Dichte, Viskosität) ab.

Der empirisch ermittelte Zusammenhang zwischen dem Durchlässigkeitsbeiwert k_f und den stoffspezifischen Eigenschaften ist ([1], S. 104)

$$(1.3) \quad k_f = \frac{K \cdot g \cdot \rho}{\eta} \quad \left[\frac{m}{s} \right]$$

mit K spezifische Durchlässigkeit des Gesteins [m^2]

η dynamische Viskosität (Zähigkeit) der Flüssigkeit [Ns/m^2]

ρ Dichte der Flüssigkeit [kg/m^3]

g Erdbeschleunigung [m/s^2]

Bemerkung:

Als Dimension für die spezifische Durchlässigkeit wurde 1934 von Wyckoff die Einheit Darcy (D) eingeführt (1 Darcy gleich $1 \cdot 10^{-8} cm^2$) ([1], S. 104).

Der Durchlässigkeitsbeiwert umfaßt einen Bereich von 12 Zehnerpotenzen ([4], S. 29). Darüberhinaus ist der Durchlässigkeitsbeiwert auch in gleichartigem Gestein von Ort zu Ort großen Schwankungen unterworfen. Bleibt er innerhalb eines Gesteins im wesentlichen gleich, so spricht man von einem homogenen Grundwasserleiter ([4], S. 29f). Der Durchlässigkeitsbeiwert kann sich darüberhinaus auch richtungsabhängig verändern. Ist er in alle Richtungen im wesentlichen gleich, so handelt es sich um einen isotropen Grundwasserleiter. Im anderen Fall spricht man von einem anisotropen Grundwasserleiter. Bedingt durch mögliche Inhomogenitäten und Anisotropien ist die Bestimmung des Durchlässigkeitsbeiwertes für ein größeres Gebiet nicht einfach und erfordert umfangreiche Pumpversuche im Gelände.

Das Gesetz von Darcy gilt nur für den Fall der laminaren (wirbelfreien) Strömung. Für den Grundwasserfluß in porösen Lockergesteinen liegt dieser Fall vor, wenn die dimensionslose Reynoldssche Zahl im Intervall [1,10] liegt. Die dimensionslose Reynoldssche Zahl Re wird wie folgt bestimmt ([1], S. 107):

$$(1.4) \quad Re = \frac{d \cdot \tilde{v} \cdot \rho}{\eta}$$

mit d Rohrdurchmesser [m]
 \tilde{v} Geschwindigkeit der Flüssigkeit im Rohr [m/s]
 ρ Dichte der Flüssigkeit [kg/m³]
 η dynamische Viskosität der Flüssigkeit [Ns/m²]

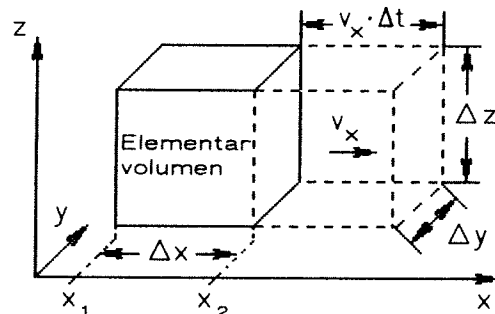
Bemerkung:

In der Hydrogeologie repräsentiert der durchschnittliche Durchmesser der Porenkanäle zwischen den Gesteinskörnern (siehe auch Abb. 1.1) den in der Gleichung verwendeten Rohrdurchmesser. Die Bestimmung des durchschnittlichen Porendurchmessers ist in der Praxis nicht problemlos ([1], S.107).

1.1.5 Darcy - Geschwindigkeit

Betrachtet man ein wie in (Abb. 1.4) dargestelltes rechteckiges Rohr mit der Querschnittsfläche $A = \Delta y \Delta z$, so fließt bei einer gegebenen Geschwindigkeit v_x in der Zeit Δt eine bestimmte Menge Wasser V_w in x-Richtung aus, wenn die Standrohrspiegelhöhe h an der Stelle x_1 den Wert h_1 und an der Stelle x_2 den Wert h_2 hat und $h_2 < h_1$ ist.

(Abb. 1.4)



Aus der (Abb. 1.4) folgt die Beziehung

$$(1.5) \quad V_w = v_x \cdot \Delta t \cdot A \quad [\text{m}^3] \quad \Leftrightarrow \quad v_x = \frac{V_w}{\Delta t \cdot A} \quad \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$$

Setzt man nun $Q = V_w / \Delta t$ (Q =bewegtes Wasservolumen pro Zeiteinheit), so folgt für die Geschwindigkeit in x-Richtung

$$(1.6) \quad v_x = \frac{Q}{A} \quad \left[\frac{\frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{\text{m}^2} \right] = \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$$

Mit Q aus (1.2) ergibt sich nun die sogenannte "Darcy-Geschwindigkeit" in x-Richtung

$$(1.7) \quad v_x = -k_f \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} \quad \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$$

Bemerkung:

Die Darcy-Geschwindigkeit ist die Filtergeschwindigkeit des Grundwassers durch einen gegebenen Querschnitt A eines porösen Mediums senkrecht zur Strömungsrichtung und nicht die tatsächliche Geschwindigkeit zwischen den Gesteinskörnern, die in die Reynoldsche Zahl eingeht.

Wird der Grenzübergang $\Delta x \rightarrow 0$ durchgeführt, so ergibt sich in einem homogenen und isotropen GW-Leiter für die Geschwindigkeitskomponente v_x

$$(1.8) \quad v_x = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} v_x = -k_f \cdot \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta h}{\Delta l} = -k_f \cdot \frac{\partial h}{\partial x}$$

Für die Geschwindigkeiten v_y und v_z werden die Betrachtungen (1.5)–(1.8) analog durchgeführt. Als Ergebnis erhält man für einen homogenen und isotropen Grundwasserleiter:

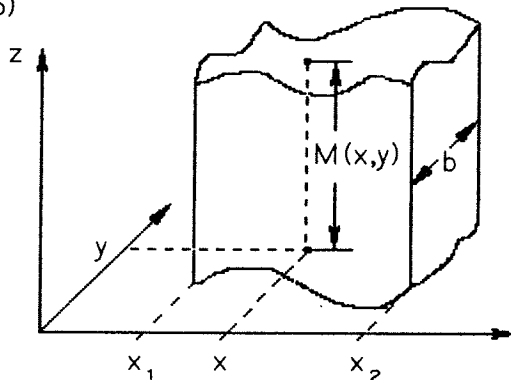
$$(1.9a) \quad v_x = -k_f \cdot \frac{\partial h}{\partial x}; \quad v_y = -k_f \cdot \frac{\partial h}{\partial y}; \quad v_z = -k_f \cdot \frac{\partial h}{\partial z};$$

bzw. ([1], S. 101)

$$(1.9b) \quad \vec{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = -k_f \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial x}, \frac{\partial h}{\partial y}, \frac{\partial h}{\partial z} \right)^T = -k_f \cdot \text{grad } h(x,y,z)$$

1.1.6 Transmissivität

(Abb. 1.5)



In einer wie in der nebenstehenden Abbildung (1.5) dargestellten Situation, wird ein Grundwasserleiter in x -Richtung durchströmt. Die Breite des um den Punkt (x,y) liegenden "infinitesimalen" Strömungskanals sei b [m]. Seine Länge sei $\Delta l = x_2 - x_1$ [m]. Der Abstand zwischen der Deckfläche und der Sohle des Grundwasserleiters am Punkt (x,y) wird als seine Mächtigkeit $M(x,y)$ [m] bezeichnet.

Wird im Gesetz von Darcy (1.2) die Fläche A durch $M(x,y)$ und b ausgedrückt, so ergibt sich für die Menge Wasser, die pro Zeiteinheit durch den Querschnitt $A = M(x,y) \cdot b$ strömt ([4], S. 57)

$$(1.10) \quad Q = -k_f(x,y) \cdot M(x,y) \cdot b \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \quad \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right]$$

In der Hydrogeologie wird das Produkt aus Durchlässigkeitsbeiwert k_f [m/s] und GW-Leiter-Mächtigkeit [m] als Transmissivität T [m²/s] bezeichnet ([1], S. 105).

$$(1.11) \quad T(x,y) = k_f(x,y) \cdot M(x,y) \quad \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$$

In der Regel ist der Durchlässigkeitsbeiwert über die Höhe z des Ortes veränderlich. D.h.

$$(1.12) \quad T(x,y,z) = \tilde{k}_f(x,y,z) \cdot M(x,y) \quad \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$$

Soll trotz der Abhängigkeit von \tilde{k}_f von der Höhe z des Ortes in den Berechnungen eine nur von x und y abhängige Transmissivität $T(x,y)$ verwendet werden, so bildet man die Summe über die "infinitesimal" dünnen Schichten z_i , in die die Mächtigkeit des GW-Leiters lückenlos und vollständig aufgeteilt gedacht wird. Im Grenzübergang dieser Summe ergibt sich dann die Integral-Darstellung von $T(x,y)$. Es gilt

$$(1.13) \quad T(x,y) = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \Delta z_i \rightarrow 0}} \sum_{i=1}^n \tilde{k}_f(x,y,z_i) \cdot \Delta z_i = \int_{z=0}^{M(x,y)} \tilde{k}_f(x,y,z) dz$$

Wird die in (1.13) gewonnene Transmissivität in das Gesetz von Darcy (1.2) eingesetzt, so erhält man eine von z unabhängige Darstellung der durch einen Querschnitt $M(x,y) \cdot b$ pro Zeiteinheit fließende Menge Wasser. Dabei wird durch die Anwendung der Integration die lokale Variation von $\tilde{k}_f(x,y,z)$ bezüglich der z -Richtung berücksichtigt.

$$(1.14) \quad Q(x,y) = -T(x,y) \cdot b \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \left[\frac{m^3}{s} \right]$$

Für die Darcy-Geschwindigkeit ergibt sich mit (1.7)

$$(1.15) \quad \vec{v} = -\frac{T(x,y)}{M(x,y)} \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \left[\frac{m}{s} \right]$$

1.1.7 Speicherfähigkeit

Eine wichtige hydrogeologische Eigenschaften eines Gesteins ist seine Fähigkeit, Wasser zu speichern bzw. gespeichertes Wasser abzugeben. In einem gespannten Porengrundwasserleiter wird die Fähigkeit des Bodens eine bestimmte Menge Wasser (ΔV_w) pro Volumeneinheit (V_B) und pro Einheit Standrohrspiegelhöhenabsenkung (Δh) abzugeben, als spezifischer Speicher(fähigkeits)koeffizient S_s bezeichnet. Es gilt ([5], S.147)

$$(1.16) \quad S_s(x,y,z) = \frac{\Delta V_w}{V_B \cdot \Delta h} \left[\frac{m^3}{m^3 \cdot m} \right]$$

Der spezifische Speicherkoeffizient ist in der Praxis von vier Parametern abhängig, und zwar von der

- elastischen Kompressibilität des Korngerüstes des Gesteins μ_B [m^2/N],
- der Kompressibilität des Wassers μ_w [m^2/N],
- der Porosität n des Gesteins
- und der Wichte des Wassers [$kg/m^2/s^2$] (Wichte = Dichte · Erdbeschleunigung).

Mit diesen Parametern ergibt sich für den spezifischen Speicherkoeffizienten in einem gespannten GW-Leiter die folgende Beziehung ([1], S.160):

$$(1.17) \quad S_s(x,y,z) = n(x,y,z) \cdot \rho \cdot g(z) \cdot \left(\mu_w + \frac{\mu_B(x,y,z)}{n(x,y,z)} \right) \left[\frac{m^3}{m^3 \cdot m} \right]$$

Bemerkung:

In einem gespannten Porengrundwasserleiter steht das Wasser in den vollständig gefüllten Poren unter einem von der Druckspiegelhöhe abhängenden absoluten hydrostatischen Druck. Dieser Druck komprimiert das Wasser und unterstützt das Korngerüst des Gesteins. Wird die Druckspiegelhöhe abgesenkt, so kommt das aus dem Bodenvolumen ausfließende Wasser unter der Voraussetzung, daß keine Grundwasserneubildung durch äußere Einflüsse erfolgt, im wesentlichen aus zwei Quellen:

- 1) Dem Wasser, das sich als Folge der Druckerniedrigung im Grundwasserleiter ausdehnt (abhängig von der Kompressibilität des Wassers) und
- 2) dem Wasser, das aus dem Grundwasserleiter durch Setzung und Verdichtung des Grundwasserleiters ausgetrieben wird (abhängig von der Kompressibilität des Korngerüsts des Gesteins) ([1], S. 77).

Mit Hilfe der Integration über die Mächtigkeit des Grundwasserleiters am Punkt (x,y) , läßt sich nun aus dem spezifischen Speicherkoeffizienten der dimensionslose sogenannte lokale Speicher(fähigkeits)koeffizient $S(x,y)$ für gespannte GW-Leiter berechnen ([5], S. 147):

$$(1.18) \quad S(x,y) = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \Delta z_i \rightarrow 0}} \sum_{i=1}^n \tilde{S}_s(x,y,z_i) \cdot \Delta z_i = \int_{z=0}^{M(x,y)} \tilde{S}_s(x,y,z) dz$$

Die Größe des lokalen Speicherkoeffizienten in gespannten GW-Leitern ist also neben der Kompressibilität des Wassers und der des Korngerüsts auch von der Mächtigkeit des Leiters an dieser Stelle abhängig. Da die Kompressibilität des Wassers und die des Korngerüsts sehr klein ist, bewegt sich der lokale Speicherkoeffizient größenordnungsmäßig im Bereich $S = 5,1 \cdot 10^{-5}$ bis $5,1 \cdot 10^{-3}$ ([5], S. 148).

Der spezifische Speicherkoeffizient S_y in einem ungespannten Grundwasserleiter ist definiert als Wassermenge, die der Grundwasserleiter pro Flächeneinheit und pro Standrohrspiegelabsenkung aufnehmen oder abgeben kann ([4], S. 59). Man beachte dabei, daß $S_y(x,y,z)$ dimensionslos ist. Um ebenfalls eine von der z -Richtung unabhängige Darstellung eines Speicherkoeffizienten S in ungespannten Grundwasserleitern zu erhalten, kann für $S(x,y)$ der Mittelwert von $S_y(x,y,z)$ über den Bereich gewählt werden, der durch die Höhenabsenkung der Standrohrspiegel entwässert wird.

In der Praxis ist der Speicherkoeffizient in ungespannten oder freien Grundwasserleitern meist nur von dem speichernutzbaren Hohlraumvolumen abhängig. Die Speicherkoeffizienten erreichen in freien Grundwasserleitern Größenordnungen von $S = 1,1 \cdot 10^{-1}$ bis $4,1 \cdot 10^{-1}$ ([5], S. 148).

Bemerkung:

In dem dieser Arbeit beiliegenden Programm GWF.PRГ ist zunächst nur die Modellierung von gespannten Grundwasserleitern vorgesehen. Es ist jedoch geplant, die von Kinzelbach vorgestellten Algorithmen zur Bearbeitung von gespannten und ungespannten GW-Leitern ([2], S. 76 ff) in eine spätere Version des Programms aufzunehmen.

1.2 Herleitung der Strömungsgleichung

Nachdem nun die für diese Arbeit wichtigsten Begriffe aus dem Bereich der Hydrogeologie erklärt und definiert sind, kann jetzt die Herleitung der Gleichung erfolgen, die die Modellierung der Strömung von Grundwasser im Untergrund erlaubt. Diese Gleichung wird im weiteren kurz Strömungsgleichung genannt. Ausführlich findet sich die Herleitung dieser Gleichung unter anderen bei [1], [2], [3], [6], [8], [9].

1.2.1 Darcy-Geschwindigkeit in verschiedenartigen Grundwasserleitern

Für den Spezialfall eines homogenen und isotropen Grundwasserleiters gelten wie bereits in Kapitel 1.1.5 ausgeführt, die folgenden Gleichungen zur Beschreibung der richtungsabhängigen Geschwindigkeitskomponenten ([1], S. 156)

$$(1.9a) \quad v_x = -k_f \cdot \frac{\partial h}{\partial x}; \quad v_y = -k_f \cdot \frac{\partial h}{\partial y}; \quad v_z = -k_f \cdot \frac{\partial h}{\partial z};$$

Bei homogenen und anisotropen Grundwasserleitern sind die Durchlässigkeitsbeiwerte von der Fließrichtung, nicht jedoch vom Ort abhängig. Es ergeben sich die folgenden Gleichungen:

$$(1.9b) \quad v_x = -k_{fx} \cdot \frac{\partial h}{\partial x}; \quad v_y = -k_{fy} \cdot \frac{\partial h}{\partial y}; \quad v_z = -k_{fz} \cdot \frac{\partial h}{\partial z};$$

Ist der Grundwasserleiter isotrop und inhomogen, d.h. $k_f(x,y,z) = k_{fx}(x,y,z) = k_{fy}(x,y,z) = k_{fz}(x,y,z)$, so ergeben sich die Gleichungen:

$$(1.9c) \quad v_x = -k_f(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial x}; \quad v_y = -k_f(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial y}; \quad v_z = -k_f(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial z};$$

Ist der Grundwasserleiter inhomogen und anisotrop, d.h. sind die Durchlässigkeitsbeiwerte orts- und richtungsabhängig, so folgt ([1], S. 155):

$$(1.9d) \quad v_x = -k_{fx}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial x}; \quad v_y = -k_{fy}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial y}; \quad v_z = -k_{fz}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial z};$$

1.2.2 Massenbilanz

Um eine Gleichung zu erhalten, die die Berechnung von Standrohrspiegelhöhen $h = h(x,y,z)$, d.h. der Potentiale im Grundwasserleiter erlaubt, betrachtet man zunächst für ein sogenanntes Elementarvolumen $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ (siehe auch Abb. 1.4) die Summe aller zu- und abfließenden Massen über einen Zeitraum Δt .

Bei der weiteren Bearbeitung der Massenbilanz wird zunächst nur von einer Strömung in x-Richtung ausgegangen. Die angestellten Betrachtungen können dann später analog für die beiden anderen Richtungen durchgeführt werden.

Für die zufließende Masse m_{Ex} im Beobachtungsintervall Δt ergibt sich aus der Abb. (1.4)

$$(1.19) \quad m_{Ex} = \rho(x,y,z) \cdot v_x(x,y,z) \cdot \Delta y \Delta z \cdot \Delta t \quad [\text{kg}]$$

mit ρ Dichte des Wassers $[\text{kg}/\text{m}^3]$

v_x Eintrittsgeschwindigkeit des Wassers in das Volumen in x-Richtung $[\text{m}/\text{s}]$

Δy Breite des Elementarvolumens [m]

Δz Höhe des Elementarvolumens [m]

Für die abfließende Masse m_{Ax} aus der der Eintragsseite gegenüberliegenden Seite, ergibt sich analog

$$(1.20) \quad m_{Ax} = \rho(x+\Delta x, y, z) \cdot v_x(x+\Delta x, y, z) \cdot \Delta y \Delta z \cdot \Delta t \quad [\text{kg}]$$

Der Massenaustausch Δm_x durch Strömung in x-Richtung während des Beobachtungsintervalls Δt am Volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ folgt aus der Subtraktion der Gleichungen (1.20) und (1.19). Es gilt

$$(1.21) \quad \Delta m_x = -(m_{Ax} - m_{Ex}) = -\frac{(\rho v_x)|_{x+\Delta x, y, z} - (\rho v_x)|_{x, y, z}}{\Delta x} \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta t \quad [\text{kg}]$$

Bemerkung:

Das in die Gleichung (1.21) zusätzlich eingeführte negative Vorzeichen gewährleistet, daß der Wert der Massenbilanz negativ wird, wenn die abfließende Masse die zufließende übersteigt.

Der in (1.21) beschriebene Massenaustausch wird (unter der Voraussetzung, daß dem Elementarvolumen kein Wasser durch innere oder äußere Quellen zu- bzw. abgeführt wird) während des Beobachtungsintervalls Δt kompensiert, wenn eine zeitliche Änderung der Dichte oder Porosität die gleiche Masse austauscht. Für diese Masse ergibt sich

$$(1.22) \quad \Delta m = \left[(n\rho)|_{x, y, z, t+\Delta t} - (n\rho)|_{x, y, z, t} \right] \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \quad [\text{kg}]$$

mit n Porosität des Bodens im Elementarvolumen

ρ Dichte des Wassers [kg/m^3]

Δx Länge des Elementarvolumens [m]

Δy Breite des Elementarvolumens [m]

Δz Höhe des Elementarvolumens [m]

Bemerkung:

Eine Abgabe von Wasser nach außen findet nur statt, wenn

$$(n\rho)|_{x, y, z, t+\Delta t} < (n\rho)|_{x, y, z, t} \quad \text{gilt.}$$

Soll nun die Bilanz zwischen dem Massenaustausch durch Strömung und dem Massenaustausch durch Änderung der Porosität bzw. der Dichte ausgeglichen sein, so muß gelten

$$(1.23) \quad -\frac{(\rho v_x)|_{x+\Delta x, y, z} - (\rho v_x)|_{x, y, z}}{\Delta x} \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta t \quad [\text{kg}]$$

$$= \left[(n\rho)|_{x, y, z, t+\Delta t} - (n\rho)|_{x, y, z, t} \right] \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \quad [\text{kg}]$$

bzw. da Δx , Δy , Δz und $\Delta t \neq 0$

$$(1.24) \quad - \frac{(\rho v_x)|_{x+\Delta x, y, z} - (\rho v_x)|_{x, y, z}}{\Delta x} = \frac{(n\rho)|_{x, y, z, t+\Delta t} - (n\rho)|_{x, y, z, t}}{\Delta t} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

Läßt man das Elementarvolumen auf einen Punkt im Raum zusammenschrumpfen, d.h. $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$, $\Delta z \rightarrow 0$, und betrachtet man den Massenaustausch in einem gegen Null gehenden Beobachtungsintervall Δt , so gilt im Grenzübergang

$$(1.25) \quad - \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

Werden jetzt, wie oben bereits angedeutet, die Betrachtungen (1.19) - (1.25) auch für die beiden anderen Richtungen durchgeführt, so ergibt sich

$$(1.26) \quad - \left(\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} \right) = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

bzw.

$$(1.27) \quad - \text{div}(\rho \vec{V}) = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

$$\text{mit} \quad \text{div}(\rho \vec{V}) = \left(\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} \right)$$

Das in der Praxis kaum zu vermessende Geschwindigkeitsfeld \vec{v} kann durch die Darcy-Geschwindigkeiten aus (1.9) ersetzt werden. Dadurch wird die leichter zu messende Größe $h(x,y,z)$ (Standrohrspiegelhöhe) in die entstandene Strömungsgleichung (1.27) eingeführt. Es ergibt sich mit (1.9b)

$$(1.28) \quad \text{div}(\rho \cdot k_f \cdot \text{grad } h(x,y,z)) = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

Bemerkung:

In der Gleichung (1.28) sind die Homogenitäts- und Isotropieeigenschaften des Grundwasserleiters durch entsprechende Wahl der k_f -Werte zu berücksichtigen (siehe Kapitel 1.2.1).

1.2.3 Zu- und Abflüsse

1.2.3.1 Äußere Zu- und Abflüsse

In die Gleichung (1.27) muß zur korrekten Modellierung des Grundwasserflusses noch die Grundwasserneubildung (Zufluß) durch Niederschläge und sonstige Einträge (z.B. Quellen) sowie die Grundwasserentnahme durch Brunnen einfließen. Die zu- oder abgeführte Menge Wasser Q pro Zeiteinheit wird in $[\text{kg}/\text{m}^3/\text{s}]$ gemessen. Sie entspricht damit der Masse, die pro Bodenvolumen und Zeiteinheit zu- oder abgeführt wird.

Für die Strömungsgleichung ergibt sich mit der Grundwasserneubildung Q

$$(1.29) \quad \text{div}(\rho \cdot k_f \cdot \text{grad } h(x,y,z)) + Q(x,y) = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

Bemerkung:

Eine Entnahme von Grundwasser durch einen Entnahmebrunnen wird in Gleichung (1.29) durch eine negative Grundwasserneubildung, d.h. durch negative Werte von Q modelliert. Damit kann die in der Hydrogeologie übliche Angabe von Entnahmemengen als negative Werte gewährleistet werden.

1.2.3.2 Innere Zu- und Abflüsse

Innerhalb eines gespannten Grundwasserleiters führen Umspeichervorgänge, wie in Kapitel 1.1.7 beschrieben, zu inneren Zu- und Abflüssen. Wird die durch Absenkung der Standrohrspiegelhöhe um Δh aus dem Elementarvolumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ ausfließende Menge Wasser ΔV_w mit der Dichte ρ des Wassers multipliziert, so ergibt sich die Masse Δm_s der durch Umspeicherung bewegten Wassermenge:

(Gl.(1.16))

$$(1.30) \quad \Delta m_s = \rho \cdot \Delta V_w \stackrel{\downarrow}{=} \rho \cdot S_s \cdot \Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta h \quad [\text{m}^3]$$

bzw. nach Division durch Δx , Δy , Δz und Δt

$$(1.31) \quad \frac{\Delta m_s}{\Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta t} = \rho \cdot S_s \cdot \frac{\Delta h}{\Delta t} \quad \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

Läßt man das Elementarvolumen auf einen Punkt im Raum schrumpfen und betrachtet man das System in einem gegen Null strebenden Beobachtungsintervall, so kann die Gleichung (1.29) durch die Umspeicherung befindliche Masse ergänzt werden. Man erhält so die vollständige Strömungsgleichung

$$(1.32) \quad \text{div} \left(\rho \cdot k_f \cdot \text{grad } h(x,y,z) \right) + Q(x,y) - \rho \cdot S_s(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \quad \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

Bemerkung:

Für das in der Zeit Δt zugeführte Volumen ΔV_w in Gleichung (1.32) ergibt sich

$$(1.33) \quad \lim_{t_2 \rightarrow t_1} \Delta V_w = \lim_{t_2 \rightarrow t_1} S_s \cdot \frac{h(t_2) - h(t_1)}{t_2 - t_1} = S_s \cdot \frac{\partial h}{\partial t}$$

Wenn $h(t_2) - h(t_1) < 0$ ist, ist entsprechend der Gleichung (1.33) auch das aus dem Bodenvolumen V_B ausfließende Volumen ΔV_w kleiner Null. D.h. dem Bodenvolumen wird Wasser zu- statt abgeführt. Um die Massenbilanz korrekt durchzuführen, muß daher beim Einfügen von (1.31) in (1.32) ein negatives Vorzeichen eingeführt werden.

1.2.4 Einige für die Hydrogeologie wichtige Sonderfälle der Strömungsgleichung

Die in der Gleichung (1.32) dargestellte allgemeine Form der Strömungsgleichung kann ausgeschrieben und nach Umstellung zweier Terme wie folgt dargestellt werden:

$$(1.34) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \cdot k_{fx}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \cdot k_{fy}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \cdot k_{fz}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \right) \\ = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} - Q(x,y) + \rho \cdot S_s(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}} \right]$$

Diese Gleichung gilt es nun im weiteren, unter der Annahme von zum Teil recht weitreichenden Einschränkungen zu vereinfachen.

Zunächst sei angenommen, daß die Porosität n des Grundwasserleiters und die Dichte ρ des Wassers im Beobachtungsintervall konstant bleiben. Der Term $\partial(n\rho)/\partial t$ wird dann zu Null und kann entfallen. Weiter kann die Gleichung (1.34) durch die Dichte ρ dividiert werden. Es folgt

$$(1.35) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(k_{fx}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_{fy}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{fz}(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \right) = - \frac{Q(x,y)}{\rho} + S_s(x,y,z) \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{1}{s} \right]$$

In dieser Arbeit sollen im weiteren nur gesättigte Porengrundwasserleiter bearbeitet werden. Deshalb kann die Betrachtung des Modellgebietes auf die x,y -Ebene reduziert werden, da die Strömungsgeschwindigkeit in z -Richtung in diesen Grundwasserleitern vernachlässigbar klein ist. Die ortsabhängige Mächtigkeit $M(x,y)$ des Grundwasserleiters soll jedoch weiter berücksichtigt werden. Aus diesem Grund werden die k_f -Werte durch Transmissivitäten und der spezifische Speicherkoeffizient durch den lokalen Speicherkoeffizienten ersetzt. Außerdem muß der Term Q/ρ mit der Mächtigkeit $M(x,y)$ multipliziert werden.

$$(1.36) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) = - q(x,y) + S(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{m}{s} \right]$$

mit
$$q = \frac{Q}{\rho} \cdot M \left[\frac{\frac{kg}{m^3 \cdot s} \cdot m}{\frac{kg}{m^3}} \right] = q \left[\frac{\frac{m^3}{s}}{m^2} \right] = q \left[\frac{m}{s} \right]$$

Bemerkung:

Das Volumen q ist die Menge Wasser, die durch äußere und innere Zu- oder Abflüsse pro Quadratmeter Fläche des Modellierungsgebietes in der (x,y) -Ebene und pro Zeiteinheit in die Bilanzrechnung eingeht.

Weitere Vereinfachungen dieser Gleichung lassen sich vornehmen, wenn der betrachtete Grundwasserleiter homogen bzw. isotrop ist. In homogenen Grundwasserleitern gilt $T_x(x,y) = T_x$, $T_y(x,y) = T_y$ und $S(x,y) = S$ und damit

$$(1.37) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) = - q(x,y) + S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{\frac{m^3}{s}}{m^2} \right]$$

Ist der Grundwasserleiter darüberhinaus auch isotrop, so gilt $T_x = T_y = T$. Es folgt aus (1.36)

$$(1.38a) \quad T \cdot \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = - q(x,y) + S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{\frac{m^3}{s}}{m^2} \right]$$

bzw.

$$(1.38b) \quad \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = - \frac{q(x,y)}{T} + \frac{S}{T} \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{1}{m} \right]$$

Wird jetzt angenommen, daß dem Gebiet von außen kein Wasser zu- oder abgeführt wird, so ergibt sich

$$(1.39) \quad \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = \frac{S}{T} \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{1}{m} \right]$$

In stationären Situationen ist auf dem gesamten Modellierungsgebiet der Differentialquotient $\partial h / \partial t = 0$. Aus der Gleichung (1.38) folgt dann für einen inhomogenen und isotropen Grundwasserleiter:

$$(1.40) \quad \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = - \frac{q(x,y)}{T(x,y)} \quad \left[\frac{1}{m} \right]$$

Ist der Zu- bzw. Abfluß pro Zeiteinheit und pro Fläche gleich Null, so ergibt sich schließlich die sogenannte Laplace-Gleichung

$$(1.41) \quad \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = 0 \quad \left[\frac{1}{m} \right]$$

An dieser Stelle sind nun alle für diese Arbeit wichtigen Gleichungen aus der Hydrogeologie eingeführt. Es kann daher im zweiten Kapitel mit der Darstellung der digital-numerischen Verfahren begonnen werden, die diese Gleichungen lösen können.

Literaturangabe zum Kapitel 1

- 1) Georg Mattheß / Károly Ubell
"Allgemeine Hydrologie. Grundwasserhaushalt"
1. Auflage
Gebrüder Borntraeger, Berlin, Stuttgart, 1981
- 2) Wolfgang Kinzelbach
"Groundwater Modelling. An Introduction with Sample Programs in BASIC"
1. Auflage
Elsevier, Amsterdam, 1986
- 3) K.R. Rushton / S.C. Redshaw "Seepage and Groundwater Flow. Numerical Analysis
by Analog and Digital Methods"
John Wiley & Sons, New York, 1979
- 4) Ralph C.Heath (Übersetzt von A. Rothascher und W. Veit)
"Einführung in die Grundwasserhydrologie"
R. Oldenburg Verlag, München, Wien, 1988
- 5) Bernward Hölting
"Hydrogeologie"
2. Auflage
Enke, 1984
- 6) DVWK Schriften
"Ermittlung des nutzbaren Grundwasserdargebots. 1.Teilband"
Paul Parey, 1982
- 7) Busch/Luckner
"Geohydraulik"
2. Auflage
VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1973
- 8) Raudkivi/Callander
"Analysis of Groundwater Flow"
Edward Arnold, 1976
- 9) I. Remson / G.M. Hornberger / F.J. Molz
"Numerical Methods in Subsurface Hydrology"
Wiley-Interscience, 1971
- 10) Horst Kuchling
"PHYSIK Formeln und Gesetze"
10. Auflage
Buch- und Zeit- Verlagsgesellschaft mbH, Köln, 1973
- 11) F. Heywang / H. Schmiedel / J. Süß
"Physik für technische Berufe"
22. Auflage
Handwerk und Technik GmbH

2. Differenzenverfahren zur numerischen Behandlung von Grundwasserströmen in gesättigten Grundwasserleitern

Eine analytische Lösung der im Kapitel 1 hergeleiteten partiellen Differentialgleichung (1.32) gelingt nur unter sehr einfachen, d.h. idealisierten hydrogeologischen Situationen, die z.B. bei homogenen und isotropen Grundwasserleitern mit einfachen Randverläufen und -bedingungen gegeben sind. Bei der Simulation von Grundwasserströmen in beliebigen, d.h. auch inhomogenen und anisotropen Grundwasserleitern bekommt die Anwendung von numerischen Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen auf Computeranlagen eine immer größere Bedeutung.

Um eine einfache numerische Behandlung der Strömungsgleichung zu ermöglichen, werden für die weiteren Ausführungen folgende Einschränkungen gemacht:

- 1) Der Grundwasserleiter besteht aus porösem Lockergestein (s. Kapitel 1.1.1)
- 2) Die Ausdehnung des Grundwasserleiters in horizontaler Richtung ist erheblich größer als seine Mächtigkeit.

Außerdem soll der Einfachheit halber hier nur die Strömung in der gesättigten Zone eines Grundwasserleiters betrachtet werden. Da die vertikale Geschwindigkeit des Grundwassers in gesättigten Zonen gegenüber der horizontalen vernachlässigbar klein ist, genügt die Behandlung einer partiellen Differentialgleichung (PDG) auf einem 2-dimensionalen Gebiet (z.B. Gl. (1.36)).

Die hier im folgenden behandelten numerischen Verfahren zur Lösung der Strömungsgleichung bezeichnet man als "finite Differenzenapproximations-Verfahren". Bei diesen Verfahren werden die einzelnen Ableitungen der Gleichung durch Differenzenquotienten ersetzt.

Am Anfang dieses Kapitels steht eine kurze Einführung in die Bildung finiter Differenzenapproximationen für die erste und zweite Ableitung einer Funktion f durch Anwendung der Reihenentwicklung nach Taylor. Anschließend wird auf die Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung auf einem Gebiet G eingegangen. Mit Hilfe dieser Vorbetrachtungen und der Einführung unterschiedlicher und in der Hydrogeologie üblicher Randbedingungen können dann Diskretisierungen der Strömungsgleichung für stationäre sowie für instationäre Situationen behandelt werden.

2.1 Bildung finiter Differenzenapproximationen einer Funktion f

Um die n -te Ableitung einer $(n+1)$ -mal differenzierbaren Funktion f an einer Entwicklungsstelle x zu erhalten, läßt sich die Reihenentwicklung nach Taylor anwenden.

Ausgangspunkt für die Bildung der benötigten Ableitung ist der Satz von Taylor. Dieser lautet ([1], S. 321):

Die Funktion f sei im Intervall $(x_0 - \alpha, x_0 + \alpha)$ mit $\alpha > 0$ $(n+1)$ -mal differenzierbar. Dann gilt für $x \in (x_0 - \alpha, x_0 + \alpha)$:

$$(2.1) \quad f(x) = f(x_0) + \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} \cdot (x - x_0) + \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_0} \cdot \frac{(x - x_0)^2}{2!} + \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x_0} \cdot \frac{(x - x_0)^3}{3!} + \dots$$

Wird diese Reihe nach $df(x_0)/dx$ aufgelöst, so ergibt sich für $x = x_0 + \Delta x$ mit $0 < \Delta x < \alpha$ die Vorwärts-Differenzenapproximation der ersten Ableitung der Funktion f an der Stelle x_0 :

$$(2.2) \quad \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

bzw. für $x = x_0 - \Delta x$ mit $0 < \Delta x < \alpha$ die Rückwärts-Differenzenapproximation der ersten Ableitung

$$(2.3) \quad \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

Die Fehlerterme $O(\Delta x)$ auf der jeweils rechten Seite der Gleichung bezeichnen die Ausdrücke mit ersten und höheren Potenzen von Δx , die entstehen, wenn die Taylor-Reihe nach endlich vielen Termen abgebrochen wird. Werden diese Terme vernachlässigt, so entsteht ein Fehler, der maximal in der Größenordnung von Δx liegt. Die Fehlerordnung eines Verfahrens ist durch den minimalen Exponenten n an Δx bestimmt, der in $O((\Delta x)^n)$ auftritt.

Werden die Taylor-Reihen einer Funktion f für die Nebenstellen $x = x_0 + \frac{\Delta x}{2}$ und $x = x_0 - \frac{\Delta x}{2}$ mit $0 < \frac{\Delta x}{2} < \alpha$ voneinander subtrahiert, so ergibt sich durch Auflösung nach $df(x_0)/dx$ die Zentrale-Differenzenapproximation der ersten Ableitung von f mit der Fehlerordnung $O((\Delta x)^2)$.

$$(2.4) \quad \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \frac{\Delta x}{2}) - f(x_0 - \frac{\Delta x}{2})}{\Delta x} + O((\Delta x)^2)$$

Die Ordnung dieser Differenzenapproximation ist gegenüber der Vorwärts- bzw. der Rückwärts-Differenzenapproximation um eine Ordnung größer. Damit ist der bei der zentralen Differenzenapproximation gemachte Fehler bei Vernachlässigung des Fehlergliedes im Vergleich zu den anderen Approximationen kleiner.

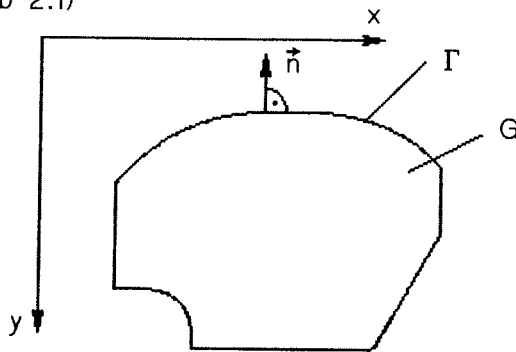
Aus der Addition der beiden Taylor-Reihen für $f(x_0 + \Delta x)$ und $f(x_0 - \Delta x)$, $\Delta x > 0$ ergibt sich die Möglichkeit, $d^2 f/dx^2|_{x_0}$ zu isolieren. Man erhält damit eine zentrale Differenzenapproximation der zweiten Ableitung von f , die ebenfalls die Fehlerordnung $O((\Delta x)^2)$ hat.

$$(2.5) \quad \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2)$$

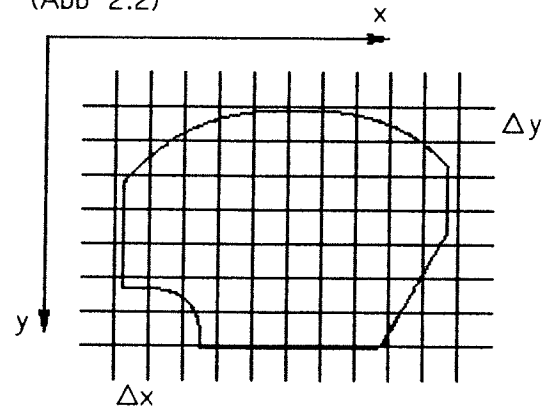
2.2 Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung auf einem Gebiet G im \mathbb{R}^2

Ein Differenzen-Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen kann immer nur Näherungen für Funktionswerte der gesuchten Funktion an endlichen vielen diskreten Punkten innerhalb des betrachteten Gebietes G liefern (Abb.(2.1)). Um die Strömung des Wassers in einem Grundwasserleiter berechnen zu können, müssen daher endlich viele Stützstellen in das Gebiet, in dem sich der Leiter befindet, gelegt werden. Für die Entwicklung von Lösungsverfahren ist dabei das Überdecken des Gebietes G mit einem äquidistanten Netz oder Gitter die einfachste Möglichkeit (Abb. (2.2)) ([2], S. 18f).

(Abb 2.1)



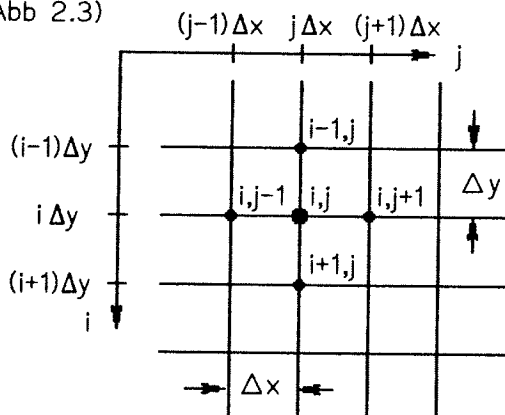
(Abb 2.2)



- G betrachtetes Gebiet
- Γ Rand von G
- n̄ Normalenvektor auf dem Rand
- Δx, Δy Abstand der Gitterlinien in x- bzw. y-Richtung

Die Abstände der Gitterlinien, die Maschenweiten Δx und Δy, müssen nicht gleich bzw. konstant über dem Gebiet G sein. Der Aufwand einer Implementation von Rechenverfahren steigt dann jedoch an. Die Knoten des Gitters werden im weiteren wie in der Abbildung 2.3 dargestellt beschrieben. Die Notation $i\Delta y, j\Delta x$ ermöglicht die in der Mathematik übliche Schreibweise $a_{i,j}$ (i : Zeilenindex; j : Spaltenindex) für die Elemente einer Matrix. Die hydrogeologische Literatur (z.B. [2], S. 21) weicht in diesem Punkt meistens ab. Dort verwendet man für die sogenannte "lokale Indizierung" $i\Delta x, j\Delta y \Rightarrow a_{i,j}$ mit i : Spaltenindex, j : Zeilenindex. Die Art der Notation ist für die praktische Programmierung ohne Belang, da die Gitterpunkte zur Berechnung nach einem anderen Schema durchnummeriert werden. Die Umsetzung der lokalen in die durchzählende Notation ("globale Indizierung") wird innerhalb der Algorithmen mittels einer einfachen Funktion (z.B. $k = (i-1)n_x + j$; k = Gitterpunktzähler, i = Zeile, j = Spalte, n_x = Anzahl der Stützstellen in x-Richtung) durchgeführt.

(Abb 2.3)



- n_x, n_y Anzahl der Stützstellen in der jeweiligen Richtung
- j = 1, 2, ..., n_x
- i = 1, 2, ..., n_y

Die Art der Notation ist für die praktische Programmierung ohne Belang, da die Gitterpunkte zur Berechnung nach einem anderen Schema durchnummeriert werden. Die Umsetzung der lokalen in die durchzählende Notation ("globale Indizierung") wird innerhalb der Algorithmen mittels einer einfachen Funktion (z.B. $k = (i-1)n_x + j$; k = Gitterpunktzähler, i = Zeile, j = Spalte, n_x = Anzahl der Stützstellen in x-Richtung) durchgeführt.

Zur numerischen Lösung der Poisson-Gleichung (einer elliptischen partiellen Differentialgleichung, die z.B. als Sonderfall der Gleichung (1.36) für die Strömung von Grundwasser in isotropen gesättigten Grundwasserleitern im stationären Zustand entsteht (1.39))

$$(2.6) \quad \frac{\partial^2 h(y,x)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h(y,x)}{\partial y^2} = f(y,x)$$

- mit h exakte Lösung der partiellen Differentialgleichung
- f eine Funktion in den unabhängigen Variablen x und y
- h und f sind auf ganz G und auf dem Rand Γ von G definiert

werden zunächst die Ableitungen $\partial^2 h / \partial x^2$ und $\partial^2 h / \partial y^2$ durch Differenzenapproximationen ersetzt (siehe Gl. (2.1)) ([3], S. 421).

$$(2.7) \quad \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2)$$

$$(2.8) \quad \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{(\Delta y)^2} + \tilde{O}((\Delta y)^2)$$

mit u exakte Lösung der Differenzgleichungen, die zur Approximation der partiellen Differentialgleichung gebildet wurden.

Werden die Restglieder $O((\Delta x)^2)$ und $\tilde{O}((\Delta y)^2)$ vernachlässigt und $\Delta x = \Delta y = d$ gesetzt, so ergibt sich die Differenzenapproximation der Poisson-Gleichung bei lokaler Indizierung für einen Gitterpunkt, der nicht auf dem Rand liegt, zu ([3], S. 421):

$$(2.9) \quad 4w_{i,j} - w_{i-1,j} - w_{i+1,j} - w_{i,j-1} - w_{i,j+1} = -d^2 f_{i,j}$$

mit w Lösung der Differenzgleichungen im Punkt $(i\Delta y, j\Delta x)$ des Gitters unter Vernachlässigung der Fehlerterme mit endlicher Genauigkeit (endlich viele Nachkommastellen).

f Werte von f in den Punkten $(i\Delta y, j\Delta x)$ des Gitters.

Wird diese Gleichung für alle $i = 1, 2, \dots, n_y$ und $j = 1, 2, \dots, n_x$ aufgestellt, so ergibt sich ein lineares Gleichungssystem (LGS) mit $(n_x \cdot n_y)$ Unbekannten und genauso vielen Gleichungen. Die einzelnen Gleichungen enthalten dabei bis zu fünf Unbekannte.

Die experimentelle Situation, unter der die Differentialgleichung gelöst werden soll, wird durch die Angabe von Randbedingungen beschrieben.

Unterschieden werden diese Randbedingungen dabei wie folgt ([3], S. 419)

- 1) ein Rand, auf dem die Werte von h über den Betrachtungszeitraum bekannt sind (Dirichlet'sche Randbedingung),
- 2) ein Rand, auf dem nur die Normalenableitung $\partial h / \partial \vec{n}$ bekannt ist (Neumann'sche Randbedingung).

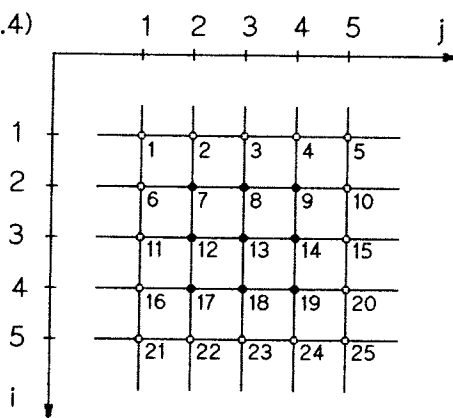
sowie

- 3) eine Kombination der beiden vorgenannten Randbedingungen (Cauchy-Bedingung).

Wird der Rand Γ in disjunkte Randstücke $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$ so aufgeteilt, daß die Vereinigung dieser Randstücke den Rand Γ liefert, so kann auf jedem Randstück ein anderer Randbedingungstyp vorliegen ([3], S. 419).

Für die Poisson-Gleichung (2.6) sei der Einfachheit halber zunächst ein Rand Γ mit bekannten Werten gegeben, d.h. die Funktionswerte von h sind in jedem Punkt des Randes bekannt. Mit der Gleichung (2.9) und dieser Randbedingung ergibt sich bei Verwendung der globalen Indizierung für ein Gebiet, das wie in (Abb. 2.4) dargestellt diskretisiert wird, das lineare Gleichungssystem (2.10). Dabei ist zu beachten, daß die Werte h in den Randpunkten (\circ) bekannt sind, d.h., das LGS muß nicht für alle 25 Gitterpunkte aufgestellt werden, sondern nur für die 9 Gitterpunkte, deren h -Werte unbekannt sind.

(Abb. 2.4)



\circ_k = bekannte h-Werte, globale Indizierung
 \bullet_k = unbekannte h-Werte, globale Indizierung
 $i = 1, 2, \dots, 5$, lokale Indizierung
 $j = 1, 2, \dots, 5$, lokale Indizierung

(2.10)

$$\begin{bmatrix}
 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
 -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\
 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 w_7 \\
 w_8 \\
 w_9 \\
 w_{12} \\
 w_{13} \\
 w_{14} \\
 w_{17} \\
 w_{18} \\
 w_{19}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 -d^2 f_7 + w_2 + w_6 \\
 -d^2 f_8 + w_3 \\
 -d^2 f_9 + w_4 + w_{10} \\
 -d^2 f_{12} + w_{11} \\
 -d^2 f_{13} \\
 -d^2 f_{14} + w_{15} \\
 -d^2 f_{17} + w_{16} + w_{22} \\
 -d^2 f_{18} + w_{23} \\
 -d^2 f_{19} + w_{20} + w_{24}
 \end{bmatrix}$$

Dieses lineare Gleichungssystem hat eine blocktridiagonale Gestalt und läßt sich mit verschiedenen Verfahren lösen. Außerdem fällt auf, daß die w - bzw. h -Werte der Gitterpunkte 1, 5, 21 und 25 im LGS nicht auftauchen. Diese Punkte werden zur Lösung des Problems nicht benötigt. Eine Notation, die diese Punkte nicht aufführt, hätte einen komplizierten und rechenzeitintensiven Algorithmus zur Umrechnung der lokalen in die globale Notation zur Folge. Im Anhang 1 befindet sich dazu ein Beispiel für ein 9×9 - Gitter mit 7×7 unbekanntem Werten im Inneren, dessen zugehöriges LGS mit einem speziell für Bandmatrizen angepaßten Gauß-Jordan-Algorithmus gelöst wurde.

2.3 Dirichlet'sche und Neumann'sche Randbedingungen in der Hydrogeologie

Von den in der Natur vorkommenden Randbedingungen, unter denen die zugehörige Strömungsgleichung gelöst werden soll, werden hier die beiden folgenden Bedingungen im weiteren betrachtet:

1. Die Potentiale h auf dem Rand sind bekannt. Dieser Fall ist ein sogenanntes "Dirichlet-Problem" (siehe Kapitel 2.2). Ein Beispiel für einen solchen Rand stellt das Ufer eines Sees dar, dessen Wasserstand über den Betrachtungszeitraum bekannt ist.
2. Der Fluß durch den Rand ist bekannt ($\partial h / \partial \vec{n}|_{\Gamma} = g$). In diesem Fall liegt ein "Neumann-Problem" vor.

Ein Spezialfall einer Neumann'schen Randbedingung liegt vor, wenn der Fluß durch den Rand gleich Null ist. Das entspricht hier einem undurchlässigen Rand, wie er z.B. an Felswänden oder ähnlichen Gesteinsschichten gegeben ist. Ein weiteres Beispiel für einen undurchlässigen

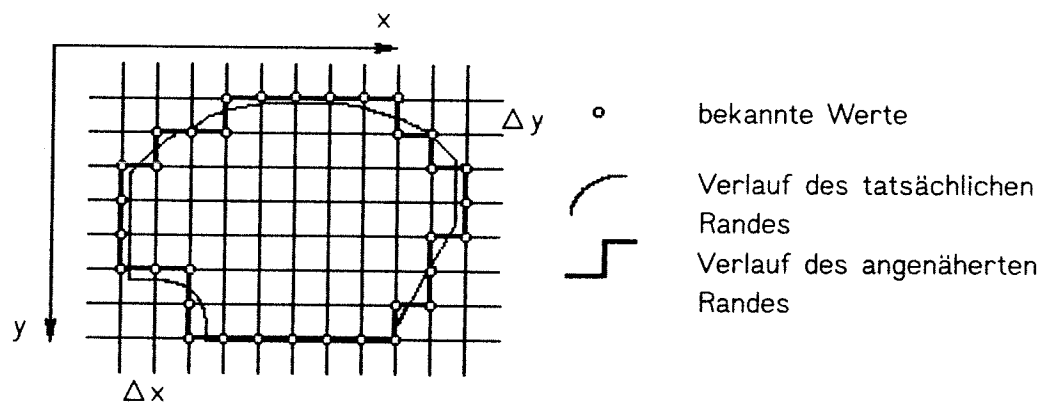
sigen Rand stellt eine Wasserscheide dar.

In der Praxis wird der Rand im allgemeinen stückweise durch die 1. oder die 2. Randbedingung beschrieben ([3], S. 419). So kann man sich ein Gebiet vorstellen, das auf einer Seite an einen See grenzt (Dirichlet), an zwei Seiten an undurchlässigem Gestein grenzt (Neumann, $(\partial h / \partial \vec{n}|_{\Gamma} = 0)$) und durch die vierte einen bekannten Eintrag an Wasser erhält (Neumann, $(\partial h / \partial \vec{n}|_{\Gamma} > 0)$) ([4], S. 139).

Wie die numerische Behandlung der Gleichung (2.6) gezeigt hat, treten bei der Diskretisierung eines Dirichlet-Problems in einem rechteckigen Gebiet bis auf die numerische Lösung von miteinander sehr großen linearen Gleichungssystemen keine Probleme auf. Die Werte auf dem Rand bzw. die Werte der dem Rand am nächsten liegenden Gitterpunkte sind nach Voraussetzung bekannt und können daher im LGS in die Inhomogenität übernommen werden.

Bei Rändern, die nicht auf Gitterlinien liegen, werden in der Literatur Korrekturverfahren für die Werte von w angegeben (z.B. [3], S. 426ff). Es kann aber auch eine "Rechteck"-Approximation des Randverlaufes vorgenommen werden. Es wird dabei praktisch ein Ersatz-Problem aus dem gestellten Problem entwickelt (siehe (Abb. 2.5)) ([2], S. 20).

(Abb. 2.5)



Die Approximation des Randes kann durch die Wahl kleinerer Maschenweiten Δx und Δy verbessert werden ([2], S. 19). Die Anzahl der Unbekannten und der Gleichungen des linearen Gleichungssystems wächst dabei direkt proportional, die seiner Matrixelemente infolgedessen quadratisch zur Anzahl der Gitterpunkte. Dies kann zu Speicherplatzproblemen bzw. zu sehr langen Rechenzeiten führen. Zusätzlich können bei sehr kleinen Δx und Δy Rundungsfehlereinflüsse bei der Berechnung die Güte der Lösung beeinträchtigen.

Bedingt durch die nun nicht mehr rechteckige Form des Randes wird das Gleichungssystem keine blocktridiagonale Gestalt erhalten. Daher ist eine automatisierte Besetzung der Koeffizientenmatrix, wie im ersten Beispiel implementiert, nicht mehr ohne weiteres möglich.

2.4.1 Diskretisierung der Strömungsgleichung für stationäre Situationen unter Dirichlet-Randbedingungen

Die Strömung in einem Grundwasserleiter ist stationär, wenn das Potential bzw. der Wasserstand h im Standrohr (s. Abb. 1.3.) sich über den betrachteten Zeitraum nicht verändert, d.h. $\partial h / \partial t = 0$. Dieser Zustand besteht, wenn die in einem Gebiet G zugeführte Menge Wasser

(z.B. durch Grundwasserneubildung) gleich der aus dem Gebiet abgeführten Wassermenge (z.B. durch Entnahmebrunnen) ist.

Die Strömungsgleichung vereinfacht sich für einen isotropen Grundwasserleiter unter stationären Bedingungen auf die Poisson-Gleichung:

$$(1.40) \quad \frac{\partial^2 h(y,x)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h(y,x)}{\partial y^2} = - \frac{q(y,x)}{T(y,x)}$$

Bemerkung:

Die vertauschten Koordinaten erlauben die Speicherung der Parameter in Matrizen, die der mathematischen Schreibweise entsprechen (siehe Kapitel 2.2., (Abb. 2.3)).

Ist das Potential h für alle Punkte $(i\Delta y, j\Delta x) \in \Gamma$ bekannt, so ist diese elliptische Differentialgleichung, wie in Kapitel 2.2 bereits gezeigt, auf einfache Weise lösbar. Für $(i\Delta y, j\Delta x)$ wird im weiteren kurz (i,j) geschrieben.

2.4.2 Diskretisierung der Strömungsgleichung für stationäre Situationen unter Neumann-Randbedingungen

In der Praxis ist der Fall eines Randes, dessen Potentiale vollständig bekannt sind, ein Spezialfall. Er ist zum Beispiel bei der Betrachtung eines Grundwasserleiters einer in einem See liegenden Insel gegeben. Häufiger wird der Grundwasserleiter durch eine Felswand oder durch eine Wasserscheide begrenzt. An diesen Stellen kann als Randbedingung der Flüssigkeitsaustausch dienen, der von $\partial h / \partial \vec{n} |_{\Gamma}$ (\vec{n} = Normale auf dem Rand Γ) abhängig ist.

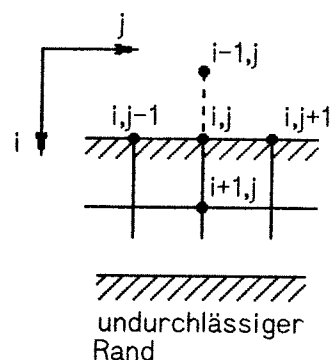
2.4.2.1 Modellierung eines undurchlässigen Randes

Ist der Fluß durch den Rand gleich Null, d.h.

$$(2.11) \quad \frac{\partial h}{\partial \vec{n}} \Big|_{\Gamma} = 0,$$

so spricht man von einem undurchlässigen Rand (vgl. Kapitel 2.3). Um die Poisson-Gleichung

(Abb. 2.6)



unter einer solchen Randbedingung an einem Randpunkt (i,j) , der auf einer Gitterlinie wie in (Abb. 2.6) dargestellt liegt, lösen zu können, wird zunächst für den fehlenden Gitterpunkt ein Hilfspunkt $(i-1,j)$ eingeführt ([3], S. 422f).

Nach der Gleichung (2.4) ergibt sich die zentrale Differenzenapproximation mit der Ordnung $O((\Delta y)^2)$ für die Randbedingung im Punkt (i,j) zu:

$$(2.12) \quad 0 = \frac{\partial h}{\partial y} \Big|_{(i,j)} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta y} + \tilde{O}((\Delta y)^2)$$

Unter Vernachlässigung des Fehlerterms $\tilde{O}((\Delta y)^2)$ folgt aus (2.12)

$$(2.13) \quad \frac{w_{i+1,j} - w_{i-1,j}}{2\Delta y} = 0 \iff w_{i+1,j} = w_{i-1,j}$$

Wird dieses Ergebnis in (2.9) eingesetzt, so folgt für die Differenzenapproximation eines Randpunktes unter Neumann'schen Randbedingungen in lokaler Indizierung:

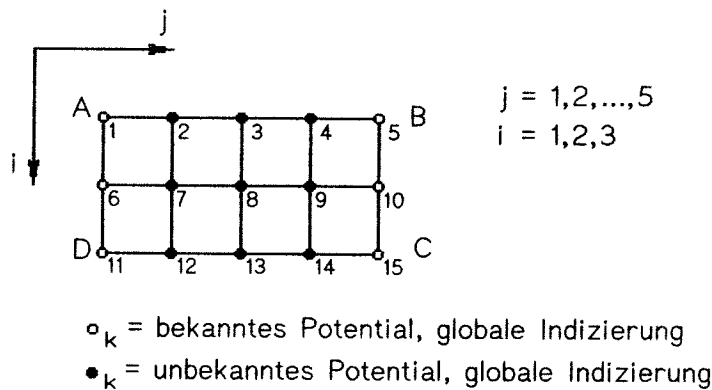
$$(2.14) \quad 4w_{i,j} - w_{i,j-1} - 2w_{i+1,j} - w_{i,j+1} = -d^2 \cdot \left(-\frac{q_{i,j}}{T_{i,j}} \right)$$

Für anders auf Gitterlinien einer Rechteck-Approximation gelagerte Rand- und Eckpunkte ergibt sich die zugehörige Differenzenapproximation analog.

Zur Verdeutlichung der Bearbeitung von Neumann'schen Randbedingungen betrachte man das folgende Beispiel. In diesem wird eine Poisson-Gleichung unter Neumann'schen und Dirichlet'schen Randbedingungen gelöst. Die wiederum durchnummerierten Gitterpunkte werden diesmal alle zur Lösung des Problems benötigt.

Beispiel

(Abb. 2.7)



Problem :

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = f(y,x)$$

$$f(y,x) = -\frac{q(y,x)}{T(y,x)}$$

$h = 50$ auf \overline{BC} und \overline{AD} gegeben.

(hier als $w_1, w_6, w_{11}, w_5, w_{10}$ und w_{15} benutzt)

$$\frac{\partial h}{\partial \vec{n}} = 0 \text{ auf } \overline{AB} \text{ und } \overline{CD}$$

Das vorgestellte Problem führt mit $\Delta x = \Delta y = d$ auf das folgende lineare Gleichungssystem:

$$(2.15) \quad \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & | & -2 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & | & 0 & -2 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & | & 0 & 0 & -2 & | & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & | & 4 & -1 & 0 & | & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & | & -1 & 4 & -1 & | & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & | & 0 & -1 & 4 & | & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & | & -2 & 0 & 0 & | & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & -2 & 0 & | & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & -2 & | & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_7 \\ w_8 \\ w_9 \\ w_{12} \\ w_{13} \\ w_{14} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -d^2 f_2 + w_1 \\ -d^2 f_3 \\ -d^2 f_4 + w_5 \\ -d^2 f_7 + w_6 \\ -d^2 f_8 \\ -d^2 f_9 + w_{10} \\ -d^2 f_{12} + w_{11} \\ -d^2 f_{13} \\ -d^2 f_{14} + w_{15} \end{bmatrix}$$

2.4.2.2 Modellierung eines durchlässigen Randes

Ist der Rand durchlässig, so gilt

$$(2.16) \quad \frac{\partial h}{\partial \vec{n}} \Big|_{\Gamma} = q.$$

Ein durchlässiger Rand wird durch die gleiche Differenzenapproximation modelliert wie ein undurchlässiger Rand. Der bekannte Zu- bzw. Abfluß in das Gebiet durch einen Randpunkt (i,j) fließt durch entsprechende Wahl des Parameters $q_{i,j}$ in die Differenzenapproximation ein ([2], S. 25).

Im Anhang 1 werden die in Kapitel 2.4.2.1 und 2.4.2.2 vorgestellten Methoden der Modellierung von Randpunkten, die einer Neumann'schen Randbedingung genügen, im 2. Beispiel angewendet.

2.5 Diskretisierung der Strömungsgleichung für anisotrope und inhomogene Grundwasserleiter in stationären Situationen

In der Regel ist der Grundwasserleiter über das betrachtete Gebiet G weder homogen noch isotrop. Nach Kapitel 1.2.4 ergibt sich für die Modellierung eines inhomogenen und anisotropen Grundwasserleiters in stationären Situationen die folgende Gleichung:

$$(2.17) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x(y,x) \cdot \frac{\partial h(y,x)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y(y,x) \cdot \frac{\partial h(y,x)}{\partial y} \right) = -q(y,x) \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right] \left[\frac{1}{\text{m}^2} \right]$$

mit h Potential [m] des Grundwassers als Funktion der Ortskoordinaten y und x (Die Ortskoordinaten sind der mathematischen Matrixnotation entsprechend angeordnet (siehe auch (Abb. 2.3)).

T_x Transmissivitäten [m^2/s] in x -Richtung

T_y Transmissivität [m^2/s] in y -Richtung

Gilt $T_x = T_y$, so ist der Grundwasserleiter isotrop. Eine Berücksichtigung von Anisotropie ist in dieser Darstellung nur durch unterschiedliche T -Werte parallel zu den Koordinatenachsen des Gitters möglich.

t Zeit [s]

q Zu- und Abflußmenge pro Zeiteinheit und Fläche [$\text{m}^3/\text{s}/\text{m}^2$].

Zur Lösung dieser partiellen Differentialgleichung werden die Ableitungen wie bei den Gleichungen für isotrope und homogene Grundwasserleiter mit Hilfe der Reihenentwicklung nach Taylor approximiert. Für die Terme

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_x(y,x) \cdot \frac{\partial h(y,x)}{\partial x} \right) \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y(y,x) \cdot \frac{\partial h(y,x)}{\partial y} \right)$$

wird die entsprechende Differenzenapproximation durch die zweimalige Anwendung der zentralen Differenzenapproximation für die erste Ableitung ermittelt. Mit $0 < \Delta x < \alpha$ (siehe auch Kap. 2.1) gilt für die x -Richtung

$$(2.18) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{(y_0, x_0)} \right) = \frac{T_x(y_0, x_0 + \frac{\Delta x}{2}) \frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{(y_0, x_0 + \frac{\Delta x}{2})}}{\Delta x} - \frac{T_x(y_0, x_0 - \frac{\Delta x}{2}) \frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{(y_0, x_0 - \frac{\Delta x}{2})}}{\Delta x} + O((\Delta x)^2)$$

Werden die Ableitungen $\frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{(y_0, x_0 + \frac{\Delta x}{2})}$ und $\frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{(y_0, x_0 - \frac{\Delta x}{2})}$ mit Hilfe der Gleichung (2.4) berechnet, so ergibt sich für den Gitterpunkt (i, j)

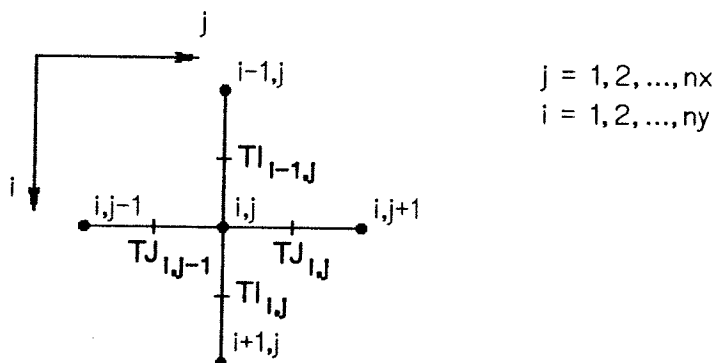
$$(2.19) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x \frac{\partial h}{\partial x} \Big|_{i,j} \right) &= \frac{T_x(i, j + \frac{1}{2}) \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta x} - T_x(i, j - \frac{1}{2}) \frac{u_{i,j-1} - u_{i,j}}{\Delta x}}{\Delta x} + O((\Delta x)^2) \\ &= T_x(i, j + \frac{1}{2}) \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{(\Delta x)^2} + T_x(i, j - \frac{1}{2}) \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) \end{aligned}$$

Die Herleitung der zweiten Ableitung in y -Richtung verläuft analog. Damit läßt sich die Gleichung (2.17) wie folgt diskretisieren

$$(2.20) \quad \begin{aligned} &\frac{T_x(i, j - \frac{1}{2}) [u_{i,j-1} - u_{i,j}]}{(\Delta x)^2} + \frac{T_x(i, j + \frac{1}{2}) [u_{i,j+1} - u_{i,j}]}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) \\ &+ \frac{T_y(i - \frac{1}{2}, j) [u_{i-1,j} - u_{i,j}]}{(\Delta y)^2} + \frac{T_y(i + \frac{1}{2}, j) [u_{i+1,j} - u_{i,j}]}{(\Delta y)^2} + \tilde{O}((\Delta y)^2) = -q_{i,j} \end{aligned}$$

T_x und T_y werden hier jeweils an Stellen benötigt, die genau zwischen den Gitterpunkten liegen. Da die Indizes in den Algorithmen ganzzahlig sein müssen, wird für diese Transmissivitäten eine neue Notation eingeführt (Abb. 2.8)). Dabei werden die Transmissivitäten in x -Richtung mit TJ bezeichnet, da der Zählindex der Gitterpunkte in dieser Richtung über j läuft. Entsprechend werden die Transmissivitäten in y -Richtung mit TI bezeichnet ([2], S. 23).

(Abb. 2.8)



Mit dieser Notation läßt sich die Gleichung (2.20) wie folgt schreiben

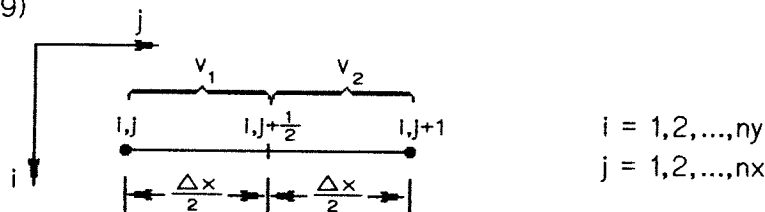
$$(2.21) \quad \frac{TJ_{i,j-1}(u_{i,j-1} - u_{i,j})}{(\Delta x)^2} + \frac{TJ_{i,j}(u_{i,j+1} - u_{i,j})}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) \\ + \frac{TI_{i-1,j}(u_{i-1,j} - u_{i,j})}{(\Delta y)^2} + \frac{TI_{i,j}(u_{i+1,j} - u_{i,j})}{(\Delta y)^2} + \tilde{O}((\Delta y)^2) = -q_{i,j}$$

Die Werte $TJ_{i,j}$ und $TI_{i,j}$ (für alle $i = 1, 2, \dots, ny$; $j = 1, 2, \dots, nx$) werden in dem von mir implementierten Programm GWF nicht explizit eingelesen, sondern wie bei Kinzelbach ([2], S. 22) aus den lokalen Transmissivitäten an den einzelnen Gitterpunkten berechnet.

2.6 Berechnung der Transmissivitäten TJ und TI

Um die Transmissivitäten mitten zwischen zwei Punkten (i,j) und $(i,j+1)$ in x -Richtung berechnen zu können, betrachte man zunächst das Ersatzproblem einer Bewegung zwischen diesen Punkten (Abb. 2.9).

(Abb. 2.9)



Mit dem Gesetz

$$(2.22) \quad s = v \cdot t \quad [\text{m}]$$

mit s zurückgelegte Strecke [m]

v Geschwindigkeit [m/s]

t benötigte Zeit [s]

ergibt sich für die Durchschnittsgeschwindigkeit \bar{v} der zusammengesetzten Bewegung

$$(2.23) \quad \bar{v} = \frac{2 \cdot \frac{\Delta x}{2}}{t_1 + t_2} \quad \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$$

Durch Umstellung der Gleichung (2.22) ergibt für t_1 und t_2 :

$$(2.24) \quad t_1 = \frac{\frac{\Delta x}{2}}{v_1} \quad \text{und} \quad t_2 = \frac{\frac{\Delta x}{2}}{v_2} \quad [\text{s}]$$

Werden diese Gleichungen in (2.23) eingesetzt, so folgt für die Durchschnittsgeschwindigkeit:

$$(2.25) \quad \bar{v} = \frac{2 \cdot \frac{\Delta x}{2}}{\frac{\frac{\Delta x}{2}}{v_1} + \frac{\frac{\Delta x}{2}}{v_2}} = \frac{2 \cdot v_1 \cdot v_2}{v_1 + v_2} \quad \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right]$$

Für die Geschwindigkeiten v_1 und v_2 werden nun die Filtergeschwindigkeiten aus dem Darcy'schen Gesetz eingesetzt (vgl. Gl. (1.15)):

$$(2.26a) \quad v_1 = - \frac{T_{i,j}}{M_{i,j}} \cdot \frac{\frac{\Delta h}{2}}{\frac{\Delta x}{2}} = - \frac{T_{i,j}}{M_{i,j}} \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} \quad \left[\frac{m}{s} \right]$$

bzw.

$$(2.26b) \quad v_2 = - \frac{T_{i,j+1}}{M_{i,j+1}} \cdot \frac{\frac{\Delta h}{2}}{\frac{\Delta x}{2}} = - \frac{T_{i,j+1}}{M_{i,j+1}} \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} \quad \left[\frac{m}{s} \right]$$

Bemerkung:

Die Potentialdifferenz Δh wird aus der Differenz der Potentiale an den Punkten (i,j) und $(i,j+1)$ gebildet. Unter der Voraussetzung, daß sich das Potential vom Punkt (i,j) zum Punkt $(i,j+1)$ linear verändert, ergibt sich für die halbe Strecke $(\Delta x/2)$ die halbe Potentialdifferenz $(\Delta h/2)$.

Unter der Voraussetzung, daß sich die Mächtigkeit vom Punkt (i,j) zum Punkt $(i,j+1)$ ebenfalls linear verändert, d.h. $M = (M_{i,j} + M_{i,j+1})/2$, folgt nach Einsetzen der Gleichungen (2.26a) und (2.26b) in (2.25):

$$(2.27) \quad \bar{v} = - \frac{(2 \cdot T_{i,j} \cdot T_{i,j+1})/M^2 \cdot \left(\frac{\Delta h}{\Delta x}\right)^2}{(T_{i,j} + T_{i,j+1})/M} \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} \quad \left[\frac{m}{s} \right]$$

bzw. mit der in (Abb. 2.8) eingeführten Notation

$$(2.28) \quad \bar{v} = - \frac{T_{i,j}^J}{M} \cdot \frac{\Delta h}{\Delta x} \quad \left[\frac{m}{s} \right]$$

mit

$$(2.29) \quad T_{i,j}^J = \frac{2 \cdot T_{i,j} \cdot T_{i,j+1}}{T_{i,j} + T_{i,j+1}} \quad \left[\frac{m^2}{s} \right]$$

Die Transmissivität $T_{i,j}^J$ wird also mit Hilfe der lokalen Transmissivitäten $T_{i,j}$ und $T_{i,j+1}$ als deren sogenanntes harmonisches Mittel berechnet. Für die y -Richtung folgt die Berechnung der Transmissivität $T_{i,j}$ analog.

Bei der Eingabe der lokalen Transmissivitäten kann durch einen lokalen Anisotropiefaktor das Verhältnis $T_{i,j}^J/T_{i,j}$, d.h. der Grad der Anisotropie, angegeben werden ([2], S. 76). Damit ist es möglich, die lokale Transmissivität in x -Richtung als $T_{i,j}$ ($i = 1, 2, \dots, n_y$; $j = 1, 2, \dots, n_x$) einzulesen und daraus mit Hilfe des Anisotropiefaktors $an_{i,j}$ die lokale Transmissivität in y -Richtung als $an_{i,j} \cdot T_{i,j}$ zu berechnen.

Für die Berechnung von $T_{i,j}^J$ ($i = 1, 2, \dots, n_y$; $j = 1, 2, \dots, n_x$) ergibt sich mit der obigen Betrachtung unverändert die Gleichung (2.29). Für die Transmissivität in y -Richtung $T_{i,j}$ ($i = 1, 2, \dots, n_y$; $j = 1, 2, \dots, n_x$) wird die Gleichung (2.29) erweitert. Es gilt

$$(2.30) \quad T_{i,j} = \frac{2 \cdot an_{i,j} \cdot T_{i,j} \cdot an_{i+1,j} \cdot T_{i+1,j}}{an_{i,j} \cdot T_{i,j} + an_{i+1,j} \cdot T_{i+1,j}} \quad \left[\frac{m^2}{s} \right]$$

Um Speicherplatz zu sparen und um die Eingabe von Parametern nicht unnötig zu verkomplizieren, wird im Programm GWF nur ein globaler Anisotropiefaktor (AN) eingelesen, d.h.

$an_{i,j} = an$ für alle $i = 1, 2, \dots, ny$; $j = 1, 2, \dots, nx$. Mit diesem Anisotropiefaktor vereinfacht sich die Gleichung (2.30) zu

$$(2.31) \quad T_{I,i,j} = \frac{2 \cdot an^2 \cdot T_{i,j} \cdot T_{i+1,j}}{an \cdot (T_{i,j} + T_{i+1,j})} = an \cdot \frac{2 \cdot T_{i,j} \cdot T_{i+1,j}}{T_{i,j} + T_{i+1,j}} \left[\frac{m^2}{s} \right]$$

Die Verwendung der harmonischen Mittelung zur Berechnung der Transmissivitäten T_I und T_J ist nicht nur nach Betrachtung der physikalischen Gesetze sinnvoll. Sie ermöglicht darüberhinaus auf einfache Art und Weise die Modellierung eines undurchlässigen Randes. Nach Kapitel 2.3. ist bei einem undurchlässigen Rand kein Fluß durch diesen zu beobachten.

Nach dem Darcy'schen Gesetz gilt für die Geschwindigkeit v_f zwischen zwei Punkten x_1 und x_2 (siehe Gl. (1.15)):

$$(1.19) \quad v_f = -\frac{T}{M} \cdot \frac{h(x_1) - h(x_2)}{x_1 - x_2} \quad ; \quad x_1 \neq x_2$$

Daraus folgt

$$(2.32) \quad v_f = 0 \iff T = 0 \quad \vee \quad \frac{h(x_1) - h(x_2)}{x_1 - x_2} = 0$$

Bei den Algorithmen von W. Kinzelbach sind die Matrizen, die zur Speicherung der lokalen Transmissivitäten dienen, etwas größer dimensioniert als nötig. Die Transmissivitäten $T_{i,0}$, $T_{i,nx+1}$, $T_{0,j}$ und $T_{ny+1,j}$ ($i = 1, 2, \dots, ny$; $j = 1, 2, \dots, nx$) sind in diesen Matrizen mit dem Wert 0 besetzt. Dies hat zur Folge, daß die harmonische Mittelung zwischen der lokalen Transmissivität des Randpunktes und der schon außerhalb des Gebietes liegenden Transmissivität immer den Wert 0 liefert ([2], S. 25).

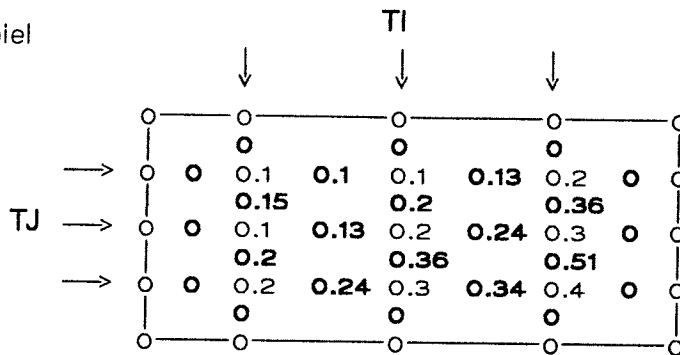
Bemerkungen:

- 1) Das Gebiet wird bei Anwendung dieses Berechnungsalgorithmusses immer von einem undurchlässigen Rand begrenzt. Nach Kapitel 2.4.2.2 kann jedoch mit dieser Modellierung ein durchlässiger Rand durch geeignete Wahl der Zu- bzw. Abflußmenge q im entsprechenden Randpunkt (i,j) modelliert werden. Bei einem Randpunkt, dessen Potential bekannt ist (Dirichlet-Randbedingung), braucht eine Berechnung des Potentials nicht durchgeführt werden. Damit ist die den Gegebenheiten nicht entsprechende Berechnung der Transmissivitäten unerheblich.
- 2) Bei dem von mir implementierten Programm GWF müssen die Gitterpunkte, deren h -Wert berechnet werden sollen, mindestens einen Abstand von $\Delta x/2$ bzw. $\Delta y/2$ zu einem durchlässigen oder undurchlässigen Gebietsrand haben, da die Berechnungsalgorithmen immer von einem vollständigen "Strömungskanal" der Breite $b = \Delta x$ bzw. Δy ausgehen (siehe auch Gl. (1.10)). Bei Halbierung der lokalen Transmissivitäten in den Randstreifen können die Gitterpunkte auf den Rand gelegt werden ([2], S. 27). Die dadurch entstehende Anisotropie kann jedoch nicht durch den global geltenden Anisotropiefaktor aufgehoben werden. In einer späteren Version des Programms wird aus diesem Grund der globale Anisotropiefaktor durch einen lokalen ersetzt werden.

An dieser Stelle sei die Betrachtung des folgenden Beispiels empfohlen. Es zeigt die aus den lokalen Transmissivitäten berechneten richtungsabhängigen Transmissivitäten. Der hier model-

lierte Grundwasserleiter ist inhomogen und hat eine Anisotropie von 1,5. Die aus den lokalen

Beispiel



Transmissivitäten (normale Schrift) berechneten Transmissivitäten, die zwischen den Punkten liegen, sind symmetrisch gerundet und dann in fetter Schrift geschrieben. Die Werte der äußeren Umrahmung (o—o) gehören schon nicht mehr zum Gebiet.

Setzt man die durch die Gleichungen (2.29) und (2.31) berechneten Transmissivitäten in die Gleichung (2.21) ein und vernachlässigt die Fehlerterme $O((\Delta x)^2)$ und $\tilde{O}((\Delta y)^2)$, so läßt sich nach Negation die folgende Diskretisierung der Strömungsgleichung für stationäre Situationen in gesättigten, anisotropen und inhomogenen Porengrundwasserleitern im Punkt $(i\Delta y, j\Delta x)$ aufstellen:

$$(2.33) \quad E_i w_{i,j} - A_i w_{i-1,j} - B_i w_{i,j-1} - C_i w_{i,j+1} - D_i w_{i+1,j} = q_{i,j}$$

mit

$$A_i = T_{i-1,j} = \left(\text{an} \frac{2T_{i,j}T_{i-1,j}}{T_{i,j} + T_{i-1,j}} \right) / (\Delta y)^2; \quad D_i = T_{i,j} = \left(\text{an} \frac{2T_{i,j}T_{i+1,j}}{T_{i,j} + T_{i+1,j}} \right) / (\Delta y)^2$$

$$B_i = T_{i,j-1} = \left(\frac{2T_{i,j}T_{i,j-1}}{T_{i,j} + T_{i,j-1}} \right) / (\Delta x)^2; \quad C_i = T_{i,j} = \left(\frac{2T_{i,j}T_{i,j+1}}{T_{i,j} + T_{i,j+1}} \right) / (\Delta x)^2$$

$$E_i = A_i + B_i + C_i + D_i$$

$$l = (i-1) * nx + j; \quad i = 1, 2, \dots, ny; \quad j = 1, 2, \dots, nx$$

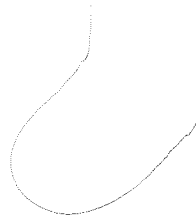
Die hier dargestellte Gleichung muß für alle Punkte des Gebietes aufgestellt werden, deren w -Werte berechnet werden sollen. Dies führt auf ein lineares Gleichungssystem mit einer einfachen Struktur (siehe auch Kapitel 2.2 Gl.(2.10)). Zur Lösung dieser mitunter sehr großen Systeme können die verschiedenartigsten Gleichungslöser eingesetzt werden. Das folgende Kapitel behandelt aus der Klasse der iterativen Verfahren besonders das SOR-Verfahren, welches wiederum das Gauß-Seidel-Verfahren benutzt.

Literaturangabe zum Kapitel 2

- 1) I.N. Bronstein / K.A. Semendjajew
"Taschenbuch der Mathematik"
20. Auflage
Harri Deutsch, Thun und Frankfurt(Main), 1981

- 2) Wolfgang Kinzelbach
"Groundwater Modelling. An Indroduction with Sample Programs in BASIC"
1. Auflage
Elsevier, Amsterdam, 1986

- 3) H.R. Schwarz
"Numerische Mathematik"
B.G. Teubner, Stuttgart, 1986



3. Numerische Verfahren zur Lösung von speziellen linearen Gleichungssystemen

Zur numerischen Lösung der Strömungsgleichung für stationäre Situationen ist nach Kapitel 2 ein durch die Gleichung (2.33) beschriebenes lineares Gleichungssystem zu lösen. Die Größe dieses LGS's ist dabei, wie in Kapitel 2.3 gezeigt, direkt proportional zur Anzahl der Gitterpunkte des Gitters, welches das betrachtete Gebiet überdeckt. Bei der Überdeckung eines beispielsweise $5\text{ km} \times 5\text{ km}$ großen Areals mit 50×50 Gitterpunkten ($\Delta x = \Delta y = 100\text{ m}$), ergibt sich ein LGS mit bis zu 2500 Unbekannten und ebensovielen Gleichungen.

Bei der Lösung solcher großer linearer Gleichungssysteme, bei denen darüberhinaus die Koeffizientenmatrizen schwach besetzt sind, werden häufig iterative Verfahren eingesetzt, weil diese im Vergleich zu direkten Verfahren wie etwa dem Gauß-Jordan-Verfahren einen geringeren Speicherplatzverbrauch haben. Diese Probleme können zwar durch Ausnutzung der Kenntnis über die besondere Struktur der zu lösenden linearen Gleichungssysteme (blocktri-diagonal) auf ein Mindestmaß reduziert werden, eine vollständige Beseitigung ist jedoch nicht möglich. Aus diesen Gründen werde ich mich hier nicht mit dem Gauß-Jordan-Algorithmus beschäftigen. Es sei an dieser Stelle auf die entsprechende Literatur (etwa Schwarz [9]) bzw. das Listing dieses im Programm GWF implementierten Algorithmus verwiesen.

Bei den iterativen Verfahren ist das Verfahren der sukzessiven Überrelaxation (SOR) das bekannteste. Es basiert auf dem Gauß-Seidel-Algorithmus, der wiederum eine Weiterentwicklung des Jacobi-Verfahrens ist. In diesem Kapitel werden daher zunächst diese beiden Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme kurz vorgestellt. Bei der anschließenden Behandlung des SOR-Verfahrens steht die Konvergenz dieses Verfahrens bzw. dessen Konvergenzgeschwindigkeit in Abhängigkeit von einem Relaxationsparameter ω im Vordergrund. Nach den rein theoretischen Betrachtungen wird auf die Lösung der linearen Gleichungssysteme eingegangen, die unter den speziellen Situationen der Hydrogeologie entstehen.

3.1 Gewinnung einer allgemeinen Iterationsvorschrift

Allen iterativen Verfahren liegt dieselbe Idee zugrunde: Ausgehend von einem Startvektor $x^{(0)}$ wird mittels einer Iterationsvorschrift eine erste Näherung der exakten Lösung berechnet. Aus dieser Näherung der Lösung erfolgt durch Anwendung der gleichen Iterationsvorschrift die Ermittlung einer weiteren Näherung. Wird dabei die Differenz zwischen der Näherung der Iterationsstufe (k) und der tatsächlichen Lösung des LGS bei wachsendem k immer kleiner, so konvergiert das Verfahren gegen die wahre Lösung.

Die hier betrachteten Verfahren lösen lineare Gleichungssysteme der Gestalt

$$(3.1) \quad Ax = b \quad \text{mit} \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}; \det A \neq 0 \\ x \in \mathbb{R}^n; b \in \mathbb{R}^n$$

Bemerkung:

Für A , x und b kann auch gelten: $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $x \in \mathbb{C}^n$, $b \in \mathbb{C}^n$. Dieser Fall ist aber in den hydrogeologischen Situationen, die in dieser Arbeit betrachtet werden, nicht gegeben und wird daher hier nicht weiter untersucht.

Eine allgemeine Iterationsvorschrift für die iterative Lösung linearer Gleichungssysteme läßt sich unter Zuhilfenahme einer beliebigen nichtsingulären Matrix B (d.h. $\det B \neq 0$) bilden.

Durch die Addition und gleichzeitige Subtraktion von Bx erhält man

$$(3.2) \quad \begin{aligned} Ax = b &\iff Bx - Bx + Ax = b \\ &\iff Ix - Ix + B^{-1}Ax = B^{-1}b \\ &\iff x = (I - B^{-1}A)x + B^{-1}b \end{aligned}$$

Die Matrix $(I - B^{-1}A) = T$ wird als Iterationsmatrix des Verfahrens bezeichnet. Es ergibt sich jetzt die sogenannte Fixpunktform des linearen Gleichungssystems

$$(3.3) \quad x = Tx + c \quad \text{mit } T = (I - B^{-1}A) \text{ und } c = B^{-1}b$$

Wird in dieser Gleichung auf der rechten Seite ein beliebiger Startvektor $x^{(0)}$ (der hochgestellte und eingeklammerte Index bezeichnet im weiteren die Iterationsstufe k , in der sich der bezeichnete Vektor gerade befindet) eingesetzt, so läßt sich durch Ausführung der Iterationsvorschrift ein neuer Vektor berechnen. Wäre der eingesetzte Vektor $x^{(0)}$ gleich der wahren Lösung x^* , so würde auch der berechnete Vektor gleich der wahren Lösung sein.

Damit ergibt sich ein iteratives Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme wie folgt

- (3.4) 1) Wähle einen Startvektor $x_i^{(0)}$; $i = 1, 2, \dots, n$
- 2) Setze $k := 0$
- 3) $k := k + 1$
- 4) $x^{(k)} := Tx^{(k-1)} + c$
- 5) $\max_{ab} := \max_i |x_i^{(k-1)} - x_i^{(k)}|$; für $i = 1, 2, \dots, n$
- 6) $x^{(k-1)} := x^{(k)}$
- 7) Wiederhole die Schritte 3, ..., 7 bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist.
- 8) $x^{(k)}$ ist eine Näherung der gesuchten Lösung x^* .

Bemerkung:

Als Abbruchkriterium kann z.B. die Bedingung

$$(3.5) \quad \text{Abbruch, wenn } \max_{ab} < \epsilon; \epsilon > 0$$

benutzt werden.

Die in (3.4) gewählte Darstellung für ein iteratives Verfahren wird als dessen Fixpunkt-Form bezeichnet.

Bei der Konstruktion iterativer Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme (LGS) kommt es in der Praxis auf den Nachweis der Konvergenz und auf die erzielbare Konvergenzgeschwindigkeit des gewählten Verfahrens an. Allgemeine Sätze zu diesen Fragen finden sich z.B. in [1] und [4]. Die für diese Arbeit wichtigsten Definitionen, Sätze und Resultate seien im Folgenden kurz aufgeführt. Grundlegend sind dabei die Definition des Spektralradius (3.6) und der allgemeinen Konvergenzsatz für iterative Verfahren in Fixpunkt-Notation (3.7).

Definition ([1], S. 75)

(3.6) Sind λ_i , $i = 1, 2, \dots, n$, die Eigenwerte einer $n \times n$ -Matrix, so nennt man

$$S(A) := \max_i |\lambda_i|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

den Spektralradius von A .

Der Konvergenzsatz für iterative Verfahren, die durch eine Fixpunkt-Notation beschrieben werden können, lautet:

Satz ([1], S. 242)

(3.7) 1. Das Verfahren $x^{(k)} = T x^{(k-1)} + c$
mit $T = (I - B^{-1}A)$ und $c = B^{-1}b$, wobei B eine beliebige nichtsinguläre Matrix ist, konvergiert für alle Startvektoren $x^{(0)}$ genau dann, wenn
$$S(T) < 1$$

(3.8) 2. Hinreichend für die Konvergenz des Verfahrens ist die Bedingung

$$\text{lub}(T) < 1$$

wobei $\text{lub}(T) = \sup_{\|x\| \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$ bezüglich jeder Norm genommen werden kann.

Dieser Satz bildet die Grundlage für die Konvergenz der in diesem Abschnitt behandelten Verfahren. Es wird also jeweils zu überprüfen sein, ob der Spektralradius der jeweiligen Iterationsmatrix für die in der Hydrogeologie erzeugten linearen Gleichungssysteme kleiner 1 ist. Nur wenn dies der Fall ist, konvergiert das iterative Verfahren gegen die wahre Lösung des LGS.

Für die Darstellung einiger iterativer Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme benutze ich im weiteren die folgende Zerlegung der Koeffizientenmatrix A des LGS ([1], S. 240):

$$(3.9a) \quad A = E + D + F$$

mit

$$E = \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ * & & 0 \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} * & & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & & * \end{pmatrix} \quad F = \begin{pmatrix} 0 & & * \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & & 0 \end{pmatrix}$$

Weiter gelte, falls $a_{i,i} \neq 0$ für alle $i = 1, 2, \dots, n$

$$(3.9b) \quad L = -D^{-1}E; \quad U = -D^{-1}F; \quad I = \text{Einheitsmatrix}; \quad J = L+U; \quad H = (I-L)^{-1}U$$

3.2 Das Jacobi-Verfahren (Gesamtschritt-Verfahren)

Eines der einfachsten iterativen Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme ist das Jacobi- oder Gesamtschritt-Verfahren. Dieses Verfahren verwendet mit der oben eingeführten Notation (3.9a) und (3.9b) für die Matrix B die Diagonale von A . Es gilt ([1], S. 240)

$$(3.10) \quad B := D \Rightarrow T_J = (I - D^{-1}A) \quad \text{und} \quad c_J = D^{-1}b$$

Für T_J schreibt man häufig auch kürzer: J . Außerdem läßt sich durch Umformung zeigen, daß $J = L+U$ gilt.

Für die Berechnung der i -ten Komponente des Lösungsvektors x in der (k) -ten Iterationsstufe kann nun die folgende Formel verwendet werden ([2], S. 1007f):

$$(3.11) \quad x_i^{(k)} = \sum_{j=1}^n k_{i,j} \cdot x_j^{(k-1)} + c_i \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

mit
$$k_{i,j} = \begin{cases} -\frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} & \text{für } i \neq j \\ 0 & \text{für } i = j \end{cases} \quad \text{und} \quad c_i = \frac{b_i}{a_{i,i}} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Der Vektor x wird ausgehend von einem Startvektor $x^{(0)}$ solange mit Hilfe dieser Iterationsvorschrift neu berechnet, bis ein geeignetes Abbruchkriterium erfüllt ist (z.B. (3.5)).

Mit Hilfe der Maximumsnorm ergibt sich für das Jacobi-Verfahren ([1], S. 244)

$$(3.12) \quad \text{lub}_\infty(J) = \max_i \frac{1}{|a_{i,i}|} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n |a_{i,k}| \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

Für die Konvergenz des Jacobi-Verfahrens kann jetzt der folgende Satz als Folgerung aus Satz (3.8) aufgestellt werden.

Satz (starkes Zeilensummenkriterium) ([1], S. 244)

$$(3.13) \quad \text{lub}_\infty(J) < 1 \iff |a_{i,i}| > \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n |a_{i,k}| \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

D.h., das Jacobi-Verfahren ist konvergent, wenn das sogenannte starke Zeilensummenkriterium erfüllt ist. Für unzerlegbare (irreduzible) Matrizen A kann dies weniger scharf formuliert werden. Es gilt dann der

Satz (schwaches Zeilensummenkriterium) ([1], S. 245)

(3.14) Das Jacobi-Verfahren ist konvergent, wenn für die irreduzible Matrix A gilt

$$|a_{i,i}| \geq \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n |a_{i,k}| \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

und $|a_{j,j}| > \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n |a_{j,k}|$ für mindestens ein $j \in \{1, 2, \dots, n\}$

Eine wichtige Bedingung für die Anwendbarkeit des Satzes (3.14) ist die Unzerlegbarkeit der Koeffizientenmatrix A des LGS.

Definition ([3], S. 26)

Sei $W = \{1, 2, \dots, n\}$ (n ist die Ordnung der Matrix A). S und T seien zwei beliebige nicht leere und disjunkte Teilmengen von W , so daß gilt

$$S \cup T = W, \quad S \cap T = \{\}, \quad S \neq \{\}, \quad T \neq \{\}$$

(3.15a) Eine Matrix A ist zerlegbar (reduzibel), falls eine Aufteilung von W in S und T existiert, so daß $a_{i,j} = 0$ für alle $i \in S$ und $j \in T$.

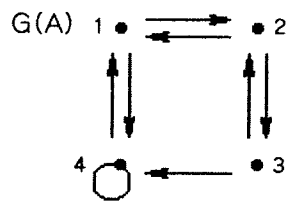
(3.15b) Eine Matrix A ist unzerlegbar (irreduzibel), falls zu jeder Aufteilung von W in S und T stets mindestens ein Element $a_{i,j} \neq 0$ existiert, so daß $i \in S$ und $j \in T$.

Die Bestimmung dieser Mengen ist nicht immer einfach. Die Zerlegbarkeit bzw. die Unzerlegbarkeit einer Matrix A kann häufig leichter mit Hilfe eines der Matrix zugeordneten Graphen $G(A)$ überprüft werden. Der zugeordnete Graph $G(A)$ besteht dabei bei einer $n \times n$ -Matrix aus n Knoten P_1, \dots, P_n . Es gibt eine gerichtete Verbindung vom Knoten P_i zum Knoten P_j in $G(A)$ genau dann, wenn das Element $a_{i,j}$ der Matrix A ungleich Null ist ([1], S. 244f). Es läßt sich zeigen, daß die Matrix A unzerlegbar ist, wenn der Graph $G(A)$ zusammenhängend ist ([4], S. 39). $G(A)$ ist dabei zusammenhängend, wenn es für jedes Knotenpaar (P_i, P_j) in $G(A)$ einen gerichteten Weg von P_i nach P_j ($i, j = 1, 2, \dots, n$) gibt ([1], S. 245).

Beispiele

(3.16a) ([4], S. 39)

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

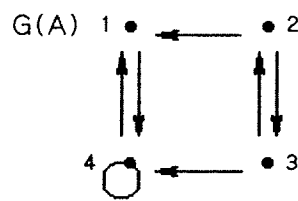


$G(A)$ ist zusammenhängend

$\Rightarrow A$ ist unzerlegbar.

(3.16b)

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



$G(A)$ ist nicht zusammenhängend da man vom Punkt P_1 nicht zum Punkt P_2 gelangen kann.

$\Rightarrow A$ ist zerlegbar.

Bemerkung:

Die Zerlegbarkeit einer Matrix hängt nur von den Nichtdiagonalelementen ab.

Später wird gezeigt, daß die in der Hydrogeologie erzeugten LGS unter bestimmten Voraussetzungen immer irreduzible Koeffizientenmatrizen besitzen und das schwache Zeilensummenkriterium bei diesen Matrizen immer erfüllt ist.

3.3 Das Gauß-Seidel-Verfahren (Einzelschritt-Verfahren)

Das Jacobi-Verfahren konvergiert in der Regel sehr langsam. Eine deutliche Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit läßt sich erreichen, wenn bei der Berechnung der Komponenten x_i mit $i > 1$ des Lösungsvektors x im (k) -ten Iterationsschritt nicht die Werte aus der Iterationsstufe $(k-1)$ sondern die bereits berechneten Werte aus der Stufe (k) verwendet werden.

Wählt man $B = (D + E)$, so ergibt sich, ausgehend von der Fixpunktform des LGS (3.3), die Fixpunkt-Notation des Gauß-Seidel-Verfahren zu

$$\begin{aligned} (3.17) \quad x &= (I - (D + E)^{-1}A)x + (D + E)^{-1}b \\ \Leftrightarrow x &= (I - L)^{-1}Ux + (D + E)^{-1}b \\ \Leftrightarrow (I - L)x &= Ux + (I - L)(D + E)^{-1}b \\ \Leftrightarrow x - Lx &= Ux + D^{-1}b \\ \Leftrightarrow x &= Lx + Ux + D^{-1}b \end{aligned}$$

Die Iterationsmatrix $T_{GS} = (I - (D + E)^{-1}A) = (I - L)^{-1}U$ des Gauß-Seidel-Verfahrens wird in der Literatur auch kurz mit H bezeichnet ([1], S. 240).

Ersetzt man den 4. Schritt in der Darstellung des allgemeinen Iterationsverfahrens (3.4) durch

$$(3.18) \quad x^{(k)} := Lx^{(k)} + Ux^{(k-1)} + D^{-1}b,$$

so erhält man das Gauß-Seidel-Verfahren in Fixpunkt-Notation.

Bemerkung:

Die Multiplikation der Matrix L mit dem Vektor x erfolgt nur mit den Komponenten des Vektors, deren Index kleiner ist als der aktuelle Zeilenindex, d.h. die Komponenten befinden sich bereits in der (k) -ten Iterationsstufe.

Damit ergibt sich für die Berechnung der i -ten Komponente des Lösungsvektors x im (k) -ten Iterationsschritt:

$$(3.19) \quad x_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{i-1} k_{i,j} \cdot x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^n k_{i,j} \cdot x_j^{(k-1)} + c_i \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n$$

mit
$$k_{i,j} = -\frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} \quad \text{für } i \neq j \quad \text{und} \quad c_i = \frac{b_i}{a_{i,i}} \quad \text{für alle } i = 1, 2, \dots, n$$

Bemerkung:

Die Koeffizienten $k_{i,j}$ und c_i des Gauß-Seidel-Verfahrens entsprechen denen des Jacobi-Verfahrens. Bei der Implementation des Gauß-Seidel-Verfahrens braucht man daher im Vergleich zum Jacobi-Algorithmus, lediglich die Summenbildung an einer Stelle zu verändern und die im Jacobi-Verfahren benutzte Setzung $k_{i,j} = 0$ für $i = j$ kann entfallen. Der Vektor $x^{(k-1)}$ kann komplett durch den Vektor $x^{(k)}$ ersetzt werden, da der Vektor, der als Berechnungsgrundlage dient, sukzessive durch die Ergebnisse der Berechnung überschrieben werden soll. Neben der durch das Verfahren bedingten Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit kann darüberhinaus noch der Speicherplatz für den Vektor $x^{(k-1)}$ eingespart werden (dieser Vektor wird jedoch häufig für die Kontrolle des Abbruchkriteriums benötigt).

Es läßt sich zeigen ([1], S. 246), daß unter der Voraussetzung des starken Zeilensummenkriteriums (3.13) gilt

$$(3.20) \quad \text{lub}_{\infty}(H) \leq \text{lub}_{\infty}(J) < 1$$

Damit ist sowohl das Kriterium (3.8) als auch das starke Zeilensummenkriterium hinreichend für die Konvergenz des Gauß-Seidel-Verfahrens. Darüberhinaus ist auch die Erfüllung des schwachen Zeilensummenkriteriums (3.14) hinreichend für die Konvergenz des Gauß-Seidel-Verfahrens ([2], S. 1019).

Ist die Iterationsmatrix J des Jacobi-Verfahrens nichtnegativ $J \geq 0$, so gilt außerdem der Satz von Stein und Rosenberg ([1], S. 247). Dabei ist eine Matrix A insbesondere dann nichtnegativ, wenn die Matrix A positive Diagonalelemente und nichtpositive Nichtdiagonalelemente besitzt: $a_{i,i} > 0$, $a_{i,k} \leq 0$ für $i \neq k$ ([1], S. 247). Eine Matrix mit diesen Eigenschaften bezeichnet man auch als L -Matrix ([4], S. 42).

Satz (von Stein und Rosenberg)

(3.21) Ist die Matrix J nichtnegativ, so gilt für $J = (I - D^{-1}A)$ und $H = (I - L)^{-1}U$ genau eine der folgenden Beziehungen

1. $S(H) = S(J) = 0$
2. $0 < S(H) < S(J) < 1$
3. $S(H) = S(J) = 1$
4. $S(H) > S(J) > 1$

Bemerkung:

Nur wenn das Jacobi-Verfahren konvergiert, konvergiert auch das Gauß-Seidel-Verfahren. Es liegt der Schluß nahe, daß das Gauß-Seidel-Verfahren zumindest unter den Voraussetzungen des Satzes (3.21) schneller konvergiert, da der Spektralradius von H kleiner ist als der Spektralradius von J . Diese Bedingungen sind für fast alle linearen Gleichungssysteme erfüllt, die man durch Differenzenapproximation einer partiellen Differentialgleichung erhält ([1], S. 248).

3.4 Das SOR-Verfahren

Eine weitere Steigerung der Konvergenzgeschwindigkeit läßt sich durch die Anwendung des SOR-Verfahrens erreichen. Bei diesem Verfahren wird zunächst die i -te Komponente des Vektors $\tilde{x}^{(k)}$ in der (k) -ten Iterationsstufe mit dem Gauß-Seidel-Verfahren berechnet. Aus $\tilde{x}_i^{(k)}$ bildet man danach mit dem Wert $x_i^{(k-1)}$ durch eine gewichtete Mittelung den Wert $x_i^{(k)}$ in der (k) -ten Iterationsstufe. Es ergibt sich damit für das SOR-Verfahren der folgende Algorithmus:

- (3.22)
- 1) Wähle einen Startvektor $x_i^{(0)}$; $i = 1, 2, \dots, n$
 - 2) Setze $k := 0$
 - 3) $k := k + 1$
 - 4) für $i = 1, 2, \dots, n$

$$\tilde{x}_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{i-1} k_{i,j} \cdot x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^n k_{i,j} \cdot x_j^{(k-1)} + c_i$$

$$x_i^{(k)} = (1 - \omega) x_i^{(k-1)} + \omega \tilde{x}_i^{(k)} = x_i^{(k-1)} + \omega (\tilde{x}_i^{(k)} - x_i^{(k-1)})$$

- 5) $\max a := \max_i |x_i^{(k-1)} - x_i^{(k)}|$; $i = 1, 2, \dots, n$
- 6) $x^{(k-1)} := x^{(k)}$
- 7) Wiederhole die Schritte 3, ..., 7 bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist.
- 8) $x^{(k)}$ ist eine Näherung der gesuchten Lösung x^* .

Bemerkung:

Die Iterationsmatrix H des SOR-Verfahrens und damit ihr Spektralradius ist dabei von dem sogenannten Relaxationsparameter ω abhängig. Für $\omega = 1$ entspricht das SOR-Verfahren dem Gauß-Seidel-Verfahren. Ist der Relaxationsparameter größer als 1, so liegt eine Überrelaxation (overrelaxation) vor. Entsprechend spricht man bei $\omega < 1$ von einer Unterrelaxation. Da der Spektralradius einen Einfluß auf die Konvergenzgeschwindigkeit hat, ist dieser Parameter nach Möglichkeit so zu wählen, daß $S(H(\omega))$ minimal ist.

Für die Entwicklung der Iterationsmatrix $H(\omega)$ ersetzt man zunächst in der 2. Gleichung des 4. Schritts im Algorithmus (3.22) den Wert $\tilde{x}_i^{(k)}$ durch den Gauß-Seidel-Algorithmus

$$(3.23) \quad x_i^{(k)} = (1 - \omega)x_i^{(k-1)} + \omega \left[\sum_{j=1}^{i-1} k_{i,j} \cdot x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^n k_{i,j} \cdot x_j^{(k-1)} + c_i \right] \text{ für } i = 1, 2, \dots, n$$

bzw. in Matrix-Schreibweise

$$(3.24) \quad Ix^{(k)} = (1 - \omega)x^{(k-1)} + \omega \left[Lx^{(k)} + Ux^{(k-1)} + c \right]$$

Wird diese Gleichung nun nach $x^{(k)}$ aufgelöst und neu geordnet, so ergibt sich

$$(3.25) \quad x^{(k)} = (I - \omega L)^{-1} \left[(1 - \omega)I + \omega U \right] x^{(k-1)} + (I - \omega L)^{-1} \omega D^{-1} b$$

und damit die Fixpunkt-Notation des SOR-Verfahrens

$$(3.26) \quad x^{(k)} = H(\omega)x^{(k-1)} + c_{\text{SOR}}(\omega)$$

$$\text{mit } H(\omega) = (I - \omega L)^{-1} \left[(1 - \omega)I + \omega U \right] \text{ und } c_{\text{SOR}}(\omega) = (I - \omega L)^{-1} \omega D^{-1} b$$

Bemerkung:

Aus der Gleichung (3.3) folgt für das von ω abhängige B der allgemeinen Fixpunkt-Notation:

$$(3.27) \quad B(\omega) = \frac{1}{\omega} D(I - \omega L).$$

Über den Spektralradius der Iterationsmatrix $H(\omega)$ lassen sich folgende qualitative Aussagen machen (die Beweise finden sich in der jeweils angegebenen Literatur):

Satz (Kahan) ([1], S. 249)

$$(3.28) \quad \text{Für beliebige Matrizen } A \text{ gilt : } S(H(\omega)) \geq |\omega - 1| \text{ für alle } \omega \in \mathbb{R}$$

Nach Satz (3.7) konvergiert auch das SOR-Verfahren nur dann, wenn gilt

$$(3.29) \quad S(H(\omega)) < 1$$

Bemerkung:

Mit dem Satz von Kahan folgt, daß diese Bedingung nur erfüllbar ist, wenn ω im offenen Intervall $(0, 2)$ liegt.

Satz (Ostrowski, Reich) ([1], S. 249)

$$(3.30) \quad \text{Ist eine Matrix } A \text{ positiv definit, so folgt } S(H(\omega)) < 1 \text{ für alle } \omega \in (0, 2).$$

Satz ([4], S. 125)

$$(3.31) \quad \text{Sei die Matrix } A \text{ eine L-Matrix. Konvergiert das Jacobi-Verfahren (d.h. } S(J) < 1 \text{) und ist } 0 < \omega_1 \leq \omega_2 \leq 1, \text{ dann gilt}$$

$$S(H(\omega_1)) \leq S(H(\omega_2)) < 1.$$

Bemerkung: ([4], S. 126)

Die Funktion $S(H(\omega))$ ist im Intervall $(0, 1)$ monoton fallend. Unter der Annahme, daß die von ω abhängige Funktion $S(H(\omega))$ stetig ist, kann man erwarten, daß $S(H(\omega)) < 1$ für $0 < \omega \leq \bar{\omega}$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$. Die Bedingung $\bar{\omega} < 2$ wird durch die Aussage des Satzes (3.28) geliefert.

Für spezielle lineare Gleichungssysteme läßt sich nun aus (3.31) die Folgerung (3.32) ziehen:

Folgerung

(3.32) Sei die Koeffizientenmatrix A des linearen Gleichungssystems irreduzibel und das schwache Zeilensummenkriterium erfüllt. Weiter sei die Iterationsmatrix J des Jacobi-Verfahrens eine L -Matrix, d.h. A sei insbesondere nichtnegativ. Dann ist das SOR-Verfahren konvergent für alle $\omega \in (0, \bar{\omega}]$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$.

3.5 Wahl des optimalen Relaxationsparameters ω_b beim SOR-Verfahren

Für eine bestimmte Klasse von linearen Gleichungssystemen kann der optimale Relaxationsparameter ω_b explizit angegeben werden. Dabei ist ω_b durch die folgende Eigenschaft charakterisiert ([1], S. 256)

$$(3.33) \quad S(H(\omega_b)) = \min_{\omega \in (0,2)} S(H(\omega))$$

Der optimale Relaxationsparameter kann für lineare Gleichungssysteme explizit angegeben werden, wenn deren Koeffizientenmatrizen konsistent geordnet ist. Diese und einige andere Eigenschaften einer Matrix A wurden von Young [4] eingeführt. Die wichtigsten Definitionen und Sätze seien hier kurz aufgeführt.

Definition ([4], S. 144)

(3.34) Zwei Zahlen $i, j \in \mathbb{N}$ sind bezüglich der Matrix A zusammenhängend, wenn gilt:
 $a_{i,j} \neq 0$ oder $a_{j,i} \neq 0$.

Definition ([4], S. 145)

(3.35) Der Vektor $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ mit $\gamma_i \in \mathbb{N}$ für $i = 1, 2, \dots, n$, wird als geordneter Vektor der Matrix A mit der Ordnung n bezeichnet, wenn für alle zusammenhängenden Zahlen i, j mit $i \neq j$ gilt

$$|\gamma_i - \gamma_j| = 1.$$

Definition ([4], S. 145)

(3.36) Ein geordneter Vektor einer Matrix A ist ein kompatibel geordneter Vektor von A , wenn gilt

$$\gamma_i - \gamma_j = 1 \quad \text{wenn } i, j \text{ zusammenhängend und } i > j$$

$$\gamma_i - \gamma_j = -1 \quad \text{wenn } i, j \text{ zusammenhängend und } i < j$$

Definition ([4], S. 144)

(3.37) Eine Matrix der Ordnung n ist konsistent geordnet, wenn es ein t gibt, so daß für die nicht leeren Teilmengen S_k von $W = \{1, 2, \dots, n\}$ gilt

$$\bigcup_{k=1}^t S_k = \{1, 2, \dots, n\} \quad \text{und} \quad \bigcap_{k=1}^t S_k = \{ \}$$

und, wenn i, j zusammenhängend sind, gilt

$$i \in S_k, \quad j \in \begin{cases} S_{k+1} & \text{wenn } j > i \\ S_{k-1} & \text{wenn } j < i \end{cases}$$

Mit Hilfe dieser Definitionen kann nun der folgende Satz bewiesen werden:

Satz ([4], S. 146)

(3.38) Eine Matrix A ist konsistent geordnet \iff Es existiert ein kompatibel geordneter Vektor von A.

Young gibt in [4], S. 158-161 einen Algorithmus an (siehe Anhang 3), mit dem eine beliebige quadratische Matrix auf konsistente Ordnung untersucht werden kann. Verläuft dieser Test positiv, d.h. ist die Koeffizientenmatrix A des LGS konsistent geordnet, so kann der folgende von Young und Varga bewiesene Satz angewendet werden.

Satz (Young, Varga) ([1], S. 256)

(3.39) Sei A eine konsistent geordnete Matrix mit nichtverschwindenden Diagonalelementen. Ferner seien die Eigenwerte von J reell und es gelte $S(J) < 1$. Dann gilt

$$(3.39a) \quad \omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - S(J)^2}}$$

und

$$(3.39b) \quad S(H(\omega_b)) = \omega_b - 1 = \left(\frac{S(J)}{1 + \sqrt{1 - S(J)^2}} \right)^2$$

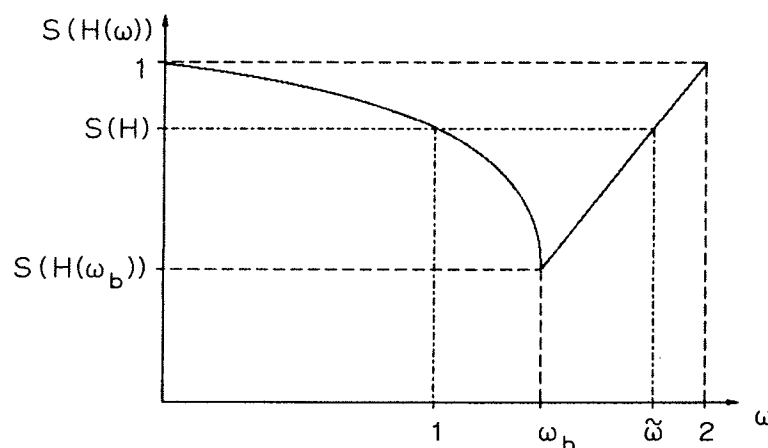
Allgemein gilt ([4], S. 173)

$$(3.39c) \quad S(H(\omega)) = \begin{cases} 1 - \omega + \frac{1}{2} \omega^2 \mu^2 + \omega \mu \sqrt{1 - \omega + \frac{1}{4} \omega^2 \mu^2} & \text{für } 0 < \omega \leq \omega_b \\ \omega - 1 & \text{für } \omega_b \leq \omega < 2 \end{cases}$$

mit $\mu := S(J)$

Die folgende Abbildung (3.1) veranschaulicht den Zusammenhang zwischen dem Relaxationsparameter ω und dem Spektralradius der Iterationsmatrix des SOR-Verfahrens bei einem gegebenen Spektralradius der Matrix J (hier wurde $S(J) = 0.9$ gewählt).

(Abb. 3.1)



Bemerkungen;

- 1) Aus dem Satz (3.39c) folgt, daß unter den Voraussetzungen des Satzes (3.39) das SOR-Verfahren konvergent ist für alle $\omega \in (0, 2)$.

2) Zumindest im Intervall $(1, \tilde{\omega})$ mit $\tilde{\omega} \in (1, 2)$, ist für das SOR-Verfahren eine höhere Konvergenzgeschwindigkeit als beim Gauß-Seidel-Verfahren zu erwarten, da dann wegen der Bemerkung zu Satz (3.31) gilt: $S(H(\omega)) < S(H)$. Die obere Schranke des Intervalls $(1, \tilde{\omega})$ läßt sich dabei mit Hilfe der Aussage (3.39c) berechnen. Es gilt für $\omega = 1 < \omega_b$

$$(3.40) \quad S(H(\omega = 1)) = S(J)^2$$

Da $\tilde{\omega}$ im Intervall $(\omega_b, 2)$ liegt, folgt für $\tilde{\omega} > \omega_b$

$$(3.41) \quad \tilde{\omega} = S(J)^2 + 1$$

Nachdem jetzt die Werkzeuge für die Lösung großer linearer Gleichungssysteme bereitstehen, soll im nächsten Abschnitt auf die Anwendung dieser Werkzeuge bei der Lösung der Strömungsgleichung eingegangen werden.

3.6 Lösung der Strömungsgleichung mit dem SOR-Verfahren

Bei der Auswahl eines geeigneten Verfahrens zur Lösung der bei der Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen erzeugten linearen Gleichungssysteme erweist sich das SOR-Verfahren als das einfachste Verfahren hinreichender Leistungsfähigkeit. Besonders bei optimaler Wahl des Relaxationsparameters ω ist die Konvergenzgeschwindigkeit erheblich größer als beim Gauß-Seidel- oder Jacobi-Verfahren.

Das SOR-Verfahren konvergiert jedoch nicht für alle linearen Gleichungssysteme. Es ist daher zunächst zu zeigen, daß die durch die Diskretisierung der Strömungsgleichung erzeugten LGS für bestimmte ω immer konvergieren.

3.6.1 Beweis der Konvergenz des SOR-Verfahrens für spezielle LGS

Für den Beweis der Konvergenz des SOR-Verfahrens kann der Satz von Ostrowski (3.30) nicht herangezogen werden, da er nur für positiv definite Matrizen A (mit $Ax = b$) erfüllt ist. Positiv definite Matrizen sind aber nach Definition symmetrisch ([3], S. 16f), was bei den durch die Modellierung von Grundwasserströmen erzeugten LGS in der Regel nicht der Fall ist ([8], S. 186).

Satz

(3.42) Für alle durch Diskretisierung der Strömungsgleichung auf einem Gebiet G entstehenden linearen Gleichungssysteme konvergiert das SOR-Verfahren für $\omega \in [0, \bar{\omega}]$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$, wenn mindestens in einem Randpunkt von G der Wert der Lösungsfunktion h bekannt ist.

Beweis

Zu zeigen ist:

1. Das schwache Zeilensummenkriterium (3.14) ist für die Koeffizientenmatrix A des LGS immer erfüllt.
2. A ist irreduzibel (3.15b).
3. Die Iterationsmatrix J ist eine L-Matrix.

Können die Punkte 1 und 2 gezeigt werden, so ist für dieses LGS das Jacobi-Verfahren nach (3.14) konvergent. Ist die Iterationsmatrix des Jacobi-Verfahrens zusätzlich eine L-Matrix,

so existiert nach (3.31) ein Intervall $[0, \bar{\omega}]$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$ für dessen Elemente ω das SOR-Verfahren konvergiert, d.h. $S(H(\omega)) < 1$.

Zu 1) Die Koeffizientenmatrix A des bei der Diskretisierung der Strömungsgleichung entstehenden LGS ist nur schwach besetzt (siehe Gleichung (2.9) und (2.33)). Die Einträge beschränken sich in jeder Zeile auf die Besetzung der Hauptdiagonale sowie von vier weiteren Nebendiagonalen. Die Elemente der Hauptdiagonalen werden dabei nach (2.33) aus der Summe von vier gemittelten (oder explizit eingegebenen) und durch das Quadrat der Gitterweite dividierten Transmissivitäten gebildet. Diese Werte sind nach der Definition der Transmissivitäten immer größer gleich Null. Die Nebendiagonalelemente werden jeweils durch diese mit einem negativen Vorzeichen versehenen Werte gebildet. Damit kann gefolgert werden, daß gilt:

$$|a_{i,i}| \geq \sum_{\substack{m=1 \\ l \neq m}}^n |a_{i,m}| \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n \quad \text{mit } n = n_x \cdot n_y.$$

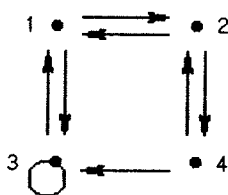
Die Bedingung

$$|a_{i,i}| > \sum_{\substack{m=1 \\ l \neq m}}^n |a_{i,m}| \quad \text{für mindestens ein } l \in \{1, 2, \dots, n\}$$

ist immer dann erfüllt, wenn mindestens für einen Randpunkt des Gebietes G der Wert der Lösungsfunktion h bekannt ist. In diesem Fall verschwindet der entsprechende Wert in der Koeffizientenmatrix A und taucht in der Inhomogenität auf. \square

Zu 2) Eine Matrix A kann reduzibel sein, wenn ein Weg im Graphen $G(A)$ vom Knoten P_i zwar wegführt (hinführt), der Weg in Gegenrichtung aber nicht existiert. A ist reduzibel, wenn zu P_i keine Wege hinführen und keine wegführen.

Beispiel



Die zu dem Beispielgraphen gehörende Matrix A ist irreduzibel. Reduzibel wäre sie erst dann, wenn auch der Weg $(P_1 \rightarrow P_2)$ entfallen würde oder alle Wege zum und vom Punkt 4 abgeschnitten wären.

Für einen Knoten K_i (globale Indizierung) im Diskretisierungsgitter gibt es nun mehrere Möglichkeiten, die bei der Berührung des Diskretisierungsternes mit dem Rand von G auftreten (siehe auch Kapitel 3.6.2.):

1. Der w -Wert von K_i ist neu zu berechnen

1.1.1 Die lokale Transmissivität in K_i und die in mindestens einem seiner Nachbarknoten ist größer Null. Der w -Wert dieses Nachbarknotens K_j ist ebenfalls zu berechnen.

Aus der Differenzengleichung (2.33) folgt dann für die Elemente $a_{i,j}$ und $a_{j,i}$ der Koeffizientenmatrix A

$$a_{i,j} \neq 0 \quad \text{und} \quad a_{j,i} \neq 0.$$

Daraus ergeben sich die gerichteten Wege in $G(A)$

$$P_i \rightarrow P_j \quad \text{und} \quad P_j \rightarrow P_i.$$

1.1.2 Die h -Werte aller Nachbarknoten von K_i sind bekannt.

In dieser Situation liefert die Differenzgleichung (2.33) eine Gleichung mit einer einzigen Unbekannten w_i , deren Wert direkt berechenbar ist.

1.1.3 Die lokale Transmissivität in K_i ist 0.

Mit (2.29) folgt, daß die Transmissivitäten zwischen dem Knoten K_i und seinen bis zu vier Nachbarknoten dann ebenfalls Null sind. Für die Elemente $a_{i,j}$ und $a_{j,i}$ der Koeffizientenmatrix A ergibt sich in dieser Situation:

$$a_{i,j} = 0 \quad \text{und} \quad a_{j,i} = 0.$$

Ein Weg von P_i nach P_j in $G(A)$ oder umgekehrt existiert nicht.

Nach dem Darcy'schen Gesetz (1.14) kann zwischen einem solchen Punkt und seinen Nachbarknoten kein Massentransport stattfinden. Um den Knoten K_i herum verläuft also ein undurchlässiger Rand des Strömungsgebietes so, daß der Knoten K_i nicht mehr zu dem Gebiet G gehört auf dem die Strömungsgleichung zu lösen ist.

1.1.4 Die lokalen Transmissivitäten aller Nachbarknoten von K_i sind 0.

Es gilt dann das unter 1.1.3. gesagte analog.

2. Der h -Wert von K_i ist bekannt und braucht nicht berechnet zu werden

Der bekannte h -Wert im Knoten K_i tritt in den Inhomogenitäten aller der bis zu vier Gleichungen auf, mit denen die w_j -Werte in den bis zu vier unmittelbaren Nachbarknoten K_j des Knotens K_i berechnet werden. Für die Elemente $a_{i,j}$ und $a_{j,i}$ der Koeffizientenmatrix A gilt:

$$a_{i,j} = 0 \quad \text{und} \quad a_{j,i} = 0.$$

Ein Weg von P_i nach P_j in $G(A)$ oder umkehrt existiert nicht.

Streichet man im LGS für alle die K_i , deren w -Werte nicht neu berechnet werden müssen (siehe Punkte (1.1.3), (1.1.4) und (2)), die entsprechenden Zeilen und Spalten, so erhält man eine irreduzible Matrix. Dieser Vorgang ist äquivalent zu einer Umnummerierung der Knoten innerhalb des Gebietes mit entsprechender Neubildung des LGS. Die Knoten des Gebietes werden dabei so nummeriert, daß im LGS nur noch die Knoten auftauchen, deren Werte tatsächlich neu berechnet werden müssen. \square

Bemerkung:

Eine so durch Zeilen- und Spalten-Streichung bzw, durch Umnummerierung gebildete Matrix A ist nicht mehr symmetrisch und kann damit nicht positiv definit sein.

Zu 3) Die Iterationsmatrix J ist eine L -Matrix, wenn die Matrix A positive Diagonalelemente und nichtpositive Nichtdiagonalelemente besitzt, d.h.

$$a_{l,l} > 0 \quad \text{für } l = 1, 2, \dots, n$$

und

$$a_{l,m} \leq 0 \quad \text{für } l \neq m$$

Diese Bedingung ist für alle Punkte, deren w -Werte zu berechnen sind, durch die Gleichung (2.33) erfüllt. Wird A nach der Betrachtung in 2) nur für solche Punkte gebildet, so ist die Iterationsmatrix J eine L -Matrix. \square

Vor der Einführung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des optimalen Relaxationsparameters sei zunächst ein modifizierter Algorithmus für das im SOR -Verfahren benutzte Gauß-Seidel-Verfahren angegeben, der die Bandstruktur des LGS ausnutzt.

3.6.2 Modifizierter Gauß-Seidel-Algorithmus

Die bei der Diskretisierung der Strömungsgleichung für den Punkt (i,j) entstehende Differenzgleichung enthält maximal fünf Werte des Potentials w (siehe Gleichung (2.33)). Der Gauß-Seidel-Algorithmus (3.19) und somit auch der SOR -Algorithmus läßt sich daher im Bereich der Summenbildung erheblich vereinfachen bzw. beschleunigen. Es braucht in diesem Fall nicht über alle Elemente einer Zeile multipliziert und aufaddiert werden, sondern nur über die maximal fünf Koeffizienten, die ungleich Null sind. Für diese fünf Koeffizienten ergibt sich mit $E_l = A_l + B_l + C_l + D_l$ ($l = (i-1) \cdot nx + j$, $i = 1, 2, \dots, ny$, $j = 1, 2, \dots, nx$)

$$(3.43a) \quad k_{l, l-nx} = -\frac{a_{l, l-nx}}{a_{l, l}} = -\frac{-A_l}{E_l} = \frac{A_l}{E_l} \quad \left(= \frac{T_{l, l-1, j}}{E_l} \right)$$

$$(3.43b) \quad k_{l, l-1} = -\frac{a_{l, l-1}}{a_{l, l}} = -\frac{-B_l}{E_l} = \frac{B_l}{E_l} \quad \left(= \frac{T_{l, j-1}}{E_l} \right)$$

$$(3.43c) \quad k_{l, l+1} = -\frac{a_{l, l+1}}{a_{l, l}} = -\frac{-C_l}{E_l} = \frac{C_l}{E_l} \quad \left(= \frac{T_{l, j}}{E_l} \right)$$

$$(3.43d) \quad k_{l, l+nx} = -\frac{a_{l, l+nx}}{a_{l, l}} = -\frac{-D_l}{E_l} = \frac{D_l}{E_l} \quad \left(= \frac{T_{l, j}}{E_l} \right)$$

$$(3.43e) \quad \text{und} \quad c_l = \frac{b_l}{a_{l, l}} = \frac{q_{l, j}}{E_l}$$

Der Gauß-Seidel-Algorithmus läßt sich nun wie folgt formulieren:

- (3.44)
- 1) Wähle einen Startvektor $w_i^{(0)}$; $i = 1, 2, \dots, n$
 - 2) Setze $k := 0$
 - 3) $k := k + 1$
 - 4) für $i = 1, 2, \dots, ny$
 - für $j = 1, 2, \dots, nx$
 - $l := (i-1) * nx + j$
 - wenn $E_l \neq 0$ dann
 - $w_l^{(k)} := k_{l, l-nx} w_{l-nx}^{(k)} + k_{l, l-1} w_{l-1}^{(k)} + k_{l, l+1} w_{l+1}^{(k-1)} + k_{l, l+nx} w_{l+nx}^{(k-1)} + c_l$
 - 5) $\max_{ab} := \max_i |w_i^{(k-1)} - w_i^{(k)}|$; $i = 1, 2, \dots, n$
 - 6) $w^{(k-1)} := w^{(k)}$
 - 7) Wiederhole die Schritte 3, ..., 7 bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist.
 - 8) $w^{(k)}$ ist eine Näherung der gesuchten Lösung w^* .

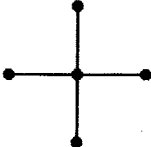
Bei einer Implementation auf einer Rechenanlage, wird man die folgenden Überlegungen anstellen um den Algorithmus (3.44) zu optimieren:

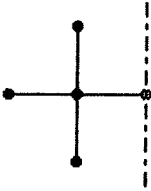
- 1) Es ist nicht sinnvoll, zwei unterschiedliche Vektoren w ($w^{(k)}$ und $w^{(k-1)}$) im Speicher zu halten. Nach der Bemerkung zum Gauß-Seidel-Verfahren (3.19) kann vielmehr das berechnete Ergebnis direkt in den Vektor geschrieben werden, der auch als Berechnungsgrundlage dient. Es gibt dann nur noch einen Vektor w . Dieser enthält vor dem Durchlauf der beiden geschachtelten Schleifen das Ergebnis aus der Iterationsstufe $(k-1)$ und nach dem Durchlauf das Ergebnis aus der Stufe (k) .
Zur Kontrolle der Abbruchbedingung muß dann jedoch eine Hilfsvariable (z.B. d) eingeführt werden. Diese Variable erhält vor Durchführung der Berechnungsformel den Wert von w_1 (in globaler Indizierung) zugewiesen. Nach der Berechnung wird die maximale Abweichung (\max_{ab}) als $\max(\max_{ab}, |d - w_1|)$ berechnet.
- 2) Bei der Berechnung der w -Werte von Knoten l , die in Randnähe bzw. auf dem Rand des Gebietes liegen, können die Indizes $(l-nx, l+nx)$ weit über die eigentlichen Dimensionsgrenzen des Vektors w hinausreichen. Ist z.B. $l < nx$, so erfolgt ein Zugriff auf einen negativen Index des Vektors. Ist der Vektor nur als `ARRAY[1..n] OF REAL` (in Pascal-Notation) definiert, kann es abhängig vom verwendeten Compiler zu einem Laufzeitfehler kommen. Um dies zu verhindern, muß entweder die Dimension des Vektors vergrößert oder eine Abfrage auf Dimensionsgrenzen durchgeführt werden (z.B. Wenn $l - nx \geq 1$, dann ...). Ebenfalls möglich wäre eine gesonderte Programmierung von Berechnungsalgorithmen für diese unvollständigen Differenzgleichungen.
Wird die lokale Indizierung beibehalten, kann bei der Berechnung der w -Werte dieser Knoten, auf w - und h -Werte mit den Indizes $(0, j)$, $(ny+1, j)$, $(i, 0)$ und $(i, nx+1)$ ($i = 1, 2, \dots, ny$, $j = 1, 2, \dots, nx$) zugegriffen werden. In diesem Fall empfiehlt sich eine Erweiterung der Dimensionsgrenzen des ARRAY's und eine Nullsetzung des Randstreifens.
- 3) Bei der Berechnung in lokaler Indizierung, ist es nicht sinnvoll die Matrix K explizit zu berechnen und zu speichern. Stattdessen kann der jeweils benötigte Koeffizient den beiden Matrizen T_I und T_J entnommen werden, die entweder explizit eingegeben werden (Rusthon/Redshaw [5]) oder aus den lokalen Transmissivitäten berechnet werden (Kinzelbach [6]).

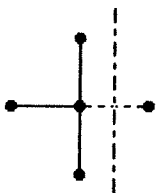
Mit diesen Überlegungen kann der folgende Algorithmus formuliert werden.

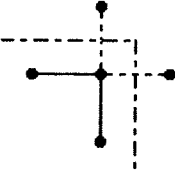
- (3.45)
- 1) Wähle Startbelegung für $w_{i,j}$ ($i = 1, 2, \dots, ny$; $j = 1, 2, \dots, nx$)
 - 2) Setze $k := 0$
 - 3) $k := k + 1$
 - 4) $\max_{ab} := -1$
 - 5) für $i = 1, 2, \dots, ny$
 - für $j = 1, 2, \dots, nx$
 - $d := w_{i,j}$
 - Nenner := $T_{I_{i-1,j}} + T_{J_{i,j-1}} + T_{J_{i,j}} + T_{I_{i,j}}$
 - Wenn Nenner $\neq 0$ dann
 - $w_{i,j} := \frac{T_{I_{i-1,j}} w_{i-1,j} + T_{J_{i,j-1}} w_{i,j-1} + T_{J_{i,j}} w_{i,j+1} + T_{I_{i,j}} w_{i+1,j} + q_{i,j}}{\text{Nenner}}$
 - $\max_{ab} := \max(\max_{ab}, |d - w_{i,j}|)$
 - 6) Wiederhole die Schritte 3,...,6 bis $\max_{ab} < \epsilon$
 - 7) w ist eine Näherung der gesuchten Lösung w^*

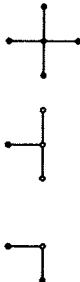
Um eine größtmögliche Flexibilität eines Programmsystems bei gleichzeitig einfachen Anforderungen an den Anwender zu erreichen, habe ich im Programm GWF die Kinzelbach-Methode gewählt. Die Transmissivitäten T_I und T_J werden dabei wie in Kapitel 2.6 dargestellt aus den eingegebenen lokalen Transmissivitäten berechnet. Bedingt durch die Division der gemittelten Transmissivitäten durch das Quadrat der Gitterweite Δx bzw. Δy und der Beschränkung auf einen globalen Anisotropiefaktor, sind bei der Berechnung der w -Werte randnaher bzw. auf dem Rand von G liegender Knoten folgende Situationen zu beachten (siehe auch S. 33): (Für die Abbildungen gilt im weiteren: Mittelpunkt des Diskretisierungsterns ist der Punkt (i,j) in lokaler Indizierung, volle Kreise stellen Punkte dar, deren Werte berechnet werden müssen, leere Kreise stellen Punkte dar, deren Werte bekannt sind.)

1)  Vollständiger Diskretisierungstern. Für diese Situation ist der Algorithmus konstruiert.

2)  Vollständiger Diskretisierungstern mit bekanntem w -Wert für mindestens einen Nachbarpunkt. In der Differenzgleichung (2.33) ist es unerheblich ob die w -Werte im Nachbarpunkte bekannt sind, berechnet wurden oder noch berechnet werden müssen. Zu beachten ist, daß hier nicht das für den theoretischen Konvergenzbeweis benutzte LGS aufgestellt wird, sondern das Gebiet Punkt für Punkt durch den Algorithmus (3.45) neu berechnet wird.

3)  Der Diskretisierungstern liegt in Randnähe. Hier greift der Algorithmus bei der Berechnung auf Werte außerhalb der Wertematrix zu (im abgebildeten Fall auf $w_{i,j+1}$). Die Matrix muß also dementsprechend dimensioniert sein (ARRAY [0..ny+1,0..nx+1]). Da die zugehörige Transmissivität (hier $T_{J_{i,j}}$) gleich Null ist (siehe S.33), geht der nicht bekannte und nicht benötigte Wert ($w_{i,j+1}$) nicht in die Berechnung ein.

4)  Der Mittelpunkt des Diskretisierungsterns liegt nahe einem Eckpunkt. Es gilt das unter 3) gesagte analog.

5)  Der h -Wert des Punktes (i,j) ist bekannt und braucht daher nicht berechnet werden. In einem flexiblen Programmsystem muß diese Situation dem Berechnungsalgorithmus mitgeteilt werden. Als Speicher für die Information "h-Wert bekannt" bzw. "h-Wert unbekannt" benutzt Kinzelbach den Speicherkoeffizienten $S_{i,j}$. Kinzelbach beschäftigt sich zwar überwiegend mit instationären Situationen, die Anwendung von $S_{i,j}$ als Schalter oder Flag bleibt jedoch die gleiche ([6], S. 27 und S.51).

- 6) Die lokalen Transmissivitäten in (i,j) bzw. die in allen Nachbarpunkten ist Null. Hier wird der Nenner 0 und der Algorithmus verhindert eine Berechnung, der Wert bleibt erhalten ($w_{i,j}^{(k)} = w_{i,j}^{(k-1)}$). Dieses Verhalten ist erwünscht (siehe Punkt (1.1.3) und (1.1.4) im Beweis zu Satz (3.42)).

Aus diesen Betrachtungen folgt, daß zur korrekten Modellierung der Strömung über einem Gebiet der Algorithmus (3.45) nur für die Situation 5) erweitert werden muß.

Gauß-Seidel-Algorithmus nach Kinzelbach ([6], S. 51f)

- (3.46) 1) Wähle Startbelegung für $w_{i,j}$ ($i = 1,2,\dots,ny; j = 1,2,\dots,nx$)
 2) Setze $k := 0$
 3) $k := k + 1$
 4) $\text{maxab} := -1$
 5) für $i = 1,2,\dots,ny$
 für $j = 1,2,\dots,nx$
 Wenn $S_{i,j} \leq 1$ dann
 $d := w_{i,j}$
 Nenner := $Tl_{i-1,j} + Tj_{i,j-1} + Tj_{i,j} + Tl_{i,j}$
 Wenn Nenner $\neq 0$ dann
 $w_{i,j} := \frac{Tl_{i-1,j} w_{i-1,j} + Tj_{i,j-1} w_{i,j-1} + Tj_{i,j} w_{i,j+1} + Tl_{i,j} w_{i,j} + q_{i,j} + S_{i,j} w_{i,j}^{(o)} / \Delta t}{\text{Nenner} + S_{i,j} / \Delta t}$
 $\text{maxab} := \max(\text{maxab}, |d - w_{i,j}|)$
 6) Wiederhole die Schritte 3,...,6 bis $\text{maxab} < \epsilon$
 7) w ist eine Näherung der gesuchten Lösung w^*

Bemerkung:

Dieser Algorithmus leistet mehr als zur Berechnung stationärer Fälle nötig ist. Eine Berechnung des Wertes $w_{i,j}$ wird verhindert, wenn für $S_{i,j}$ ein Wert größer 1 gewählt wurde. Man beachte, daß ein solcher Wert nach der Definition des Speicherfähigkeitskoeffizienten physikalisch nicht möglich ist. Die Berechnung einer stationären Situation kann durch Nullsetzen von $S_{i,j}$ erreicht werden, da dann die Terme $S_{i,j} w_{i,j}^{(o)} / \Delta t$ im Zähler und $S_{i,j} / \Delta t$ im Nenner wegfallen und der Algorithmus (3.45) gegeben ist. Der Speicherfähigkeitskoeffizient wird also bei der Bearbeitung von stationären Situationen als eine Art Schalter (oder Flag) benutzt.

3.7 Wahl eines für das SOR-Verfahren optimalen Relaxationsparameters ω_{opt} für die durch Diskretisierung der Strömungsgleichung entstehenden linearen Gleichungssysteme

Bei der Anwendung des SOR-Verfahrens zur Lösung großer linearer Gleichungssysteme ist man bestrebt, den Relaxationsparameter nach Möglichkeit so zu wählen, daß der Spektralradius der Iterationsmatrix $H(\omega)$ minimal ist (siehe auch (3.33)).

Der Parameter ω_b , für den der Spektralradius der Iterationsmatrix $H(\omega)$ minimal ist, bzw. ein Parameters ω_{opt} , für den die Anzahl der benötigten Iterationen minimal wird, läßt sich auf verschiedene Art und Weise bestimmen. Im Folgenden werden vier dieser Möglichkeiten vorgestellt.

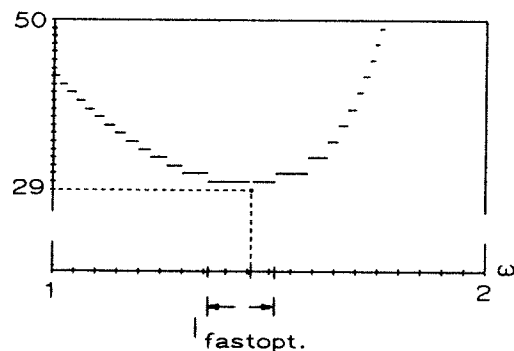
3.7.1 Bestimmung durch Versuch (Methode 1)

Diese Möglichkeit ist sicher die einfachste aber auch die zeitaufwendigste. Die Idee ist dabei folgende:

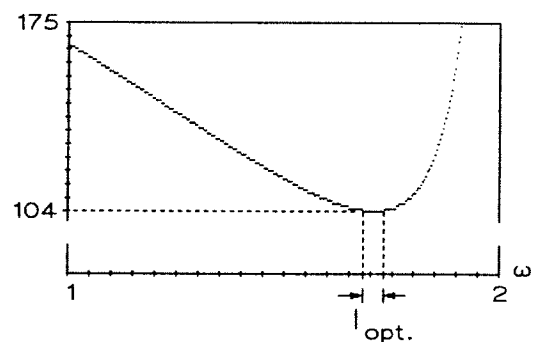
Das Intervall aus dem ω zu wählen ist (nach dem Satz von Kahan (3.28) kommt nur $\omega \in (0,2)$ in Frage), ist in beliebig kleine Schritte mit der Länge Δs zu unterteilen ($\omega_i = i \cdot \Delta s$, $\Delta s = 2/m$, $i = 0,1,2,\dots,m$, $m = \text{Anzahl der Schritte}$). Anschließend wird für alle $i = 1,2,\dots,m$ das SOR-Verfahren mit ω_i angewendet. Der optimale Relaxationsparameter liefert notwendigerweise die schnellste Konvergenz, d.h., die minimale Anzahl der Iterationen, die zur Erfüllung des Abbruchkriteriums benötigt werden, wird bestimmt.

Zur Darstellung der Abhängigkeit der Iterationsanzahl vom Relaxationsparameter in den Abbildungen (3.2a) und (3.2b) habe ich das SOR-Verfahren für 400 verschiedene ω im Intervall $[1,2)$ gestartet und die Anzahl der benötigten Iterationen gegen den Relaxationsparameter aufgetragen. Die berechneten Probleme entsprachen dem Modellproblem aus [6], S. 32.

(Abb. 3.2a) 7x7 - Gitter



(Abb. 3.2b) 19x19 - Gitter



Bemerkungen:

- 1) Wie den Abbildungen zu entnehmen ist, führen häufig mehrere verschiedene Relaxationsparameter zur gleichen Anzahl von Iterationen. Die benötigte Anzahl von Iterationen ist dabei immer eine Zahl aus der Menge der natürlichen Zahlen. Es kommt daher zu einem treppenartigen Verlauf der Funktion.
- 2) Das Intervall, aus dem ω zur Erlangung einer minimalen Anzahl von Iterationen zu wählen ist, wird von mir im weiteren I_{opt} genannt (Abb. 3.2b). Die Elemente von I_{opt} heißen ω_{opt} . Häufig ist es ausreichend, ω aus einem Intervall I_{fastopt} (Abb. 3.2a) zu wählen, für dessen Elemente ω_{fastopt} das SOR-Verfahren nur eine Iteration mehr als bei optimaler Wahl von ω benötigt. Der Relaxationsparameter ω_{p} , für den der Spektralradius der Iterationsmatrix $H(\omega)$ minimal ist, ist ein Element des Intervalls I_{opt} .
- 3) Während in der theoretischen Diskussion des SOR-Verfahrens versucht wird, ω so zu wählen, daß der Spektralradius der Iterationsmatrix minimal ist, kommt es in der Praxis auf die minimale Anzahl der benötigten Iterationen an. Besonders aus der Abbildung (3.2b) ist ersichtlich, daß die Wahl eines zu kleinen Relaxationsparameters weniger starke Auswirkungen auf die Anzahl der Iterationen hat als die Wahl eines zu großen Relaxationsparameters.

In der Literatur wird ω_b häufig mit bis zu fünfstelliger Genauigkeit angegeben (z.B. Tabellen in [4], S. 177-185). Entsprechend müßte zur Ermittlung eines Intervalls I_{opt} nach dem oben angeführten Verfahren das SOR-Verfahren 10.000-mal gestartet werden. Da ω_b ein Element von I_{opt} ist, ist darüberhinaus eine genaue Bestimmung von ω_b nicht möglich. Die große Zahl von Tests zur Ermittlung der Intervallgrenzen von I_{opt} kann jedoch drastisch verringert werden.

- 1) Aus der Folgerung (3.32) ergibt sich, daß das Intervall, aus dem ω zu wählen ist, verkleinert werden kann. Nur für $\omega \in (0, \bar{\omega}]$ mit $1 < \bar{\omega} < 2$ ist das SOR-Verfahren konvergent. Da das SOR-Verfahren für $\omega = 1$ dem Gauß-Seidel-Verfahren entspricht (Kapitel 3.4) und die Funktion $S(H(\omega))$ monoton fallend ist (3.31), genügt es, den optimalen Relaxationsparameter im Intervall $[1, \bar{\omega}]$; $1 < \bar{\omega} < 2$ zu suchen. Wegen Satz (3.31) empfiehlt es sich bei der Suche nach ω_{opt} außerdem, von $\omega = 1$ zu höheren Werten voranzuschreiten.
- 2) Eine weitere Verminderung der Tests läßt sich durch Intervallschachtelung erreichen. Man beginnt die Tests mit einem ω , das sicher kleiner ist als ω_b (z.B. $\omega = 1$). Das Verfahren konvergiert für diesen Parameter nach Satz (3.42). Die Anzahl der Iterationen, die benötigt werden, um das Abbruchkriterium zu erfüllen, wird gespeichert. Anschließend inkrementiert man ω um $1/10$ und wiederholt den Test. Die jetzt benötigte Anzahl von Iterationen wird mit der aus dem vorherigen Test verglichen. Gespeichert werden das Minimum der beiden Anzahlen und der zugehörige Relaxationsparameter. Diese Prozedur wird solange durchlaufen, bis die Anzahl der Iterationen größer ist als die im Test vorher. Ausgehend von dem ω , das zum ersten Mal die minimale Anzahl von Iterationen lieferte, wird eine neue Testreihe mit einem Inkrement von $1/100$ gestartet. Der optimale Relaxationsparameter wird abschließend aus dem Mittelwert der unteren und der oberen Intervallgrenze des ermittelten Intervalls I_{opt} berechnet.

Bemerkungen:

- 1) Ist das Intervall I_{opt} sehr klein ($|\omega_{opt1} - \omega_{opt2}| < 1/100$), so kann es passieren, daß das Intervall durch den vorgestellten Algorithmus nicht bestimmt wird, weil es durch das gewählte Raster fällt. Erfahrungsgemäß ist das Intervall $I_{fastopt}$ jedoch wesentlich größer und wird daher sicher bestimmt (siehe auch (Abb. 3.2a)).
- 2) Für die praktische Anwendung ist die Bestimmung von ω_{opt} mit zweistelliger Genauigkeit ausreichend, da kleine Abweichungen auch nur kleine Auswirkungen auf die Anzahl der Iterationen haben (siehe die Abbildungen (3.2)). Eine höhere Genauigkeit würde bei der Bestimmung von ω_{opt} zu Rechenzeiten führen, die in keinem Verhältnis zur erzielten Wirkung stehen würden.

Dieses Verfahren ist sehr intuitiv, liefert aber auf jeden Fall Parameter, mit denen die Anzahl der Iterationen minimiert werden kann. Es ist als Methode 1 im Programm GWF implementiert. Ein ähnliches Verfahren wird in [7] (S. 237 - 241) vorgestellt.

Während das oben vorgestellte Verfahren auf alle linearen Gleichungssysteme angewendet werden kann (wenn diese konvergieren), beschränken sich die beiden nächsten auf Systeme, deren Koeffizientenmatrizen konsistent geordnet sind.

3.7.2 Bestimmung von ω_{opt} mit dem Satz von Young (3.39) (Methode 2)

Ist die Koeffizientenmatrix des LGS eine konsistent geordnete L-Matrix, und sind die Eigenwerte von J reell und $S(J) < 1$, dann läßt sich der Satz (3.39) anwenden. Der optimale Relaxationsparameter ω_b kann mit diesem Satz explizit bestimmt werden, wenn der Spektralradius der Iterationsmatrix des Jacobi-Verfahrens bekannt ist. Der Spektralradius einer Matrix A ist dabei durch ihren betragsmäßig größten Eigenwert bestimmt (3.6). Eine hinreichend genaue Abschätzung für den Spektralradius einer Iterationsmatrix T , die genau einen dominanten reellen Eigenwert besitzt, läßt sich durch die sogenannte "Potenzmethode" ermitteln ([8], S. 187). Bei der Potenzmethode wird der dominante Eigenwert durch den Quotienten zweier in einer beliebigen Norm genommenen Vektoren abgeschätzt. Die Vektoren sind dabei wie folgt definiert:

$$(3.47) \quad e^{(k+1)} := x^{(k+1)} - x^{(k)}$$

Mit (3.3) läßt sich für die Lösungsvektoren $x^{(k)}$ und $x^{(k+1)}$ auch schreiben:

$$(3.48) \quad x^{(k)} = T x^{(k-1)} + c \quad \text{bzw.} \quad x^{(k+1)} = T x^{(k)} + c$$

Mit den Gleichungen (3.48) ergibt sich für den Vektor $e^{(k+1)}$:

$$(3.49) \quad \begin{aligned} e^{(k+1)} &= T x^{(k)} + c - (T x^{(k-1)} + c) \\ &= T x^{(k)} - T x^{(k-1)} \\ &= T(x^{(k)} - x^{(k-1)}) \\ &= T e^{(k)} \end{aligned}$$

Führt man die Betrachtungen in (3.49) analog für $e^{(k)}$, $e^{(k-1)}$ usw. durch und setzt die erhaltenen Fehlerwerte nacheinander in (3.49) ein, so ergibt sich schließlich:

$$(3.50) \quad e^{(k+1)} = T e^{(k)} = T^2 e^{(k-1)} = \dots = T^{k+1} e^{(0)}$$

Der Vektor $e^{(0)}$ kann nun als Linearkombination der Eigenvektoren v_1, v_2, \dots, v_n von T beschrieben werden:

$$(3.51) \quad e^{(0)} = a_1 v_1 + a_2 v_2 + \dots + a_n v_n$$

Mit den zugehörigen Eigenwerten λ_i (gemäß $T v_i = \lambda_i v_i$; $i = 1, 2, \dots, n$) kann jetzt die Gleichung (3.50) ersetzt werden durch:

$$(3.52) \quad e^{(k+1)} = a_1 \lambda_1^{(k+1)} v_1 + a_2 \lambda_2^{(k+1)} v_2 + \dots + a_n \lambda_n^{(k+1)} v_n$$

Ist λ_1 der betragsmäßig größte Eigenwert von T , so folgt für große k unter Vernachlässigung von Termen mit kleineren Potenzen ([8], S. 188):

$$(3.53) \quad \frac{\|e^{(k+1)}\|}{\|e^{(k)}\|} \approx \frac{|a_1 \lambda_1^{(k+1)}| \cdot \|v_1\|}{|a_1 \lambda_1^{(k)}| \cdot \|v_1\|} = |\lambda_1| = S(T)$$

Mit der Maximumsnorm für $\|\cdot\|$ läßt sich nun ein Algorithmus für die Spektralradius-Abschätzung der Iterationsmatrix T eines iterativen Verfahrens zu Lösung linearer Gleichungssysteme formulieren:

- (3.54)
- 1) Wähle einen Startvektor $x_i^{(0)}$; $i = 1, 2, \dots, n$
 - 2) $x^{(1)} := T x^{(0)} + c$ { Verfahren }
 - 3) $\max_{ab}(1) := \max_i |x_i^{(1)} - x_i^{(0)}|$ über alle $i = 1, 2, \dots, n$
 - 4) Setze $\lambda^{(1)} := 2$, dies gewährleistet, daß das Abbruchkriterium nicht schon im ersten Schritt erfüllt ist.
 - 5) $k := 1$
 - 6) $k := k + 1$
 - 7) $x^{(k)} = T x^{(k-1)} + c$
 - 8) $\max_{ab}(k) = \max_i |x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)}|$
 - 9) $\lambda^{(k)} = \frac{\max_{ab}(k)}{\max_{ab}(k-1)}$
 - 10) Wiederhole die Schritte 6, ..., 10 bis $|\lambda^{(k)} - \lambda^{(k-1)}| < \varepsilon$
 - 11) $S(T) = \lambda^{(k)}$

Mit Hilfe dieses Algorithmusses kann jetzt der Spektralradius der Iterationsmatrix J des Jacobi-Verfahrens abgeschätzt werden und damit auch nach Einsetzen in (3.39a) den Relaxationsparameter ω_B . Die Abschätzung für ω_B wird dabei umso genauer, je kleiner die Abbruchschranke ε bei der iterativen Abschätzung von $S(J)$ gewählt wird.

Mit Hilfe eines weiteren Satzes kann die Anwendung des Jacobi-Verfahrens (und damit seine Implementierung) im Algorithmus (3.54) umgangen werden:

Satz ([1], S. 254f)

- (3.55) A sei eine konsistent geordnete Matrix und $\omega \neq 0$. Dann gilt
- (3.55a) a) Mit μ ist auch $-\mu$ Eigenwert von J .
 - (3.55b) b) Falls μ Eigenwert von J ist und $(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda \omega^2 \mu^2$ gilt, dann ist λ Eigenwert von $H(\omega)$.
 - (3.55c) c) Falls $\lambda \neq 0$ Eigenwert von $H(\omega)$ ist und $(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda \omega^2 \mu^2$ gilt, dann ist μ Eigenwert von J .

Bemerkung:

Für $\omega=1$ erhält man insbesondere $\lambda = \mu^2$. Damit gilt wegen (3.6) auch

$$(3.56) \quad S(H(\omega=1)) = S(J)^2.$$

Die Potenzmethode kann also mit dem SOR-Verfahren mit $\omega=1$ durchgeführt werden. Der Algorithmus (3.54) liefert eine Abschätzung für den Spektralradius von $H(\omega=1)$. Dieser entspricht wegen (3.56) dem Quadrat von $S(J)$ und kann darum direkt in (3.39a) eingesetzt werden.

3.7.3 Methode nach Carré ([8], S. 200 ff)

Young fand, daß die Konvergenzgeschwindigkeit von (3.53) gegen $S(J)$ für praktische Anwendungen zu gering ist ([8], S. 199). Die Anzahl der benötigten Iterationen zur korrekten Abschätzung von $S(H(\omega=1))$ übersteigt häufig sogar die, die das SOR-Verfahren mit dem optimalen Relaxationsparameter zur Lösung des eigentlichen Problems braucht.

Carré bearbeitete deshalb den in 3.7.2 dargestellten Algorithmus und erreichte eine höhere Konvergenzgeschwindigkeit.

Dazu löste er die in Satz (3.55) aufgestellte Gleichung (3.55b) nach μ_{\max} auf und erhielt:

$$(3.57) \quad \mu_{\max}^2 = \frac{(\lambda_{\max} + \omega - 1)^2}{\lambda_{\max} \omega^2} = S(J)^2$$

Der in (3.57) benutzte dominante Eigenwert der Iterationsmatrix des SOR-Verfahrens λ_{\max} wird dabei nach wie vor mit dem Algorithmus (3.54) abgeschätzt. Durch Verwendung eines Relaxationsparameters $\omega > 1$ verbessert sich die Konvergenz gegen $S(J)^2$. Dabei ist zu gewährleisten, daß ω stets kleiner als ω_b ist, da nur dann der dominante Eigenwert der Iterationsmatrix reell ist ([8], S. 200).

Der bei der Abschätzung von λ_{\max} gemachte Fehler hat große Auswirkung auf den mit (3.57) zu berechnenden Wert $S(J)^2$. Das Verfahren von Carré wiederholt daher die Bestimmung von ω_b solange, bis zwei aufeinanderfolgende Abschätzungen ein Konvergenzkriterium erfüllen. Nach der Bemerkung zur Abbildung (3.2) reicht $|\omega^{(k-1)} - \omega^{(k)}| < 0.1$ aus.

Das vollständige Verfahren von Carré zur Bestimmung eines optimalen Relaxationsparameters lautet ([8], S. 202)

- (3.58) 1. Eine Iteration mit $\omega = 1$. Diese Iteration liefert zunächst eine ziemlich raue Abschätzung der Lösung der PDG. Wähle $k := 1$.
2. Mit einem Relaxationsparameter $\omega^{(k)}$ werden 12 Iterationen ausgeführt. Dabei ist darauf zu achten, daß $\omega^{(k)}$ kleiner als ω_b ist. Carré schlägt als "Startparameter" $\omega^{(0)} = 1.375$ vor.
3. Bestimmung von λ_{\max} mit (3.54)
4. Bestimmung von $\tilde{\omega}^{(k)} \approx \omega_b$ mit (3.39a)
5. $\omega^{(k)} = \tilde{\omega}^{(k)} - (2 - \tilde{\omega}^{(k)}) / 4$. Diese von Carré empirisch ermittelte Korrektur erhöht die Konvergenz gegen ω_b und verhindert gleichzeitig das $\omega > \omega_b$ wird.
6. $k := k + 1$; Mit dem berechneten Wert $\omega^{(k-1)}$ wird bei Punkt 2 fortgefahren.
7. Die Schleife 2-6 ist abubrechen, wenn zwei aufeinanderfolgende Berechnungen von ω ein Abbruchkriterium erfüllen (z.B. $|\omega^{(k-1)} - \omega^{(k)}| < 0.1$).

Bemerkungen:

Carré empfiehlt seine Methode für Probleme, bei denen der optimale Relaxationsparameter im Intervall $[1.5, 2)$ liegt.

Bei praktischen Versuchen zeigte sich, daß das von mir implementierte Verfahren von Carré nur wenig schneller als die Methode 2 einen optimalen Relaxationsparameter bestimmt. Dieser Parameter ist darüberhinaus deutlich kleiner als der mit der Methode 2 berechnete. Der daraus resultierende Anstieg der Anzahl der Iterationen macht den kleinen Zeitvorteil fast wieder wett (siehe Beispiele). Wahrscheinlich wird jedoch für große lineare Gleichungs-

systeme ($n_x, n_y > 100$) die Konvergenz von (3.54) sehr schlecht sein und damit das Carré-Verfahren überlegen sein. Aus Speicherplatzgründen habe ich mich in Anlehnung an Kinzelbach auf Gitter mit maximal 20×20 Knoten beschränkt. Ein deutliches Herausarbeiten der Vorteile des Carré-Verfahrens war daher nicht möglich.

3.7.4 Abschätzung von ω_b nach Moler ([8], S. 199)

Während die bis jetzt vorgestellten Verfahren zur Wahl eines optimalen Relaxationsparameters mehr oder weniger aufwendige und lange Berechnungen erforderten die teilweise in keinem Verhältnis zur eingesparten Berechnungszeit standen, ist die Abschätzung von Moler relativ einfach.

Es gilt

$$(3.59) \quad \omega_b = \frac{2}{1 + 1.701 \frac{d}{r}}$$

mit d Abstand der Gitterlinien voneinander (hier wird vorausgesetzt das gilt $d = \Delta x = \Delta y$)

r Radius eines Kreises, der die gleiche Fläche hat wie das betrachtete Gebiet

Bemerkung:

Aus dieser Abschätzung folgt, daß ω_b für sehr große Gebiete bei Wahl eines engen Gitters gegen 2 strebt. Die Konvergenz des SOR-Verfahrens wird dann, da der Spektralradius der Iterationsmatrix sehr nah bei 1 liegt, für eine praktische Durchführung einer Simulation von Grundwasserströmungen nicht mehr ausreichen.

3.7.5 Beispiele zu den einzelnen Verfahren

Für den Vergleich von Verfahren zur Abschätzung des optimalen Relaxationsparameters für das SOR-Verfahren habe ich zwei Beispiele gewählt, die jeweils ein quadratisches Gebiet modellieren (siehe auch [6], S. 32 und die Datensätze "KAP_3_B1.DAT" und "KAP_3_B2.DAT" auf der beiliegenden Diskette). Die Gebiete grenzen an zwei sich gegenüberliegenden Seiten an einen See (bekanntes Potential auf dem Rand) bzw. an den beiden anderen Seiten an eine Felswand (undurchlässiger Rand). In der Mitte der Gebiete befindet sich jeweils ein Entnahmehrbrunnen. Die Beispiele unterscheiden sich nur in der Ausdehnung des Gebietes. Bei einer äquidistanten Gitterweite von 100 m ist das erste Gebiet 700×700 m groß, das zweite $1,9 \times 1,9$ km. Der Young-Test (siehe auch Anhang 3) liefert für beide Koeffizientenmatrizen der zugehörigen LGS die Aussage, daß es sich um konsistent geordnete Matrizen handelt. Durch die gewählte Anordnung der Ränder und des Entnahmehrbrunnens sind die Matrizen darüberhinaus symmetrisch.

Mit den Beispielen soll vor allen Dingen die Güte der durch die verschiedenen Verfahren gelieferten Abschätzungen von ω_b dargestellt und überprüft werden. In den Tabellen ist darum für jedes Abschätzungsverfahren die benötigte Testzeit, d.h. die Zeit, die das jeweilige Verfahren zur Ermittlung der Abschätzung von ω_b benötigt, und der ermittelte Relaxationsparameter angegeben. Mit dem ermittelten Parameter ω_b wird dann das SOR-Verfahren zur Lösung des Problems eingesetzt. Die Anzahl der Iterationen, die zur Erfüllung des Abbruchkriteriums ($\epsilon = 0,001$) benötigt werden, sind in der vierten Spalte der Tabelle aufgeführt. In der fünften Spalte ist die Gesamtzeit, d.h. die Zeit, die für die Ermittlung der Abschätzung

plus der Rechenzeit zur Lösung des Problems benötigt wird, angegeben. Zur Kontrolle der Güte der Lösung wird das Problem auch mit dem Gauß-Jordan-Verfahren bearbeitet. In der sechsten Spalte der Tabellen ist die maximale Abweichung aufgeführt, die zwischen der Lösung des gewählten Verfahrens und der des Gauß-Jordan-Verfahrens auftritt.

Bei der Methode 1 (Suche durch Versuch) wird in der Spalte 1 zusätzlich der Startwert ω_s mit dem die Versuchreihe gestartet wird aufgenommen. Durch geschickte Wahl dieses Startwertes kann die Testzeit gegenüber einem Startwert von $\omega = 1$ drastisch verringert werden. Der Startwert $\omega = 1$ sollte nur verwendet werden, wenn überhaupt keine Informationen über das durch die Diskretisierung der Strömungsgleichung entstandene LGS vorliegen. Die Methode 1 ermittelt die untere und die obere Grenze des Intervalls I_{opt} bzw. $I_{fastopt}$ und ermittelt ω_b als arithmetisches Mittel dieser beiden Werte. Die Intervallgrenzen sind daher zusätzlich zum Relaxationsparameter ω_b in Spalte 3 angegeben.

1) 7 x 7 - Gitter

Verfahren	Testzeit	ω_b	Anzahl der Iterationen	Gesamtzeit	Maximale Abw. zum GJ-Verf.
Methode 1 $\omega_s = 1,30$	125 sec.	1,43 1,35 - 1,51	30	130 sec.	0,0015
Methode 2	2,30 sec.	1,46	29	7,02 sec.	0,0017
Carré	1,85 sec.	1,31	31	6,87 sec.	0,0022
Moler	0,01 sec.	1,33	31	5,03 sec.	0,0019
Gauß-Jordan	-	-	-	2,84 sec.	-

2) 19 x 19 - Gitter

Verfahren	Testzeit	ω_b	Anzahl der Iterationen	Gesamtzeit	Maximale Abw. zum GJ-Verf.
Methode 1 $\omega_s = 1,60$	2529 sec.	1,71 1,69 - 1,72	104	2674 sec. (45 min.)	0,0057
Methode 2	41,1 sec.	1,69	105	189,1 sec.	0,0058
Carré	32,4 sec.	1,67	106	181,8 sec.	0,0063
Moler	0,01 sec.	1,71	104	146,7 sec.	0,0055
Gauß-Jordan	-	-	-	102,7 sec.	-

Im direkten Vergleich von Verfahren zur Lösung großer linearer Gleichungssysteme wie sie bei der Modellierung von Grundwasserströmungen in einem Gebiet zu lösen sind, zeigen sich jetzt sowohl bei der Anwendung von direkten (z.B. Gauß-Jordan) als auch von iterativen Verfahren (z.B. SOR) Vor- und Nachteile der einzelnen Verfahren. So liefert das Gauß-Jordan-Verfahren das Ergebnis einer Berechnung bei den hier betrachteten Beispielen schneller und genauer (Aufgrund der eingegebenen Parameter mußte die Lösung symmetrisch sein. Nur die mit dem Gauß-Jordan-Verfahren errechnete Lösung erfüllte diese Bedingung). Ein Nachteil dieses Verfahrens ist jedoch sein enormer Speicherplatzverbrauch. So ist bei einem Gebiet, das in x-Richtung mit n_x Gitterlinien und in y-Richtung mit n_y Gitterlinien überzogen wird, ein LGS mit $n_x \cdot n_y$ Unbekannten zu lösen (siehe auch Kapitel 2). Für die Koeffizientenmatrix A braucht man selbst bei Wahl einer platzsparenden Speicherung der benötigten Matrixelemente ([6], S. 40) einen Speicherbereich mit $(2n_x + 1) \cdot (n_x \cdot n_y)$ Einträgen. Bei einem Gebiet mit

50 x 50 Gitterpunkten müßten also 252.500 Werte gespeichert werden. Multipliziert man diese Zahl mit dem internen Speicherverbrauch pro Realzahl (beim ST Pascal Entwicklungssystem der Firma CCD : 6 Byte), ergibt sich ein Speicherverbrauch von ca. 1,45 MByte. Auf einem PC unter dem Betriebssystem MS-DOS wäre damit eine Bearbeitung von Gebieten dieser Größe und Auflösung mit dem Gauß-Jaordan-Verfahren ohne weiteres nicht möglich.

Dieses Problem hat man bei der Verwendung des SOR-Verfahrens ((3.22) mit (3.46)) nicht. Hier braucht das LGS nicht explizit aufgestellt werden, da der Algorithmus Gitterpunkt für Gitterpunkt bearbeitet. Die Nachteile iterativer Verfahren, sind also eher in den mitunter sehr langen Rechenzeiten und bei der Erfüllung von notwendigen Konvergenzkriterien (z.B. (3.42)) zu suchen. Die Rechenzeiten sind dabei neben der Anzahl der Gitterpunkte vor allen Dingen von der Anzahl der benötigten Iterationen abhängig. Die Abschätzung des Relaxationsparameters ω_p für das SOR-Verfahren mit der Methode nach Moler (3.59) zeigt, daß der, die Anzahl der Iterationen beeinflussende, Spektralradius der Koeffizientenmatrix für sehr große Gebiete bei gleichzeitiger enger Maschenweite des Gitters gegen 1 strebt. Die Konvergenzgeschwindigkeit iterativer Verfahren sinkt dann stark ab, d.h. die Anzahl der benötigten Iterationen steigt.

Ziel weiterer Überlegungen muß es aus diesen Gründen sein, Verfahren zu entwickeln, die die Vorteile beider Verfahrensklassen in sich vereinigen (günstiger Speicherbedarf, kurze Rechenzeiten) und die Nachteile eliminieren. Kinzelbach stellt aus diesen Gründen das IADI-Verfahren vor ([6], S. 54ff). Das IADI-Verfahren ist ein iteratives Verfahren, welches von Prickett und Lonquist 1971 auf der Basis des ADI-Verfahrens von Peaceman und Rachford (1955) entwickelt wurde. Im Rahmen dieser Arbeit werden diese beiden Verfahren nicht behandelt. Im Programm GWF sind sie jedoch implementiert.

Literaturangabe zum Kapitel 3

- 1) J.Stoer / R.Bulirsch
"Einführung in die Numerische Mathematik II"
2. Auflage
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1978
- 2) David M. Young / Robert T. Gregory
"A survey of numerical mathematics Volumes I & II"
Addison-Wesley Publishing Company, 1973
- 3) H.R.Schwarz / H.Rutishauser / E.Stiefel
"Matrizen-Numerik"
2. Auflage
B.G. Teubner, Stuttgart, 1972
- 4) David M. Young
"Iterative Solution of large linear Systems"
Academic Press, New York, London, 1971
- 5) K.R. Rushton / S.C. Redshaw
"Seepage and Groundwater Flow. Numerical Analysis by Analog and Digital Methods"
John Wiley & Sons, New York, 1979
- 6) Wolfgang Kinzelbach
"Groundwater Modelling. An Introduction with Sample Programs in BASIC"
1. Auflage
Elsevier, Amsterdam, 1986
- 7) D. Marsal
"Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen in Wissenschaft und Technik"
Bibliographisches Institut AG, 1976
- 8) I. Remson / G.M. Hornberger / F.J. Molz
"Numerical Methods in Subsurface Hydrology"
Wiley-Interscience, 1971
- 9) H.R. Schwarz
"Numerische Mathematik"
B.G. Teubner, Stuttgart, 1986

4. Ein einfaches Analogmodell für die Behandlung stationärer Grundwasserströme in gesättigten Grundwasserleitern

Neben den diskretisierenden mathematisch-numerischen Modellen zur Simulation von Grundwasserströmungen gibt es eine Reihe von Möglichkeiten der Simulation mit Hilfe analoger Modelle. Davon soll hier nur auf die Simulation mit Hilfe elektrischer Netzwerke eingegangen werden. Bei diesen Modellen werden die Strömungen durch elektrische Ströme simuliert, Widerstände repräsentieren die lokalen Transmissivitäten und Kondensatoren drücken an den einzelnen Knotenpunkten des Netzwerkes die Speicherefähigkeit des Gesteins aus.

Im Folgenden wird der Einfachheit halber nur der Fall einer stationären Situation behandelt. In stationären Situationen bleiben die zu betrachtenden Potentiale in den Knoten des Netzwerkes über den Betrachtungszeitraum konstant. Zeitabhängige Bauelemente wie z.B. Kondensatoren brauchen darum nicht in das Netzwerk eingebaut werden. Dies vereinfacht den Versuchsaufbau erheblich.

4.1 Äquivalenz von Widerstandsnetzen und Differenzgleichungen der Diskretisierung für stationäre Situationen

Für die Behandlung eines Grundwasserflusses in einem gespannten, gesättigten, inhomogenen und anisotropen Grundwasserleiter wurde im 1. Kapitel die Gleichung

$$(1.36) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) = -q(x,y) + S(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial t} \quad \left[\frac{\text{m}^3}{\text{m}^2} \right]$$

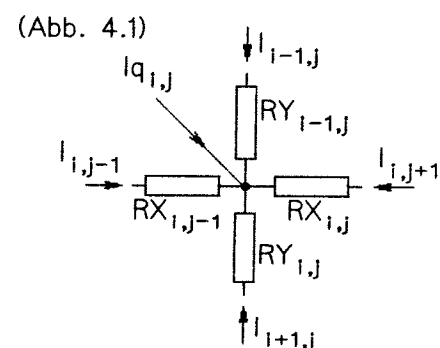
aufgestellt. In einer stationären Situation bleibt die Standrohrspiegelhöhe h über dem Betrachtungszeitraum Δt konstant. Aus (1.36) folgt dann

$$(4.1) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(T_x(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_y(x,y) \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) = -q(x,y) \quad \left[\frac{\text{m}^3}{\text{m}^2} \right]$$

Nach der Diskretisierung dieser Gleichung und der Einführung einer neuen Notation für die lokalen Transmissivitäten ergab sich im 2. Kapitel die Differenzgleichung (2.33), die ausgeschrieben und umgestellt lautet:

$$(4.2) \quad \frac{T_{J_{i,j-1}} (w_{i,j-1} - w_{i,j})}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{J_{i,j}} (w_{i,j+1} - w_{i,j})}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{I_{i-1,j}} (w_{i-1,j} - w_{i,j})}{(\Delta y)^2} + \frac{T_{I_{i,j}} (w_{i+1,j} - w_{i,j})}{(\Delta y)^2} = -q_{i,j} \quad \left[\frac{\text{m}^3}{\text{m}^2} \right]$$

Um die Strömungsgleichung mit einem elektrischen Netzwerk lösen zu können, betrachte man zunächst die nebenstehende Abbildung (4.1). In dieser wird ein Knoten eines Netzwerkes dargestellt. Für jeden Knoten ist nach dem 1. Kirchhoff'schen Gesetz die Summe aller zu- und abfließenden Ströme gleich Null ([1], S. 252). Abfließende Ströme tragen dabei ein negatives Vorzeichen.



Mit Hilfe des Ohm'schen Gesetzes ([1], S. 248) läßt sich jetzt für die Bilanz der Ströme im Knoten i, j die folgende Gleichung aufstellen

$$(4.3) \quad \frac{U_{i,j-1} - U_{i,j}}{RX_{i,j-1}} + \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{RX_{i,j}} + \frac{U_{i-1,j} - U_{i,j}}{RY_{i-1,j}} + \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{RY_{i,j}} = - I_{q_{i,j}} \quad [A]$$

- U Spannungen [V]
 RX Widerstände in x-Richtung [Ω]
 RY Widerstände in y-Richtung [Ω]
 Iq zu- oder abfließender Strom [A]

Die Gleichungen (4.3) und (4.2) sind von gleicher Struktur. Mit einem elektrischen Netzwerk können daher zum mathematischen Modell vergleichbare Lösungen der Strömungsgleichung ermittelt werden, wenn die folgenden Zusammenhänge gelten ([2], S. 147):

- (4.4a) 1) Die Spannungen $U_{i,j}$ sind proportional zu den Näherungswerten $w_{i,j}$ der Grundwasserpotentiale $h_{i,j}$.
 (4.4b) 2) Die Widerstände RX und RY sind umgekehrt proportional zu $TJ/(\Delta x)^2$ bzw. zu $TI/(\Delta y)^2$.
 (4.4c) 3) Der Strom $I_{q_{i,j}}$ ist der zu- bzw. abfließenden Menge Wasser pro Zeiteinheit und pro Fläche proportional.

4.2 Skalierung des analogen Modells

Um die im analogen Modell gemessenen Spannungen mit den berechneten Potentialen des digital-numerischen Modells vergleichen zu können, muß das analoge Modell zunächst skaliert werden.

Der erste zu ermittelnde Skalierungsfaktor F_1 ist die Proportionalitätskonstante zwischen der gemessenen Spannung U und dem berechneten Potential w. Es folgt aus (4.4a) ([2], S. 147)

$$(4.5) \quad U_{i,j} = F_1 \cdot w_{i,j} \quad \Leftrightarrow \quad F_1 = \frac{U_{i,j}}{w_{i,j}} \quad \left[\frac{V}{m} \right]$$

Für den zweiten Skalierungsfaktor F_2 folgt aus (4.4b) ([2], S. 147)

$$(4.6a) \quad \frac{TJ_{i,j}}{(\Delta x)^2} = F_2 \cdot \frac{1}{RX_{i,j}} \quad \Leftrightarrow \quad F_2 = \frac{RX_{i,j} \cdot TJ_{i,j}}{(\Delta x)^2} \quad \left[\frac{\Omega \cdot \frac{m^2}{s}}{m^2} \right] = \left[\frac{\Omega}{s} \right]$$

bzw.

$$(4.6b) \quad \frac{TI_{i,j}}{(\Delta y)^2} = F_2 \cdot \frac{1}{RY_{i,j}} \quad \Leftrightarrow \quad F_2 = \frac{RY_{i,j} \cdot TI_{i,j}}{(\Delta y)^2} \quad \left[\frac{\Omega \cdot \frac{m^2}{s}}{m^2} \right] = \left[\frac{\Omega}{s} \right]$$

Schließlich folgt für den dritten Skalierungsfaktor F_3 aus (4.4c) ([2], S. 148)

$$(4.7) \quad I_{q_{i,j}} = F_3 \cdot q_{i,j} \quad \Leftrightarrow \quad F_3 = \frac{I_{q_{i,j}}}{q_{i,j}} \quad \left[\frac{A}{\frac{m^3/s}{m^2}} \right] = \left[\frac{As}{m} \right]$$

Wenn die Ergebnisse der Gleichungen (4.5) und (4.6) zur Probe in die Gleichung (4.3)

eingesetzt werden, so ergibt sich

$$(4.8) \quad \frac{TJ_{i,j-1} \left(F_1 \cdot (w_{i,j-1} - w_{i,j}) \right)}{F_2 \cdot (\Delta x)^2} + \frac{TJ_{i,j} \left(F_1 \cdot (w_{i,j+1} - w_{i,j}) \right)}{F_2 \cdot (\Delta x)^2} \\ + \frac{Tl_{i-1,j} \cdot \left(F_1 \cdot (w_{i-1,j} - w_{i,j}) \right)}{F_2 \cdot (\Delta y)^2} + \frac{Tl_{i,j} \cdot \left(F_1 \cdot (w_{i+1,j} - w_{i,j}) \right)}{F_2 \cdot (\Delta y)^2} = - Iq_{i,j} [A]$$

Werden die Skalierungsfaktoren F_1 und F_2 auf die rechte Seite der Gleichung (4.8) gebracht, so stehen auf der linken Seite der Gleichung nur noch strömungsmechanische Größen.

$$(4.9) \quad \frac{TJ_{i,j-1} \cdot (w_{i,j-1} - w_{i,j})}{(\Delta x)^2} + \dots = - \frac{F_2}{F_1} \cdot Iq_{i,j} \left[\frac{m^3}{s \cdot m^2} \right]$$

Damit muß die rechte Seite bei in sich konsistenter Skalierung gleich $-q_{i,j} [m^3/s/m^2]$ sein:

$$(4.10) \quad - \frac{F_2}{F_1} \cdot Iq_{i,j} = - q_{i,j} \left[\frac{m^3}{s \cdot m^2} \right]$$

Wegen (4.7) folgt daraus auch, daß gilt:

$$(4.11) \quad F_3 = \frac{F_1}{F_2} \left[\frac{\frac{V}{m}}{\frac{\Omega}{s}} \right] = \frac{F_1}{F_2} \left[\frac{As}{m} \right]$$

Damit zeigt sich, daß F_3 durch die Wahl von F_1 und F_2 bereits festgelegt ist, d.h., es reichen zwei Faktoren zur Skalierung des analogen Modells aus.

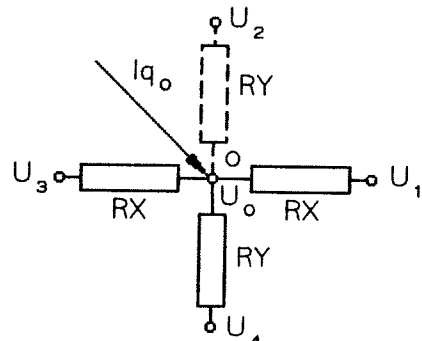
4.3 Behandlung unterschiedlicher Randbedingungen im analogen Modell

Wie schon in Kapitel 2 ausgeführt, muß das Modell in der Praxis zwei verschiedene Typen von Randbedingungen realisieren können.

Die Modellierung einer Dirichlet-Randbedingung, d.h., falls der Wert der Lösungsfunktion auf dem Rand bekannt ist, bereitet dabei keine Schwierigkeiten. In einem elektrischen Netzwerk braucht lediglich ein festes Potential über eine direkte (evtl. mit einem Widerstand versehene) Zuleitung von der Spannungsquelle in dem Randknoten, dessen Potential bekannt ist, erzeugt zu werden.

Bei der Modellierung einer Neumann'schen Randbedingung $\partial h / \partial \vec{n} \Big|_0 = q_0$ muß im Netzwerk selbst eine Veränderung vorgenommen werden. Die Abb. (4.2) zeigt eine Situation, die

(Abb. 4.2)



entsteht, wenn der Punkt 0 (in globaler Indizierung) auf dem Rand liegt. Der Fluß durch den Rand sei dabei bekannt ($\partial h / \partial y \Big|_0 = q_0$). Wie der Abbildung zu entnehmen ist, fällt der Arm 2 mit dem Potential U_2 an seinem Ende in diesem Diskretisierungstern weg.

Würde der Arm 2 existieren, d.h., wenn es einen virtuellen Arm gäbe, und die Bedingung $U_2 = U_4$ erfüllt wäre, dann ergäbe sich mit (4.3) für den Netzwerkknoten 0 in

globaler Indizierung:

$$(4.12) \quad -I_{q_0} = \frac{\tilde{U}_3 - 2\tilde{U}_0 + \tilde{U}_1}{RX} + \frac{\tilde{U}_4 - 2\tilde{U}_0 + \tilde{U}_2}{RY} = \frac{\tilde{U}_3 - 2\tilde{U}_0 + \tilde{U}_1}{RX} + \frac{\tilde{U}_4 - 2\tilde{U}_0 + \tilde{U}_4}{RY} \quad [A]$$

mit \tilde{U}_i Spannungen im Stern mit virtuellen Arm

Fehlt der Arm 2, so ergibt sich:

$$(4.13) \quad -I_{q_0} = \frac{U_3 - 2U_0 + U_1}{RX} + \frac{U_4 - U_0}{RY} = \frac{U_3 - 2U_0 + U_1}{RX} + \frac{1}{2} \cdot \frac{U_4 - 2U_0 + U_4}{RY} \quad [A]$$

mit U_i Spannungen im 3-armigen Randstern

Sollen die in (4.12) und (4.13) auftretenden Potentiale \tilde{U}_i und U_i an den Knoten 1,3 und 4 gleich sein, ohne daß die Größen I_q , U_0 und RY verändert werden, so muß RX multiplikativ angepaßt werden. Mit

$$a = \frac{U_3 - 2U_0 + U_1}{RX} \quad \text{und} \quad b = \frac{U_4 - 2U_0 + U_4}{RY}$$

folgt aus (4.12)

$$(4.14) \quad -I_{q_0} = a + b$$

und aus (4.13) mit einem Korrekturfaktor x am Widerstand RX

$$(4.15) \quad -I_{q_0} = \frac{1}{x} \cdot a + \frac{1}{2} \cdot b$$

Für den Sonderfall eines undurchlässigen Randes, d.h. $I_{q_0} = 0$, folgt aus (4.14)

$$(4.16) \quad a = -b$$

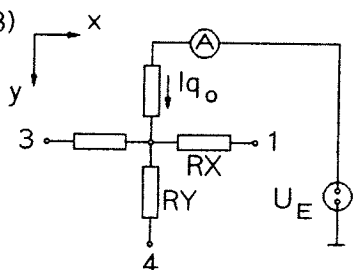
und damit aus (4.15) und (4.16)

$$(4.17) \quad \frac{1}{x} \cdot b = \frac{1}{2} \cdot b \iff x = 2$$

Durch Verdopplung der Widerstandswerte in x -Richtung ist also ein in y -Richtung undurchlässiger Rand mit einem dreiarmligen Randstern modellierbar.

Bei der Modellierung eines Randes mit der Neumann'schen Randbedingung $\partial h / \partial \vec{n} \Big|_0 = q_0 \neq 0$ kann nicht auf die zusätzliche Beziehung $I_q = 0$ zurückgeriffen werden, die eine Festlegung des Faktors an RX ermöglichen würde. Es ist jedoch auch in dieser Situation möglich, einen dreiarmligen Stern mit verdoppelten Widerständen RX wie zur Realisierung eines undurchlässigen Randes zu verwenden, wenn der Randdurchfluß q_0 durch eine externe Spannungsquelle erzwungen wird. Der Strom I_q , der in den Knoten hinein- oder herausfließen soll, kann

(Abb. 4.3)



durch die folgende Versuchsanordnung geliefert werden (Abb. 4.3). Über eine (richtig gepolte) externe Spannungsquelle U_E fließt über einen (regelbaren) Vorwiderstand genau der Strom I_{q_0} in den Knoten 0 hinein oder heraus, der der Menge Wasser q entspricht, die an dieser Stelle des Gebiets zu- oder abfließen soll.

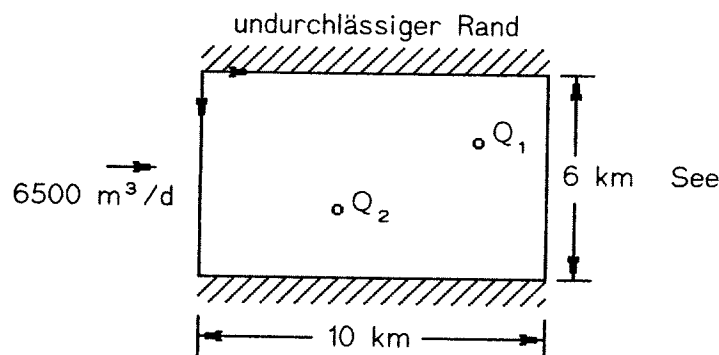
4.4 Ein Beispiel

Zur Überprüfung der Resultate von digital-numerischen Modellen durch den Vergleich mit den Resultaten von analogen Modellen auf der Basis elektrischer Netzwerke habe ich die in [2, S.139 ff] dargestellte Versuchsanordnung nachgebaut. An dieser Stelle folgen nur die Definition des in den Vergleichsrechnungen benutzten Anwendungsbeispiels, die Berechnung der benötigten Skalierungsfaktoren und der grundsätzliche Versuchsaufbau. Ein vollständiges Versuchsprotokoll mit der Darstellung aller Versuchsdetails und der durchgeführten Messungen befindet sich im Anhang 2 dieser Arbeit.

4.4.1 Das Anwendungsbeispiel

Betrachtet werden soll ein 10 km x 6 km großes Gebiet, das an seinen Längsseiten von undurchlässigem Gestein begrenzt wird. Die östliche Seite grenzt an einen See, das Grundwasserpotential ist somit an jeder Stelle des Ufers bekannt (0 m). Von der westlichen Seite des Gebietes ist nur bekannt, daß ein über die gesamte Breite gleichmäßig verteilter Zufluss von $6500 \text{ m}^3/\text{d}$ in den gespannten Grundwasserleiter zu verzeichnen ist. Die Transmissivitäten T_x und T_y sind an jeder Stelle des homogenen und isotropen Grundwasserleiters bekannt ($T_x = T_y = 900 \text{ m}^2/\text{d}$). Innerhalb des Gebietes sollen zwei Entnahmebrunnen betrieben werden ($Q_1: x = 8 \text{ km}, y = 2 \text{ km}, Q = -4500 \text{ m}^3/\text{d}$; $Q_2: x = 4 \text{ km}, y = 4 \text{ km}, Q = -1500 \text{ m}^3/\text{d}$).

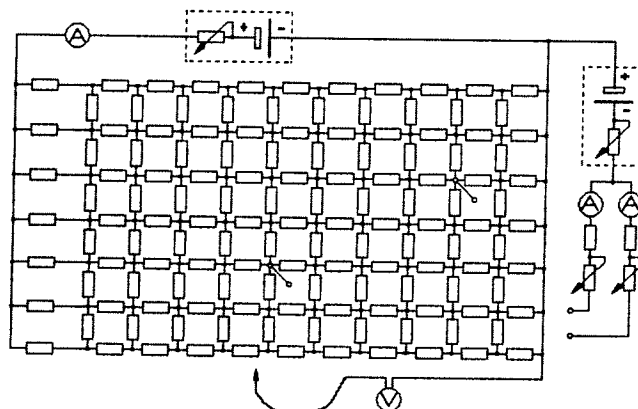
(Abb. 4.4)



4.4.2 Modellierung des Anwendungsbeispiels

Zur Modellierung des Beispiels wird zunächst das Gebiet mit einem Gitter überdeckt. Der Einfachheit halber ist die Gitterweite äquidistant gewählt ($\Delta x = \Delta y = d = 1000 \text{ m}$). Das Modell besteht demzufolge aus 7 Zeilen und 11 Spalten bzw. 77 Knoten. Die Transmissivitäten werden in dem entstehenden Netz durch Widerstände repräsentiert (Abb. 4.5).

(Abb. 4.5)



(Eine genaue Erklärung aller verwendeten Schaltzeichen befindet sich im Anhang 2)

Für die einzelnen Widerstände R zwischen den Knoten des Netzes wurden Widerstandswerte von $10\text{ K}\Omega$ gewählt. Mit den Gleichungen (4.6) ergibt sich damit für den Skalierungsfaktor F_2 :

$$(4.18) \quad F_2 = \frac{R \cdot T}{d^2} = \frac{10 \cdot 10^3 \cdot 900}{1000^2} = 9 \left[\frac{\Omega}{\text{s}} \right]$$

Entsprechend den Ausführungen in Kapitel 4.3 und der Gleichung (4.17) müssen die Widerstandswerte in Zeile 1 und Zeile 7 verdoppelt werden. Im Versuch wurden daher für die auf den undurchlässigen Rändern liegenden Widerstände Werte von $20\text{ K}\Omega$ verwendet.

Soll das elektrische Potential U [V] zahlenmäßig der digital-numerisch berechneten Standrohrspiegelhöhe entsprechen, so ist $F_1 = 1$ [V/m] zu wählen. Damit ergibt sich für die zu- und abfließenden Ströme:

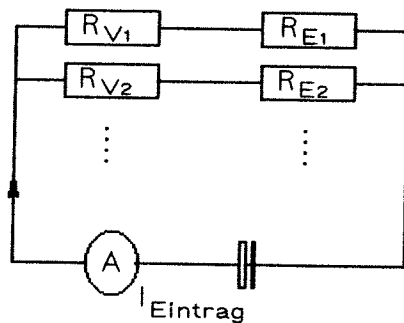
$$(4.19a) \quad I_{\text{Eintrag}} = \frac{1}{9} \cdot \frac{Q_{\text{Eintrag}}}{d^2} = \frac{1}{9} \cdot \frac{6500}{1000^2} = 0,722\text{ mA}$$

$$(4.19b) \quad I_{Q_1} = \frac{1}{9} \cdot \frac{Q_1}{d^2} = \frac{1}{9} \cdot \frac{4500}{1000^2} = 0,5\text{ mA}$$

$$(4.19c) \quad I_{Q_2} = \frac{1}{9} \cdot \frac{Q_2}{d^2} = \frac{1}{9} \cdot \frac{1500}{1000^2} = 0,167\text{ mA}$$

Die für die Durchführung des Versuchs erforderliche Spannung läßt sich aus dem Gesamtwiderstand des Netzes und dem Eintragsstrom I_{Eintrag} berechnen. Zu Ermittlung des Gesamtwiderstandes des Netzes wird für dieses zunächst eine Ersatzschaltung ohne Brunnenströme erstellt. Ohne die Brunnenströme fließen im Netz keine Querströme. Eine Ersatzschaltung kann dann wie in Abbildung (4.6) dargestellt aufgebaut werden. Die Ersatzwiderstände $R_{E2} \dots R_{E6}$ werden durch die Reihenschaltung von je 10 Widerständen der Größe R gebildet (hier $10\text{ K}\Omega$). D.h., $R_{Ei} = 10R$ für alle $i = 2, \dots, 6$. Für R_{E1} und R_{E7} ergibt sich analog bei Wahl eines Widerstandswerts von $2R$ (hier $20\text{ K}\Omega$): $R_{E1} = R_{E7} = 20R$.

(Abb. 4.6)



Die Vorwiderstände R_{Vi} ($i = 1, 2, \dots, 7$) ermöglichen eine Aufteilung des Gesamtstromes (I_{Eintrag}) auf die Ersatzwiderstände R_{Ei} ($i = 1, 2, \dots, 7$). Werden für die Vorwiderstände $R_{V2} \dots R_{V6}$ Werte von $10R$ bzw. von $20R$ für R_{V1} und R_{V7} gewählt, so ergibt sich für den Gesamtwiderstand des Netzes:

$$(4.20) \quad \frac{1}{R_{\text{Netz}}} = \frac{1}{R_{V1} + R_{E1}} + \frac{1}{R_{V2} + R_{E2}} + \dots + \frac{1}{R_{V7} + R_{E7}} = \frac{5}{10R + 10R} + \frac{2}{20R + 20R} \\ = \frac{5}{20R} + \frac{1}{20R} = \frac{6}{20R} \left[\frac{1}{\Omega} \right]$$

Mit dem für R gewählten Wert von $10\text{ K}\Omega$ ergibt sich somit der Gesamtwiderstand des Netzes zu:

$$(4.21) \quad R_{\text{Netz}} = \frac{20}{6} \cdot 10 \text{ K}\Omega = 33,33 \text{ K}\Omega$$

Da der Gesamtstrom, der im Netz fließt, gleich dem Strom I_{Eintrag} sein soll, folgt nach dem Ohm'schen Gesetz für die anzulegende Spannung U_{Netz}

$$(4.22) \quad U_{\text{Netz}} = 0,722 \text{ mA} \cdot 33,33 \text{ K}\Omega \approx 24 \text{ V}$$

Durch die Verwendung einer zweiten Spannungsquelle U_{Brunnen} kann die Modellierung der Brunnen gemäß der Abbildung (4.3) durchgeführt werden. Zu beachten ist dabei, daß der Diskretisierungsknoten anders als in Abbildung (4.3) dargestellt in den gewählten "Brunnenknoten" vollständig ist.

Bemerkung:

Bei der Versuchsdurchführung mit den die Entnahmebrunnen simulierenden Ströme I_{q_1} und I_{q_2} wird die Spannung U_{Netz} so geregelt, daß der Strom I_{Eintrag} genau 0,722 mA beträgt. Da die zweite Spannung U_{Brunnen} einen Einfluß auf den Gesamtstrom hat, ist die anzulegende Spannung U_{Netz} eher kleiner als 24 V.

Bei der Spezifikation des Voltmeters, welches zur Aufnahme der Potentiale dient, ist auf einen möglichst hohen Innenwiderstand zu achten. Je höher der Innenwiderstand ist, desto kleiner wird der Meßstrom, der die Messung verfälscht. Für den Meßstrom eines Digitalvoltmeters $I_{\text{meß}}$ gilt nach dem Ohm'schen Gesetz in allen Spannungsmeßbereichen

$$(4.22) \quad I_{\text{meß}} = \frac{U_{\text{meß}}}{R_i}$$

mit R_i Innenwiderstand des Digitalvoltmeters im Spannungsmeßbereich
 $U_{\text{meß}}$ gemessener Spannungsabfall

Für die von mir gemessenen Spannungen $\leq 10 \text{ V}$ und einen Innenwiderstand des Digitalvoltmeters von $10 \text{ M}\Omega$, ergibt sich ein $I_{\text{meß}}$ von $\leq 1 \mu\text{A}$. Dieser die Messung verfälschende Strom entspricht einem Entnahmebrunnen mit einer Förderleistung von $\leq 9 \text{ m}^3/\text{d}$ und damit weniger als 0,6% der Förderleistung des kleinsten Brunnens im Experiment.

Für die Messung der Ströme sollten ebenfalls Digitalvoltmeter (im Strommeßbereich) verwendet werden, da diese eine sehr genau Einstellung der zu- und abfließenden Ströme erlauben. Darüberhinaus ist das Preis/Leistungsverhältnis dieser Geräte heute höher als bei in der Meßgenauigkeit vergleichbaren Analogmeßgeräten.

4.4.3 Versuchsergebnisse

Die Versuchsdurchführung ergab für die einzelnen Knoten des Netzwerkes die im folgenden dargestellten Spannungen (4.24). Diese sind, da $F_1 = 1 \text{ [V/m]}$ gewählt wurde, direkt als im Grundwasserleiter herrschende Standrohrspiegelhöhen über einer Bezugsebene (Seespiegel) interpretierbar.

(4.24)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	8,71	7,53	6,37	5,21	4,09	3,02	1,98	1,01	0,26	0,03	0
2	8,72	7,54	6,36	5,20	4,08	3,00	1,95	0,91	-0,00	-0,06	0
3	8,72	7,52	6,33	5,15	4,01	2,96	1,89	0,68	-1,12	-0,29	0
4	8,70	7,50	6,28	5,07	3,87	2,92	1,98	1,03	0,15	0,03	0
5	8,70	7,46	6,23	4,95	3,47	2,87	2,09	1,31	0,64	0,26	0
6	8,67	7,46	6,24	5,03	3,86	2,99	2,20	1,47	0,85	0,38	0
7	8,66	7,45	6,25	5,07	3,96	3,05	2,24	1,52	0,91	0,42	0

(Die fett geschriebenen Werte repräsentieren die Knoten, bei denen ein Strom abgeführt wurde, d.h. ein Brunnen modelliert wurde.)

Um zwei Matrizen miteinander vergleichen zu können, ist im von mir entwickelten Programm GWF eine entsprechende Prozedur implementiert. Die zu untersuchenden Matrizen werden eingelesen und dann voneinander subtrahiert. Beim Vergleich der gemessenen Werte mit den durch das Programm STATIONAER digital-numerischen berechneten ergab sich das folgende Ergebnis:

(4.25)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	-0,04	-0,03	-0,01	-0,01	-0,01	-0,00	-0,00	-0,01	-0,00	-0,00	0
2	-0,03	-0,01	-0,01	-0,01	0,00	-0,00	0,01	0,00	0,00	0,00	0
3	-0,01	-0,00	-0,00	-0,00	-0,00	0,00	0,00	0,00	-0,00	-0,00	0
4	0,00	0,01	-0,00	0,01	0,00	0,00	-0,00	0,00	0,00	-0,00	0
5	0,02	-0,01	-0,01	-0,01	-0,00	0,00	0,00	0,00	-0,00	-0,01	0
6	0,00	-0,00	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01	-0,00	-0,00	-0,00	-0,01	0
7	-0,01	-0,01	-0,01	-0,00	-0,01	-0,00	-0,01	-0,01	-0,00	-0,00	0

Bemerkungen:

- 1) Die Abweichungen folgen zum einen aus den Meßfehlern, d.h. der Sorgfalt, mit der der Versuch durchgeführt wird (Einstellen der Ströme, Konstanz der Spannungsquelle, Güte der Meßgeräte), und zum anderen aus der Güte der Widerstände.
- 2) Eine Berechnung mit dem Programm GWF führt aus den in Kapitel 3 genannten Gründen nicht zum gewünschten Ergebnis. Unter Berücksichtigung der abweichenden Modellierung (Brunnenstandorte, Randlage) läßt sich jedoch eine in der Tendenz gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der analogen Modellierung erkennen.
- 3) Die größte Abweichung zwischen den von mir gemessenen Werte und den in [2], S.141 angegebenen, beträgt 0,08 V.

Zur Kontrolle der Güte des Versuches kann eine Betrachtung der Strömungsbilanz dienen. Mit der Gleichung (1.14) ergibt sich für die Berechnung der Flüssigkeitsmenge, die zwischen zwei benachbarten Punkten ausgetauscht wird

$$(4.26) \quad Q = - T \cdot b \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l}$$

Wird für b der Wert $\Delta y = 1000 \text{ m}$ und für Δl der Wert $\Delta x = 1000 \text{ m}$ eingesetzt, so ergibt sich aus (4.26):

$$(4.27a) \quad Q = - T \cdot \Delta h$$

Im Bereich der undurchlässigen Ränder ist der betrachteten Grundwasserleiter nur 500 m breit. Hier folgt ebenfalls aus (4.26):

$$(4.27b) \quad Q = -\frac{1}{2} \cdot T \cdot \Delta h$$

Führt man die Bilanzrechnung für alle Knoten des westlichen (Eintrag in das Gebiet) und des östlichen Randes (Austrag in den See) sowie für die beiden "Brunnenknoten" durch, so liefert die Gesamtbilanz der Ein- und Austräge

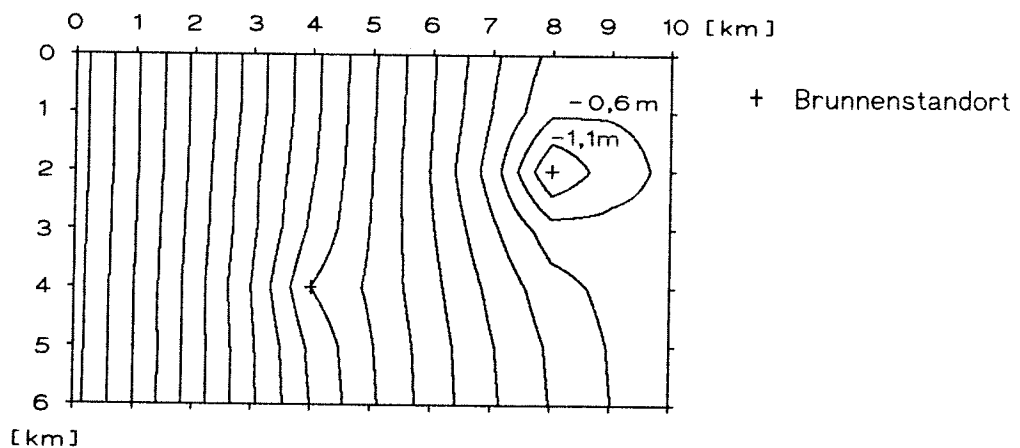
(4.28)	6502,5 m ³ /d	Eintrag in das Gebiet durch den westlichen Rand (Q _{Eintrag})
	- 4518 m ³ /d	Austrag durch den ersten Brunnen (Q ₁)
	- 1503 m ³ /d	Austrag durch den zweiten Brunnen (Q ₂)
	- 490,5 m ³ /d	Abfluß in den See
	<u>9 m³/d</u>	Fehler

Der Fehler in dieser Bilanz entsteht durch Meßfehler (Anzeigegenauigkeit der verwendeten Meßgeräte, Widerstände der Meßleitungen etc.) und aus den Abweichungen der Widerstände zum angegebenen Wert. Der bei dieser Messung aufgetretene Fehler beträgt 0,15% des Gesamteintrages und ist daher vernachlässigbar.

Mit Hilfe des von mir implementierten Programms GWF lassen sich die berechneten Werte graphisch darstellen. Aus den drei zur Verfügung stehenden Darstellungen (Isolinienplot, 3D, Schnittgraphik) habe ich die Isoliniendarstellung gewählt. Diese Prozedur ist eine Anpassung des Kinzelbach-Programms SAM5 [3, S.73 ff] an die Graphikfähigkeiten des ATARI ST.

Die Linien der Graphik verbinden Punkte gleichen Potentials. Deutlich sind die beiden Entnahmebrunnen in den Punkten x₁ = 8 km, y₁ = 2 km und x₂ = 4 km, y₂ = 4 km zu erkennen.

(Abb. 4.7)



Die analoge Bearbeitung des gegebenen Anwendungsbeispiels hat gezeigt, daß die erzielten Ergebnisse durchaus mit den digital-numerisch berechneten zu vergleichen sind. Der Aufwand dieser Methode ist jedoch beträchtlich. Darüberhinaus muß das Modell für jedes zu untersuchende Gebiet neu aufgebaut werden. Aus diesem Grund ist die Bearbeitung von Grundwasserströmen heute mit Hilfe von Computern häufig schneller und einfacher durchzuführen.

Literaturangabe zum Kapitel 4

- 1) Horst Kuchling
"PHYSIK Formeln und Gesetze"
10. Auflage
Buch- und Zeit- Verlagsgesellschaft mbH, Köln, 1973

- 2) K.R. Rushton / S.C. Redshaw
"Seepage and Groundwater Flow. Numerical Analysis by Analog and Digital Methods"
John Wiley & Sons, New York, 1979

Anhang 1 – Modellierung und Simulation von Grundwasserströmen auf einem Gebiet

1. Beispiel

Der Grundwasserfluß soll in diesem Beispiel für eine in einem See liegende quadratische Insel modelliert werden. Die Kantenlänge der Insel betrage 8 km. Für die Transmissivität des homogenen und isotropen Grundwasserleiters unter der Insel sei ein Wert von $40 \text{ m}^2/\text{d}$ angenommen. Bei einer Grundwasserleitermächtigkeit von 50 m deutet dieser Wert daraufhin, daß die Insel aus Sand besteht ([3], S.30). Auf der Insel soll es beständig regnen ($30 \text{ m}^3/\text{km}^2/\text{d}$). Genau in der Mitte der Insel befindet sich ein Entnahmebrunnen mit einer Förderleistung von 300 m^3 täglich. Das geförderte Wasser soll vollständig verbraucht werden und steht daher für eine Grundwasserneubildung nicht zur Verfügung.

Berechnet werden sollen die Standrohrspiegel über einer Bezugsebene, die auf der Insel im stationären Fall herrschen, d.h. nach Einstellung des Gleichgewichts zwischen Zufluß durch Regen und Abfluß in den See bzw. durch Entnahme aus dem Brunnen.

Die Standrohrspiegel können nur für endlich viele Punkte der Insel bestimmt werden (siehe Kapitel 2). Aus diesem Grund wird die Insel mit einem Gitter überzogen. Bei einer äquidistanten Gitterweite von $\Delta x = \Delta y = d = 1 \text{ km}$ ergibt sich ein Gitter mit 9×9 Knoten. Die Grundwasserstände in den auf dem Rand (Uferstreifen) liegenden Punkten entsprechen dem Wasserstand im See und sind bekannt. Hier sei ein Wasserstand von 10 m N.N. (10 m über Normal Null). angenommen. Die Zusammenfassung aller zu lösenden Gleichungen ergibt ein blocktriagonales lineares Gleichungssystem mit 49 Unbekannten (siehe Kapitel 2, Gl.(2.10)).

Die Koeffizientenmatrix A des LGS wird im Programm STATIONAER mit einem speicherplatzsparenden Algorithmus gebildet ([1], S.40) (A1.1). Das entstandene LGS (A1.2) kann nun mit jedem geeigneten Gleichungslöser bearbeitet werden. Innerhalb von STATIONAER wird ein Gauß-Jordan-Algorithmus für Bandmatrizen verwendet (A1.3). Das errechnete Ergebnis ist in (A1.4) dargestellt. Es fehlt in dieser Darstellung der Randstreifen, auf dem die h-Werte bekannt sind (10 m) und darum nicht berechnet werden müssen.

Bemerkung:

Das für die Simulation notwendige lineare Gleichungssystem muß im Programm STATIONAER für jede zu modellierende Situation neu gebildet werden, d.h. der Algorithmus zur Bildung der Koeffizientenmatrix muß jedesmal neu angepaßt und das Programm neu compiliert werden. Das Programm kann daher nur zur Demonstration der Matrixbildung sinnvoll eingesetzt werden. Zu diesem Zweck habe ich eine Schnittstelle implementiert, die es ermöglicht, die gebildete Matrix und die zugehörige Inhomogenität in einer Datei abzulegen.

(A1.1) Bildungsalgorithmus für das hier benötigte lineare Gleichungssystem

```

:
for i:=1 to n do a[i,hd] := 4;           { Hauptdiagonale }
for i:=1 to n do                       { Nebendiagonalen }
begin
  a[i,hd-1] := -1;
  a[i,hd+1] := -1;
end;
```

```

for i:=1 to ny do
begin
  a[i*nx,hd+1] := 0;
  a[i*nx+1,hd-1] := 0;
end;

for i:=nx+1 to n do a[i,hd-nx] := -1;      { Nebendiagonalen }
for i:=1 to n-nx do a[i,hd+nx] := -1;

for i:=1 to n do                               { Inhomogenitäten }
begin
  case i of
    2,3,4,5,6,8,                                { Randpunkte }
    14,15,21,22,28,29,35,36,42,
    44,45,46,47,48 : b[i] := 30/40+10;        { b[i] := 10,75 }
    1,7,43,49 : b[i] := 30/40+10+10;         { Eckpunkte, b[i] := 20,75 }
    25 : b[i] := (30-300)/40;                { Brunnen, b[i] := -6,75 }
    otherwise : b[i] := 30/40;                { sonstige , b[i] := 0,75 }
  end;
end;
end;

```

(A1.2) Das zu lösende lineare Gleichungssystem in speichersparender Notation

Zeile	hd												b					
1	0	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	20.75
2	0	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
3	0	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
4	0	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
5	0	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
6	0	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
7	0	0	0	0	0	0	0	-1	4	0	0	0	0	0	0	0	-1	20.75
8	-1	0	0	0	0	0	0	0	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
9	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
10	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
11	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
12	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
13	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
14	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	0	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
15	-1	0	0	0	0	0	0	0	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
16	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
17	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
18	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
19	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
20	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
21	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	0	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
22	-1	0	0	0	0	0	0	0	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
23	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
24	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
25	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	-6.75
26	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
27	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
28	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	0	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
29	-1	0	0	0	0	0	0	0	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
30	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
31	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75
32	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	-1	0.75

Zeile	hd												b				
33	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	-1	0.75
34	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	-1	0.75
35	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
36	-1	0	0	0	0	0	0	0	4	-1	0	0	0	0	0	-1	10.75
37	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	-1	0.75
38	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	-1	0.75
39	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	-1	0.75
40	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	-1	0.75
41	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	-1	0.75
42	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	0	0	0	0	0	0	-1	10.75
43	-1	0	0	0	0	0	0	0	4	-1	0	0	0	0	0	0	20.75
44	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	10.75
45	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	10.75
46	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	10.75
47	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	10.75
48	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	-1	0	0	0	0	0	0	10.75
49	-1	0	0	0	0	0	0	-1	4	0	0	0	0	0	0	0	20.75

Bemerkung:

Die in dieser Matrix gespeicherten Nullen werden später bei der Anwendung des Gauß-Jordan-Algorithmusses mit Werten überschrieben. Aus diesem Grund kann hier die Speicherung der Matrixelemente nicht kompakter erfolgen.

(A1.3) Gauß-Jordan-Algorithmus für Bandmatrizen in speichersparender Notation

```

{*****}
{*
{*      Gauß-Algorithmus für Bandmatrizen      *}
{*
{*      Letztes Editierdatum : 12.11.89        *}
{*
{*              (Hinter uns liegt das erste Wochenende
{*              nach Öffnung der Grenzen der DDR.
{*              Ca. 3.000.000 DDR-Bürger besuchten
{*              ohne Zwischenfälle die BRD.)
{*****}

```

```

PROCEDURE GAUSS_Band(      nx,ny : integer;      { Dimensionen      }
                        A      : gross_feld;    { Koeffizientenmatrix }
                        b      : vektor;       { Inhomogenität      }
                        VAR x   : vektor);      { Lösungsvektor      }

```

```

VAR  hd, n, mb : integer;      { Hauptdiagonale, n = nx*ny, Matrixbreite }
{-----}
{ LR-Zerlegung }

```

```

PROCEDURE LR_Zerlegung;

```

```

  VAR  i, j, k : integer;      { Laufvariablen }

```

```

BEGIN

```

```

  for k:=1 to n-1 do

```

```

    begin

```

```

      if a[k,hd] <> 0 then      { Normierung der k-ten Zeile      }

```

```

        begin

```

```

          for i:=hd+1 to mb do a[k,i] := a[k,i]/a[k,hd];

```

```

          b[k] := b[k]/a[k,hd]

```

```

        end;

```

```

    for i:=1 to nx do
        { Eleminieren der k+i-ten Zeile }
        if (k+i <= n) then
            if (a[k+i,hd-i] <> 0) then
                begin
                    for j:=(hd-i+1) to (hd-i+nx) do
                        a[k+i,j] := a[k+i,j] - a[k+i,hd-i]*a[k,j+i];
                        b[k+i] := b[k+i] - a[k+i,hd-i]*b[k]
                    end
                end { k }
            END;
        {-----}
        { Rückwärts einsetzen }
        PROCEDURE Rueckwaerts_einsetzen;
            VAR    j, k : integer;    { Laufvariablen }
                d   : integer;    { dummy }

            BEGIN
                if a[n,hd] <> 0 then x[n] := b[n]/a[n,hd];
                for k:=n-1 downto 1 do
                    begin
                        x[k] := b[k];
                        d := min(n,(k+nx));
                        for j:=k+1 to d do x[k] := x[k] - a[k,j-k+hd] * x[j]
                    end
                END;
            {-----}
            { Procedure Gauss_Band }

            BEGIN
                n := nx*ny;           { Größe der Matrix }
                hd := nx + 1;         { x-Koordinate der Hauptdiagonalen }
                mb := hd + nx;        { Breite der Matrix }
                LR_Zerlegung;         { LR-Zerlegung }
                Rueckwaerts_einsetzen; { Rückwärts einsetzen }
            END;

```

(A1.4) Das errechnete Ergebnis (die Position des Brunnens ist gekennzeichnet).

10.729	11.084	11.222	11.244	11.222	11.084	10.729
11.084	11.634	11.809	11.781	11.809	11.634	11.084
11.222	11.809	11.849	11.514	11.849	11.809	11.222
11.244	11.781	11.514	9.826	11.514	11.781	11.244
11.222	11.809	11.849	11.514	11.849	11.809	11.222
11.084	11.634	11.809	11.781	11.809	11.634	11.084
10.729	11.084	11.222	11.244	11.222	11.084	10.729

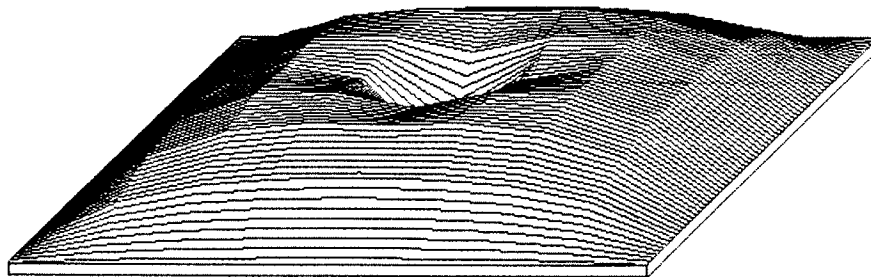
Im Gegensatz zum Programm STATIONAER lassen sich die benötigten Parameter im Programm GWF über eine Benutzeroberfläche komfortabel eingeben und verändern. Dieses Programm beruht auf den Beispielpogrammen SAM1 bis SAM6, die W. Kinzelbach in [1] vorgestellt hat. Die Berechnungsalgorithmen entsprechen nur noch zum Teil den von Kinzelbach implementierten. Insbesondere wurden die Algorithmen in "mathematischer" Notation (siehe

Kapitel 2 S. 23) ausgeführt. Selbständig habe ich die Benutzeroberfläche (unter Verwendung des GEM), die Ein- und Ausgabeprozedur für Matrizen und die Darstellung des Ergebnisses als Schnittgraphik entwickelt.

Die Modellierung des Problems mit diesem Programm kann wie folgt durchgeführt werden:

- 1) Nach dem Starten des Programms GWF.PRG ist im Menü "Datei" der Menüpunkt "neuer Datensatz" aufzurufen.
- 2) Die erscheinende Dialogbox kann mit der Returnntaste quittiert werden. Die hier einstellbaren Parameter brauchen bei diesem Problem nicht verändert werden bzw. haben in der jetzigen Entwicklungsstufe des Programms keinen Einfluß auf die Verarbeitung der Daten.
- 3) In dieser Dialogbox sind die Anzahl der Gitterpunkte in x- und y-Richtung sowie die zugehörigen Gitterweiten einzugeben.
- 4) Die Parameter der nächsten zwei Dialogboxen haben bei der Verwendung des Gauß-Jordan-Verfahrens keinen Einfluß auf die Berechnung des hier zu lösenden Problems.
- 5) Es ist ein Brunnen einzutragen.
- 6) Als Parameter für den Brunnen ist einzugeben: $x = 5$; $y = 5$; $Q = -300$ [m^3/d].
- 7) Die Standrohrspiegel sind auf 10[m] einzustellen. Dazu die Taste "g" drücken und den gewünschten Wert eingeben. Die Matriceingabe wird mit "a" verlassen.
- 8) Für die Transmissivitäten ist analog zum Punkt 7 global 40 [m^2/d] einzugeben.
- 9) Da eine stationäre Situation berechnet werden soll, müssen die Speicherkoeffizienten auf den Wert 0 gesetzt werden, weil dann der nicht benötigte Term $S \cdot (\partial h / \partial t)$ in der zu lösenden PDG (1.37) wegfällt. Die bekannten Randwerte werden durch Besetzen der zugehörigen Speicherkoeffizienten mit sehr großen Werten ($1\text{E}30$) erzwungen.
- 10) Der Regen kann durch die globale Eingabe von 30 [$\text{m}^3/\text{km}^2/\text{d}$] modelliert werden.
- 11) Die Bearbeitung ist durch anklicken des Menüpunktes "Implizites Verfahren (Gauß)" im Menü "Arbeit" zu starten. Nach einiger Zeit erhält man das Ergebnis zurück.
- 12) Im Menü "Arbeit" kann jetzt der Menüpunkt "Graphik" aufgerufen werden. Die folgende Abbildung wurde mit Hilfe der 3D-Darstellung erstellt (Abb. A1.1).

(Abb. A1.1) Darstellung des Berechneten Ergebnisses in 3D-Darstellung



Eine vollständige Bedienungsanleitung für das Programm GWF befindet sich im Anhang 4.

2. Beispiel

Dieses Beispiel ist dem Buch "Seepage and Groundwater Flow Numerical Analysis by Analog and Digital Methods" von K.R. Rushton und S.C. Redshaw [2] entnommen. Es soll hier ausführlich besprochen werden, da ich mit diesem Anwendungsbeispiel die Programme STATIONAER und GWF sowie das analoge Modell getestet und aufeinander geeicht habe. Das Versuchsprotokoll zum analogen Modell befindet sich im Anhang 2.

Rushton/Redshaw haben für ihr Anwendungsbeispiel den Grundwasserfluß in einem $10\text{ km} \times 6\text{ km}$ großen rechteckigen Gebiet modelliert, das an seinen Längsseiten von undurchlässigem Gestein begrenzt wird. Die östliche Seite grenzt an einen See, das Grundwasserpotential ist also an jeder Stelle des Ufers bekannt (0 m). Von der westlichen Seite des Gebietes ist nur bekannt, daß ein gleichmäßig über die gesamte Breite verteilter Zufluss von 6500 m^3 Wasser pro Tag in den gespannten Grundwasserleiter zu verzeichnen ist. Die Transmissivitäten T_x und T_y sind an jeder Stelle des homogenen und isotropen Grundwasserleiters bekannt ($T_x = T_y = 900\text{ m}^2/\text{d}$). Innerhalb des Gebietes sollen zwei Entnahmebrunnen betrieben werden (B_1 : $x = 8\text{ km}$, $y = 2\text{ km}$, $Q_{B_1} = -4500\text{ m}^3/\text{d}$; B_2 : $x = 4\text{ km}$, $y = 4\text{ km}$, $Q_{B_2} = -1500\text{ m}^3/\text{d}$) (siehe auch Abb. A1.2).

Für die Berechnung der Standrohrspiegel wird auch in diesem Beispiel das Programm STATIONAER verwendet. Die undurchlässigen Ränder ($\partial h / \partial \vec{n} \big|_{\Gamma} = 0$) und der Eintrag durch den westlichen Rand ($\partial h / \partial \vec{n} \big|_{\Gamma} = q$) werden gemäß Kapitel 2.4.2.1 und 2.4.2.2 modelliert. Für die im zugehörigen linearen Gleichungssystem auf der Seite der Inhomogenitäten einzusetzenden Zu- und Abflüsse, sind die folgenden Überlegungen anzustellen:

1) Zuflüsse

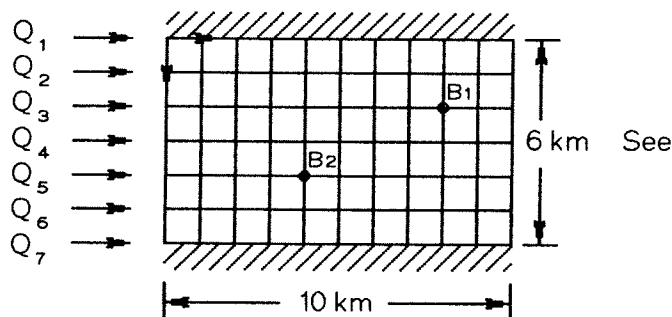
1.1) Mit dem Darcy'schen Gesetz (1.2) und nach der Einführung der Transmissivitäten (Kap. 1.1.6) ergibt sich für die pro Zeiteinheit in Richtung des Gefälles bewegte Menge Wasser

$$(1.14) \quad Q = -T \cdot b \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right]$$

wobei b die Breite des durchflossenen Grundwasserleiters repräsentiert.

Bei einer äquidistanten Gitterweite des über das zu modellierende Gebiet gelegten Gitters von $d = 1\text{ km}$, ergibt sich eine Aufteilung des Gebietes in 7 Gitterlinien in der Breite und 11 in der Länge. Der Gesamteintrag ($6500\text{ m}^3/\text{d}$) muß also auf 7 Einträge aufgeteilt werden. Aus der Lage der Gitterlinien folgt für die Breite b des im Darcy'schen Gesetz betrachteten Grundwasserleiterstreifens für die Einträge Q_i , $i = 2, \dots, 5$ $b = 1\text{ km}$ und für die Einträge Q_1 und Q_2 $b = 0,5\text{ km}$ (siehe auch Abb. (A1.2)).

(Abb. A1.2)



Die Filtergeschwindigkeit soll, ohne den Einfluß der Brunnen, in allen Grundwasserleiterstreifen gleich groß sein, d.h.

$$(A1.5) \quad \vec{V} = \frac{Q_i}{b \cdot M} = -k_f \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \left[\frac{\text{m}}{\text{d}} \right] \quad i = 1, 2, \dots, 7$$

M Mächtigkeit des Grundwasserleiters (M sei hier konstant).

Daraus folgt

$$(A1.6) \quad \frac{Q_1}{500 \cdot M} = \frac{Q_2}{1000 \cdot M} = \frac{Q_3}{1000 \cdot M} = \dots = \frac{Q_6}{1000 \cdot M} = \frac{Q_7}{500 \cdot M} \left[\frac{\frac{\text{m}^3}{\text{d}}}{\text{m}^2} \right]$$

Setzt man für $Q_i = Q \text{ [m}^3/\text{d}]$ $i = 2, \dots, 6$ ein, so ergibt sich für Q_1 und Q_7

$$(A1.7) \quad Q_1 = Q_7 = \frac{1}{2} \cdot Q \left[\frac{\text{m}^3}{\text{d}} \right]$$

Damit gilt für den Gesamteintrag Q_E

$$(A1.8) \quad 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot Q + 5 \cdot Q = Q_E \left[\frac{\text{m}^3}{\text{d}} \right]$$

$$\Leftrightarrow 6 \cdot Q = Q_E \left[\frac{\text{m}^3}{\text{d}} \right]$$

$$\Leftrightarrow Q = \frac{Q_E}{6} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{d}} \right]$$

In der für die Bearbeitung dieses Beispiels verwendeten Strömungsgleichung (1.40) werden die Zu- und Abflüsse q_i in Volumen $[\text{m}^3]$ pro Zeiteinheit $[\text{d}]$ und der zum Knoten gehörenden Eintragsfläche $[\text{km}^2]$ in der x, y -Ebene verarbeitet.

Bedingt durch die Randlage der Eintragspunkte, ergibt sich für die Einträge Q_i $i = 2, \dots, 6$ eine Eintragsfläche von $d^2/2 \text{ [km}^2]$. Für die Einträge Q_1 und Q_2 ist die Eintragsfläche nur $d^2/4 \text{ [km}^2]$ groß.

Für die in der Inhomogenität einzusetzenden Eintragsmengen q_i $i = 1, 2, \dots, 7$ folgt nun

$$(A1.9a) \quad q_i = \frac{Q_i}{d^2/4} = \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{Q_E}{6}}{d^2/4} \left[\frac{\frac{\text{m}^3}{\text{d}}}{\text{km}^2} \right] \quad \text{für } i = 1 \text{ und } 7$$

und

$$(A1.9b) \quad q_i = \frac{Q_i}{d^2/2} = \frac{\frac{Q_E}{6}}{d^2/2} \left[\frac{\frac{\text{m}^3}{\text{d}}}{\text{km}^2} \right] \quad \text{für } i = 2, \dots, 6$$

Da der Grundwasserleiter homogen und isotrop ist, kann die Strömungsgleichung (1.40) benutzt werden. Aus der zugehörigen Differenzenapproximation (2.14) ergibt sich für die Inhomogenitäten der Differenzgleichung für die Knoten $K_{i \cdot 10-11}$ (in globaler Indizierung) für $i = 2, \dots, 6$ und $Q_E = 6500 \text{ m}^3$

$$(A1.10a) \quad b_{i \cdot 10-11} = -d^2 \cdot \left[-\frac{Q_E/6}{T} \right] = \frac{2 \cdot 6500}{900} \left[\text{km}^2 \cdot \frac{\frac{\text{m}^3}{\text{d}}}{\frac{\text{km}^2}{\text{m}^2/\text{d}}} \right] = 2,407 \text{ [m]}$$

Für die Eckknoten K_1 und K_{67} folgt analog mit $i=1$ und 7

$$(A1.10b) \quad b_{1,10-11} = -d^2 \cdot \left[-\frac{\frac{1}{2} \cdot Q_E / 6}{d^2/4} \right] = \frac{2 \cdot 6500}{900} \left[\text{km}^2 \cdot \frac{\frac{\text{m}^3}{\text{d}}}{\frac{\text{km}^2}{\frac{\text{m}^2}{\text{d}}}} \right] = 2,407 \text{ [m]}$$

2) Abflüsse

Die Repräsentationsflächen der Brunnen betragen jeweils $1\text{km} \times 1\text{km} = 1\text{km}^2$. Für die zu den Brunnenpunkten gehörenden Inhomogenitäten ergibt sich analog zu den Zuflüssen:

$$(A1.11) \quad b_{B_1} = b_{31} = -1 \cdot \frac{4500}{900} \text{ [m]}$$

$$(A1.12) \quad b_{B_2} = b_{49} = -1 \cdot \frac{1500}{900} \text{ [m]}$$

(A1.13) Bildungsalgorithmus für das hier benötigte lineare Gleichungssystem

```
for i:=1 to n do a[i,hd] := 4;    { Hauptdiagonale }
```

```
for i:=1 to n do
```

```
begin
```

```
  a[i,hd-1] := -1; a[i,hd+1] := -1;
```

```
end;
```

```
for i:=1 to ny do
```

```
begin
```

```
  a[i*nx,hd-1] := 0;
```

```
  a[i*nx,hd+1] := 0;
```

```
  a[i*nx-1,hd+1] := 0;
```

```
  a[i*nx+1,hd-1] := 0;
```

```
  a[i*nx-(nx-1),hd+1] := -2;
```

```
end;
```

```
for i:=nx+1 to n-nx do
```

```
begin
```

```
  a[i,hd-nx] := -1;
```

```
  a[i,hd+nx] := -1;
```

```
end;
```

```
for i:=2 to ny-1 do
```

```
begin
```

```
  a[i*nx,hd-nx] := 0;
```

```
  a[i*nx,hd+nx] := 0;
```

```
end;
```

```
for i:=1 to nx-1 do a[i,hd+nx] := -2;
```

```
for i:=n-nx+1 to n-1 do a[i,hd-nx] := -2;
```

```
{ Inhomogenitäten }
```

```
for i:=1 to 7 do b[i*11-10] := 2*6500/6/900;
```

```
b[31] := - 4500/900;
```

```
b[49] := - 1500/900;
```

(A1.14) Das errechnete Ergebnis (die Positionen der Brunnen sind gekennzeichnet).

8.752	7.556	6.377	5.222	4.101	3.021	1.982	1.015	0.261	0.033	0
8.745	7.547	6.365	5.205	4.080	3.001	1.945	0.909	-0.003	-0.064	0
8.725	7.524	6.331	5.153	4.014	2.956	1.890	0.678	-1.116	-0.287	0
8.698	7.492	6.281	5.063	3.867	2.919	1.982	1.029	0.147	0.031	0
8.677	7.467	6.237	4.952	3.472	2.870	2.090	1.309	0.643	0.265	0
8.668	7.461	6.247	5.035	3.867	2.997	2.201	1.472	0.853	0.385	0
8.667	7.461	6.257	5.073	3.965	3.051	2.245	1.526	0.913	0.421	0

Durch die hohe Förderleistung des Brunnen B_1 entsteht ein Gefälle vom See in den Brunnen. Damit wird das Brunnenwasser durch nachfließendes Seewasser ergänzt bzw. evtl. ver-seucht (Brackwasser, Salzwasser). Daher ist dieser Effekt bei der Planung einer Brunnen-anlage zu beachten. Werden die Entnahmel Leistungen der beiden Brunnen bei gleicher Gesamt-fördermenge von $6000 \text{ m}^3/\text{d}$ auf $Q_{B_1} = 1000 \text{ m}^3/\text{d}$ und $Q_{B_2} = 5000 \text{ m}^3/\text{d}$ festgesetzt, so ergibt sich das folgende Berechnungsergebnis:

(A1.15)	6.342	5.172	4.079	3.091	2.248	1.577	1.048	0.624	0.300	0.122	0
	6.308	5.134	4.027	3.018	2.161	1.506	0.996	0.574	0.227	0.094	0
	6.216	5.027	3.876	2.795	1.873	1.290	0.855	0.449	-0.060	0.028	0
	6.094	4.884	3.655	2.411	1.246	0.927	0.685	0.426	0.169	0.076	0
	5.987	4.757	3.451	1.948	-0.226	0.485	0.532	0.400	0.234	0.108	0
	5.932	4.708	3.443	2.155	0.973	0.708	0.559	0.409	0.258	0.124	0
	5.917	4.698	3.460	2.256	1.254	0.814	0.587	0.418	0.265	0.128	0

Bei dieser Wahl der Förderleistungen bildet sich zwischen dem Brunnen B_1 und dem See ein sogenannter "Kulminationspunkt". Dieser wirkt praktisch als Wasserscheide, d.h. es kann kein Wasser vom See in den Brunnen fließen.

Bemerkung:

Bei Rushton/Redshaw wird diese Situation bereits durch das bloße Vertauschen der Förder-leistungen der Brunnen erreicht. Die Verfasser geben jedoch einen Mengenbilanzfehler von 2% der Gesamtfördermenge bedingt durch die Verwendung eines analogen Modells an.

Die Modellierung dieses Beispiels mit dem Programm GWF gelingt auf Grund der in Kapitel 3 (S.51) genannten Gründe nicht, bzw. sie führt zu Werten, die nicht direkt vergleichbar sind mit den durch das Programm STATIONAER ermittelten.

Literaturangabe zum Anhang 1

- 1) Wolfgang Kinzelbach
"Groundwater Modelling. An Introduction with Sample Programs in BASIC"
1. Auflage
Elsevier, Amsterdam, 1986
- 2) K.R. Rushton / S.C. Redshaw
"Seepage and Groundwater Flow Numerical Analysis by Analog and Digital Methods"
John Wiley & Sons, New York, 1979
- 3) Heath (Übersetzt von A. Rothascher und W. Veit)
"Einführung in die Grundwasserhydrologie"
R. Oldenburg Verlag, München, Wien, 1988

Anhang 2 - Ein analoges Modell im praktischen Versuch

Der im folgenden dargestellte Versuch modelliert einen gespannten Grundwasserleiter auf einem Gebiet G in einer stationären Situation. Die hydrogeologischen Bedingungen, die in diesem Gebiet herrschen sollen, und die zugehörige Skalierung wurden im Kapitel 4.4 ausführlich besprochen. Es soll an dieser Stelle ein einfach nachzuvollziehender Versuch aufgebaut und durchgeführt werden.

Versuchsmaterial

Lötwerkzeug (z.B. LötKolben, Lötzinn, Seitenschneider, etc.)

1 Brett 40x80 cm

einige Heftzwecken

div. Drähte

div. Meßleitungen mit Klemmen

110 Widerstände $10\text{ K}\Omega$ / $1/2\text{ W}$ R21-R130

20 Widerstände $20\text{ K}\Omega$ / $1/2\text{ W}$ R1-R20

5 Widerstände $100\text{ K}\Omega$ / $1/2\text{ W}$ R132-R136

2 Widerstände $200\text{ K}\Omega$ / $1/2\text{ W}$ R131, R137

1 Widerstand $1\text{ K}\Omega$ R138

1 Widerstand $24\text{ K}\Omega$ R139

1 Trimpotentiometer $1\text{ K}\Omega$ P1

1 Trimpotentiometer $10\text{ K}\Omega$ P2

2 regelbare, stabilisierte Netzgeräte $27\text{ V}/0.5\text{ A}$

(Eigenbau aus stabilisierten Netzblock, Labor-Netzregelkarte Hötronik-Nr.25/3, 10-Gang-Präzisionspotentiometer)

1 Digitalvoltmeter (Voltcraft "GS 6520 Multimeter", Fehlertoleranz: $0,5\% + 1\text{ Digit}$ vom Meßwert)

1 Digitalvoltmeter (Monacor "DMT-5500", $R_i = 10\text{ M}\Omega$, Fehlertoleranz: $0,05\% + 2\text{ Digit}$ vom Meßwert)

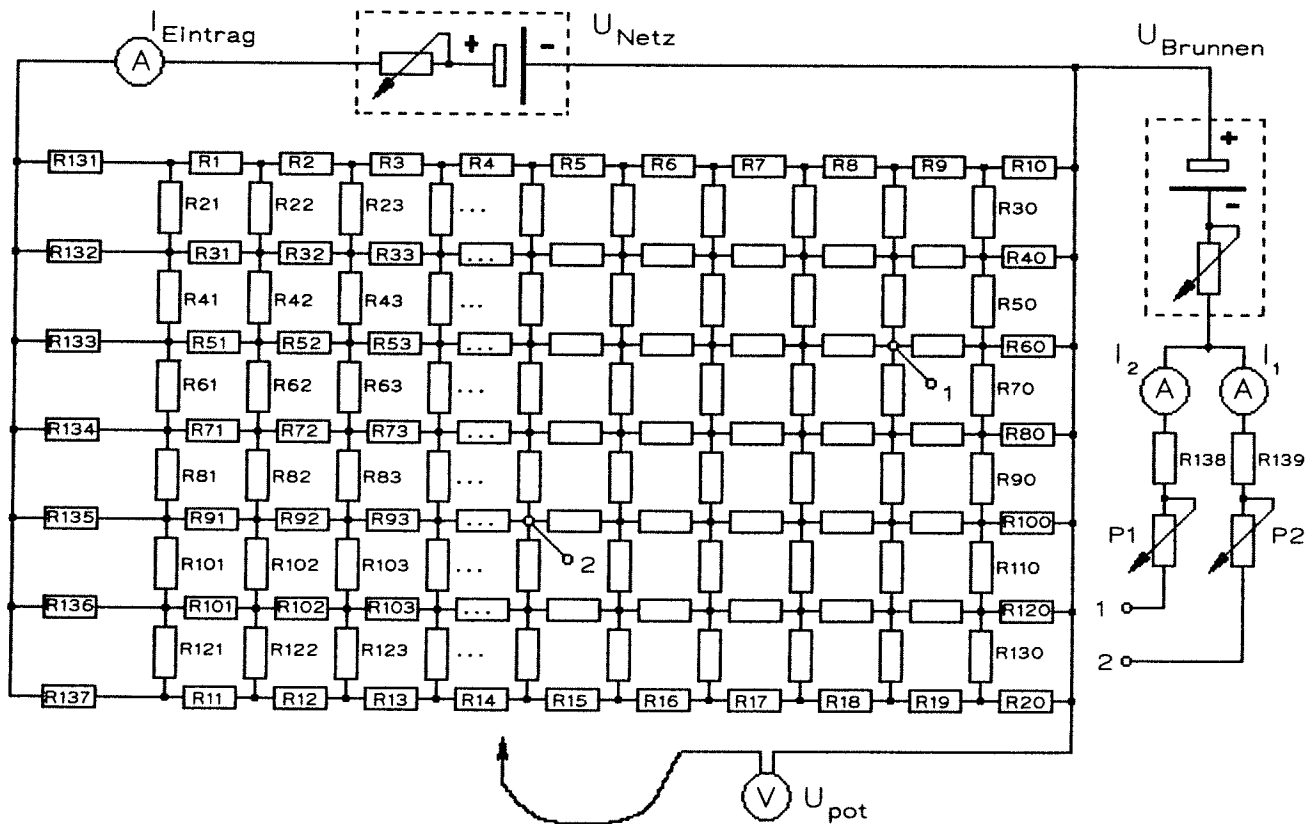
2 Digitalvoltmeter (BBC "MA 5D", Fehlertoleranz: $0,05\% + 1\text{ Digit}$ vom Meßwert)

Versuchsaufbau

Das zu modellierende Gebiet wird mit einem Gitter überdeckt. Die Gitterlinien werden dabei durch die Widerstände R1-R130 gebildet, d.h. die Widerstände werden zu einem Netz zusammengesetzt. Die Knotenpunkte dieses Netzes entstehen durch das Zusammenlöten der zum jeweiligen Knoten gehörenden Widerstände. Beim Bau des Netzes gemäß dem Schaltplan (A2.1) ist auf einwandfreie Verbindungen zu achten. Sinnvoll ist das Fixieren des Netzes mit Hilfe von Heftzwecken auf einem Experimentierbrett (Spanplatte oder ähnliches).

Der Anschluß der Spannungsquellen und der Meßgeräte erfolgt ebenfalls gemäß dem Schaltplan (A2.1). Dabei ist besonders auf die richtige Polung der Meßgeräte zu achten. Zum Versuchsaufbau siehe auch die Abbildung (A2.2).

Schaltplan
(A2.1)



- Widerstand;
 Potentiometer;
 regelbare Spannungsquelle;
- Amperemeter;
 Voltmeter;
 bewegliche Meßleitung

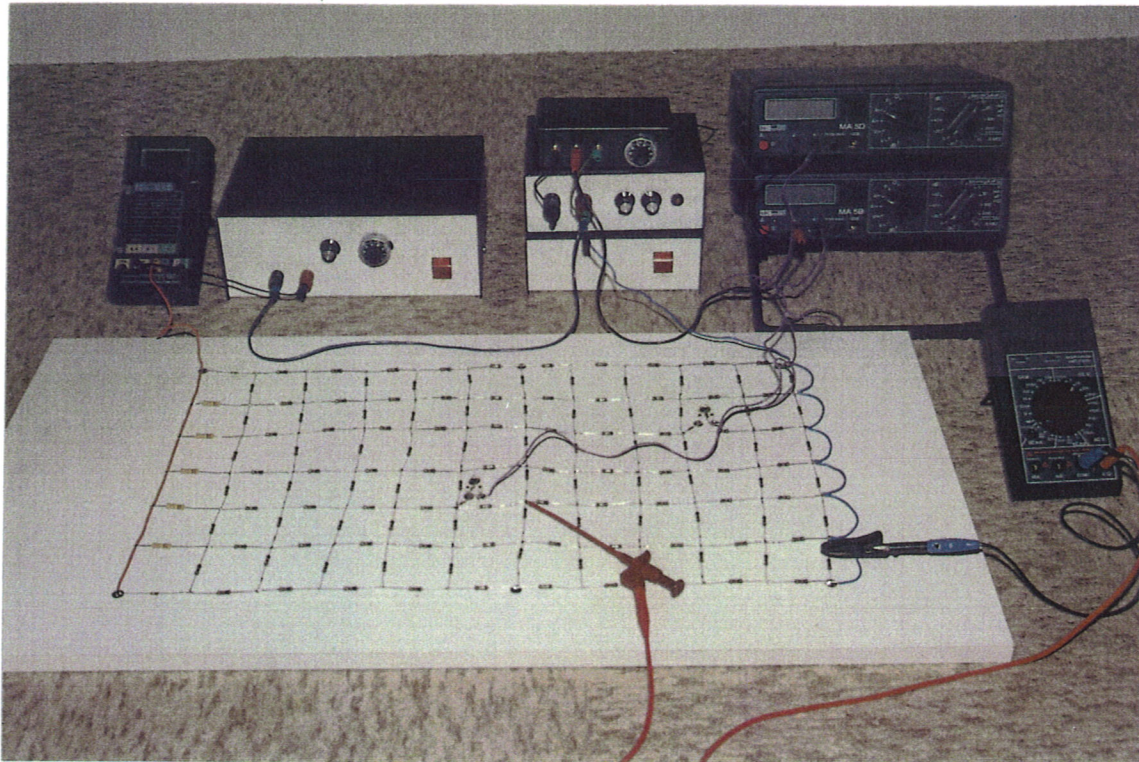
(Abb. A2.2)

Amperemeter
für I_{Eintrag}

Netzteil für
 U_{Netz}

Netzteil für
 U_{Brunnen}

Amperemeter für
 I_{Q1}
 I_{Q2}



DIVO für
Aufnahme
der Potentiale
in den Gitter-
punkten

Versuchsdurchführung

Mit den regelbaren Netzgeräten und den Trimpotentiometern P1 und P2, sind die Ströme I_{Eintrag} ($= 0,722 \text{ mA}$), I_1 ($= 0,5 \text{ mA}$) und I_2 ($= 0,167 \text{ mA}$) einzustellen. Dabei ist zu beachten, daß die Verstellung eines Potentionmeters (P1 oder P2) bzw. einer Spannung (U_{Netz} oder U_{Brunnen}) Auswirkungen auf alle einzustellenden Ströme hat.

Nach dem korrekten Einstellen der Ströme können die Spannungen U_{pot} aller Knoten mit dem Digitalvoltmeter (DMT-5500) aufgenommen werden.

Versuchsergebnisse

Die mit dem Digitalvoltmeter aufgenommen Potentiale sind in der folgenden Matrix (A2.3) dargestellt (siehe dazu auch die handschriftliche Protokollmitschrift (S. 86)).

(A2.3)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	8,71	7,53	6,37	5,21	4,09	3,02	1,98	1,01	0,26	0,03	0
2	8,72	7,54	6,36	5,20	4,08	3,00	1,95	0,91	-0,00	-0,06	0
3	8,72	7,52	6,33	5,15	4,01	2,96	1,89	0,68	-1,12	-0,29	0
4	8,70	7,50	6,28	5,07	3,87	2,92	1,98	1,03	0,15	0,03	0
5	8,70	7,46	6,23	4,95	3,47	2,87	2,09	1,31	0,64	0,26	0
6	8,67	7,46	6,24	5,03	3,86	2,99	2,20	1,47	0,85	0,38	0
7	8,66	7,45	6,25	5,07	3,96	3,05	2,24	1,52	0,91	0,42	0

(Die fett geschriebenen Werte repräsentieren die Knoten, bei denen ein Strom abgeführt wurde, d.h. ein Brunnen modelliert wurde.)

Stellt man dieses Meßergebnis dem Meßergebnis aus [1] gegenüber, so ergibt sich die folgende Differenzenmatrix (A2.4) (Werte von (A2.3) - in [1] publizierte Werte (S. 141)):

(A2.4)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	-0.05	-0.05	-0.05	-0.06	-0.06	-0.05	-0.04	-0.04	-0.08	-0.05	0
2	-0.04	-0.02	-0.04	-0.05	-0.06	-0.04	-0.03	-0.03	-0.02	-0.02	0
3	-0.01	-0.02	-0.04	-0.04	-0.05	-0.04	-0.04	-0.02	-0.02	-0.03	0
4	0.01	0.00	-0.05	-0.03	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	-0.02	-0.01	0
5	0.02	-0.02	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.05	-0.03	-0.04	-0.02	0
6	0.01	-0.01	-0.03	-0.04	-0.05	-0.06	-0.04	-0.04	-0.04	-0.02	0
7	0.00	-0.02	-0.04	-0.04	-0.06	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.03	0

Bemerkung:

Die im Kapitel 4.4.3 durchgeführte Bilanzrechnung (4.27) für die von mir gemessenen Werte weist einen Fehler von $9 \text{ m}^3/\text{d}$ (das entspricht $0,14\%$ der Pumpleistung des kleinsten Brunnen) aus. Rushton/Redshaw ermittelten bei ihrem Experiment einen Fehler von $-120 \text{ m}^3/\text{d}$. Dies entspricht 8% der Förderleistung des kleinsten Brunnen (S. 140).

Literaturangabe zum Anhang 2 1) Rushton / S.C. Redshaw

"Seepage and Groundwater Flow. Numerical Analysis by Analog and Digital Methods"
John Wiley & Sons, New York, 1979

Aufnahme	der	Meßwerte	3	4	5	6	7	8	9	10	11	
1	8,71	7,53	6,37	5,21	4,09	3,02	1,98	1,01	0,26	0,03	0	
2	8,72	7,54	6,36	5,20	4,08	3,00	1,95	0,91	-0,00	-0,06	0	
3	8,72	7,52	6,33	5,15	4,01	2,96	1,89	0,68	-1,12	-0,29	0	
4	8,70	7,50	6,28	5,07	3,87	2,92	1,98	1,03	0,15	0,03	0	
5	8,70	7,46	6,23	4,95	3,47 ^{B2}	2,87	2,09	1,31	0,64	0,26	0	
6	8,67	7,46	6,24	5,03	3,86	2,99	2,20	1,47	0,85	0,38	0	
7	8,66	7,45	6,25	5,07	3,96	3,05	2,24	1,52	0,91	0,42	0	
alle Werte im [V]												
Ⓐ Eintrag	Vollkraft	GS 6520 Multimeter										Meßwert: 0,722 mA
Ⓐ a ₁	BBC	" MA 50										Meßwert: 0,500 mA
Ⓐ a ₂	BBC	" MA 50										Meßwert: 0,167 mA
	Monacor	" DMT - 5500										



Anhang 3 - Der "Young - Test"

Eine wichtige Bedingung für die Anwendbarkeit des Satzes (3.39) im 3. Kapitel ist die konsistente Ordnung der Koeffizientenmatrix des linearen Gleichungssystems. Nur wenn die Koeffizientenmatrix konsistent geordnet ist, kann der optimale Relaxationsparameter mit Hilfe der Methode 2 und der von Carré explizit bestimmt werden. Vor Anwendung dieser Methoden empfiehlt sich daher die Durchführung eines Testes auf konsistente Ordnung der Koeffizientenmatrix. Im Programm GWF kann dieser Test bei Bedarf durchgeführt werden. Der folgende Testalgorithmus ist dem Buch von Young "Iterative Solution of large linear Systems" [1] (S. 158 - 161) entnommen und in Pascal-Notation implementiert.

```

{*****}
{*                                           *}
{*   Procedure Matrixtester                                           *}
{*                                           *}
{*   Die Procedure nimmt verschiedene Tests vor.                       *}
{*                                           *}
{*       1. Property A und konsistente Ordnung (nach Young)           *}
{*       2. Zerlegbarkeit (folgt aus Satz 3.42.1)                       *}
{*       3. Zeilensummenkriterium (folgt aus Satz 3.42.2)             *}
{*                                           *}
{*   Programmautor : Rainer Sieger                                       *}
{*                                           *}
{*   letztes Editierdatum : 13.8.1989                                     *}
{*                                           *}
{*****}
PROCEDURE Matrixtester(nx,ny,dx,dy : integer; T,S : feld);
  VAR i, j, k, n      : integer;      { Laufvariablen                }
      R              : Test_feld;
      A              : LGS_feld;
      g_quer, g      : LGS_vektor;   { geordnete Vektoren der Matrix A }
      c, d           : LGS_vektor;   { Dummyvektoren                  }

      construct_g    : boolean;
      consistent     : boolean;
      Property_A     : boolean;
      A_schleife     : boolean;
      streichen      : boolean;
      dummy          : integer;

      T1,T2,T3,T4    : real;          { dummys                          }

BEGIN
{*****}
{*                                           *}
{*   A_bilden                                                         *}
{*                                           *}
{*   Bildet aus den den gegebenen Daten (Transmissivität und Speicher- *}
{*   fähigkeit ) die Matrix A des LGS.                               *}
{*                                           *}
{*   Programmautor : Rainer Sieger                                       *}
{*                                           *}
{*   letztes Editierdatum : 6.8.89                                       *}
{*                                           *}
{*****}

```

```

cls;
gotoxy(3,2); writeln('Matrixtester. Matrix A wird gebildet. ');
n := nx*ny;

{ Löschen der Matrizen A und R }
for i:=1 to n do { Zeilen }
  for j:=1 to 5 do { Spalten }
    a[i,j] := 0;
for i:=1 to n do
  for j:=1 to n do
    r[i,j] := false;
{ Transmissivitäten berechnen }
for i:=1 to ny do { zeilen }
  for j:=1 to nx do { spalten }
    begin
      if t[i-1,j] + t[i,j] <> 0 then
        T1 := 2 * t[i-1,j] * t[i,j] / (t[i-1,j] + t[i,j])/dy/dy
      else T1 := 0;
      if t[i,j-1] + t[i,j] <> 0 then
        T2 := 2 * t[i,j-1] * t[i,j] / (t[i,j-1] + t[i,j])/dx/dx
      else T2 := 0;
      if t[i,j+1] + t[i,j] <> 0 then
        T3 := 2 * t[i,j+1] * t[i,j] / (t[i,j+1] + t[i,j])/dx/dx
      else T3 := 0;
      if t[i+1,j] + t[i,j] <> 0 then
        T4 := 2 * t[i+1,j] * t[i,j] / (t[i+1,j] + t[i,j])/dy/dy
      else T4 := 0;

      k := (i-1)*nx + j; { Zeile und Spalte im LGS für w[i,j] }

      a[k,1] := -T1;
      a[k,2] := -T2;
      a[k,3] := T1 + T2 + T3 + T4 + S[i,j];
      a[k,4] := -T3;
      a[k,5] := -T4;

      { Setzen von R }
      if (T1 <> 0) and (k-nx >= 1) then r[k,k-nx] := true;
      if (T2 <> 0) and (k-1 >= 1) then r[k,k-1] := true;
      if (T3 <> 0) and (k+1 <= n) then r[k,k+1] := true;
      if (T4 <> 0) and (k+nx <= n) then r[k,k+nx] := true;
    end;

{*****}
{*
{* Test der Matrix auf Property A und konsistente Ordnung.
{* Der Algorithmus ist dem Buch von Young entnommen.
{*
{* letztes Editierdatum : 6.8.1989
{*
{*
{*****}

gotoxy(3,5); write('Young-Test läuft. Bitte warten. ');
for i:=1 to n do
  for j:=1 to n do
    if r[i,j]=true then r[j,i] := true;
{ Streichen der Nullzeilen und -Spalten }
for k:=1 to n do
  d[k] := 0;
k := 1;

```

```

for i:=1 to n do
begin
  j := 0;
  repeat
    j := succ(j);
    streichen := true;
    if (i <> j) and (r[i,j] = true) then streichen := false;
  until (not streichen) or (j >= n);
  if streichen then
  begin
    d[k] := i;
    k := succ(k);
  end;
end;
dummy := n;
for k:=dummy downto 1 do
begin
  if d[k] > 0 then
  begin
    n := n-1;
    for i:=d[k] to n do
      for j:=1 to n+1 do
        r[i,j] := r[i+1,j];

    for j:=d[k] to n do
      for i:=1 to n do
        r[i,j] := r[i,j+1];
  end;
end;
gotoxy(3,7); write('Es wurden ',dummy-n:3,' Zeilen und Spalten');
           write(' gestrichen');

construct_g := true;
Property_A := true;
consistent := true;
c[1] := 1; d[1] := 1;
g_quer[1] := 1; g[1] := 1;
for i:=2 to n do
begin
  c[i] := 0;
  d[i] := 0;
end;

i := 1; { Beginn des Young-Test }
repeat
  j := 1;
  repeat
    if r[i,j] = true then
    begin
      dummy := 1-g_quer[i];
      if c[j]=0 then
      begin
        g_quer[j] := dummy;
        d[j] := 1;
      end
    else
      if g_quer[j] <> dummy then
        Property_A := false;
      if Property_A then
      begin
        if construct_g then
        begin
          if j > i then dummy := g[i] + 1;
          if j < i then dummy := g[i] - 1;

```

```

        if c[j] = 0 then
            g[j] := dummy
        else
            if g[j] <> dummy then
                begin
                    construct_g := false;
                    consistent := false;
                end;
            end;
            c[j] := 1;
        end;
    end;
    j := succ(j);
until (j > n) or (not Property_A);
if Property_A then
begin
    d[i] := 0;
    k := 1;
    repeat
        if d[k] <> 0 then
            begin
                i := k;
                k := succ(n);
                A_schleife := true;
            end
        else
            if c[k] = 0 then
                begin
                    i := k;
                    c[i] := 1; d[i] := 1;
                    g_quer[i] := 1; g[i] := 1;
                    k := succ(n);
                    A_schleife := true
                end
            else
                begin
                    k := succ(k);
                    A_schleife := false
                end;
            until (k > n);
        end;
until (not A_schleife) or (not Property_A);
if not Property_A then
begin
    gotoxy(3,6); write(' A hat nicht die Property A.')
end
else
    if consistent then
        begin
            gotoxy(3,6);
            write('A hat die Property A und ist konsistent geordnet');
        end
    else
        begin
            gotoxy(3,6); write('A hat die Property A.');
```

```

end;
{*****}
{*                                           *}
{*      Procedure Zeilensummenkriterium      *}
{*                                           *}
{*                                           *}

```

```

{*   Test ob A ein Seilensummenkriterium erfüllt.                                *}
{*   Programmautor : Rainer Sieger                                             *}
{*   Letztes Editerdatum : 6.8.1989                                          *}
{*                                                                              *}
{*                                                                              *}
{*****}

gotoxy(3,9); write('Test auf Zeilensummenkriterium. ');
gotoxy(3,10); write('A erfüllt das schwache Zeilensummenkriterium nach');
gotoxy(3,11); write('Satz (3.42.1)');

{*****}
{*   PROCEDURE Zerlegbarkeit                                                  *}
{*   Test ob eine Matrix A zerlegbar oder unzerlegbar ist.                   *}
{*   Programmautor : Rainer Sieger                                             *}
{*   Letztes Editerdatum : 6.8.1989                                          *}
{*                                                                              *}
{*****}

gotoxy(3,13); write('Test auf Zerlegbarkeit. ');
gotoxy(3,14); write('A ist irreduzibel nach Satz (3.42.2)');
warten;

END;
```

Literaturangabe zum Anhang 3

- 1) David M. Young
 "Iterative Solution of large linear Systems"
 Academic Press, New York, London, 1971

Anhang 4 - Anleitung zum Programm GWF (Grundwasserfluß)

Einführung

Das Programm GWF berechnet die Standrohrspiegel in gespannten Grundwasserleitern. Es ist lauffähig auf einem ATARI 1040 ST mit Monochrombildschirm. Implementiert wurde das Programm mit dem ST Pascal⁺ V2.06 - Entwicklungssystem der Firma CCD. Dabei habe ich besonderen Wert auf eine leichte Benutzerführung gelegt. Das Programm ist daher fast vollständig in die GEM-Oberfläche des ATARI ST eingebunden. Die Programmidee und ein Großteil der Algorithmen stammen aus dem Buch "Groundwater Modelling" von Wolfgang Kinzelbach [1]. Die Simulation (d.h. die Lösung der zugehörigen partiellen Differentialgleichungen) wird mit finiten Differenzenverfahren durchgeführt. Die Lösung der dabei entstehenden linearen Gleichungssysteme kann mit verschiedenen direkten und iterativen Verfahren ermittelt werden.

Nach dem Start des Programms GWF.PRG erscheint zunächst die Infobox des Programms mit dem Namen des Programms, dem Namen des Programmautors und dem Hinweis auf das verwendete Entwicklungssystem. Die Box kann durch Drücken der Return-Taste oder durch Mausklick auf das OK-Feld verlassen werden.

Auf der nun leeren Arbeitsfläche (Desktop) befindet sich eine Menüleiste mit den Menüpunkten "Desk", "Datei", "Parameter", "Felder", "Arbeit" und "Sonstiges". Das Programm wird also, wie bei Programmen für den ATARI ST üblich, über Pull-Down-Menüs bedient. Die Menüs und ihre Untermenüs im einzelnen:

1. Desk

1.1 Grundwasserfluß

Die am Programmstart automatisch erscheinende Infobox kann auf den Bildschirm gebracht werden.

1.2 Namen der geladenen Accessories

Evtl. geladene Accessories (speicherresidente Programme mit der Extension ".ACC"). Zerstören die gestarteten Accessories die Benutzeroberfläche, so ist einfach ein neuer Menüpunkt anzuwählen. Den Aufwand der Bildschirmspeicher-Rettung vor dem Aufruf der Accessories wollte ich nicht treiben (unschön, aber selbst das Programm SIGNUM!2 verzichtet aus diesem Grund auf ACC's).

2. Datei

2.1 Datensatz laden...

Der evtl. vorher bearbeitete Datensatz wird komplett gelöscht. Anschließend kann über die Fileselectbox des Betriebssystems ein neuer Datensatz vom Massenspeicher geladen werden.

2.2 neuer Datensatz

Der evtl. vorher bearbeitete Datensatz wird komplett gelöscht. Anschließend folgt automatisch nacheinander der Aufruf der Menüpunkte (3.1), (3.2),..., (3.6), (4.1),..., (4.4). Zur Erstellung eines neuen Datensatzes müßten diese Menüpunkte sonst per Hand nacheinander aufgerufen werden. Der Menüpunkt "neuer Datensatz" erleichtert diese Arbeit, ist aber nicht unbedingt erforderlich.

- 2.3 Datensatz sichern
Wurde ein Datensatz bearbeitet, d.h. geladen oder erstellt, so sind die beiden folgenden Menüpunkte anwählbar. Bei Anwahl des Menüpunktes "Datensatz sichern" wird der Datensatz in die in (2.1) bestimmte Datei geschrieben. Achtung ! Der alte Datensatz wird überschrieben.
- 2.4 Datensatz sichern als...
Wie (2.3). Jedoch kann der Dateiname mit Fileselectbox des Betriebssystems bestimmt werden. Die Dateierweiterung muß ".DAT" lauten.
- 2.5 Ende
Programmende. Um einen unbeabsichtigten Datenverlust zu verhindern, werden vor dem endgültigen Programmende zwei Sicherheitsfragen gestellt.

3. Parameter

Die Eingabe der verschiedenen Parameter erfolgt zum großen Teil mit Hilfe von Dialogboxen. Die Anwahl der Eingabefelder innerhalb der Dialogboxen kann durch Mausclick oder mit den Cursortasten erfolgen. Falsche Eingaben können durch die Backspace-Taste gelöscht werden. In jedem Feld muß mindestens eine Ziffer stehen. Sinnlose Werte werden in der Regel korrigiert. Die Dialogboxen werden durch Anklicken des "OK-Feldes" oder durch Betätigung einer der beiden Return-Tasten verlassen.

- 3.1 Typ des GW-Leiters
Eingabe der grundsätzlichen Eigenschaften eines Grundwasserleiters. Verlangt wird die Eingabe, ob der Grundwasserleiter gespannt (0) oder ungespannt (1) (default = 0) ist, sowie ob Isotropie (0) oder Anisotropie (1) (default = 0) vorliegt. Ist der Grundwasserleiter anisotrop, so ist die Eingabe des Anisotropiefaktors notwendig (default = 1). Die Werte dieser Dialogbox nehmen bei der vorliegenden Implementation nur teilweise einen Einfluß auf die Berechnung (nur der Anisotropiefaktor wird benutzt).
- 3.2 Gitterparameter
Eingabe der Gitterparameter wie Anzahl (default = 7) und Abstände (default = 100) der Stützstellen. Die Anzahl ist aus Speicherplatzgründen zur Zeit auf je 25 in x- und y-Richtung begrenzt. Dieser Menüpunkt kann zur Sicherheit erst nach vollständiger und sinnvoller Eingabe aller Gitterparameter wieder verlassen werden. Außerdem wird die Blockierung der Untermenüs im Menü "Arbeit" aufgehoben.
- 3.3 Zeitparameter
Eingabe der Anzahl der Versuche (default = 1) der Zeitschritte pro Versuch (default = 10) sowie eines Zeitschrittmultiplikators (default = 1). Dieser ermöglicht eine nichtlineare Aufteilung des Betrachtungszeitraumes. Bei der Wahl dieses Parameters muß vorsichtig vorgegangen werden, da sonst die ersten Zeitschritte zu klein werden. Werte im Intervall [1,2] haben sich als sinnvoll erwiesen. Nach dem Verlassen der Dialogbox wird in einem größeren Dialogfeld nach der Simulationsdauer in Tagen pro Versuch gefragt (Default: 1 Tag = 86400 sec.).

3.4 Iterationsparameter

Für die beiden in diesem Programm verwendeten iterativen Verfahren können hier die maximale Anzahl der Iterationen, die Abbruchschranke und für das SOR-Verfahren der Relaxationsparameter eingegeben werden.

3.5 Brunnenanzahl

Eingabe der Anzahl der Brunnen bzw. der Zuflüsse.

3.6 Brunnenparameter

Für jeden Brunnen sind die Koordinaten einzugeben. Außerdem wird für jeden Pumpversuch die Eingabe einer Pumprate (negatives Vorzeichen) bzw. einer Zuflußrate (positives Vorzeichen) verlangt. Pumpraten um -1 cbm/s entsprechen dabei einem sehr großen Förderbrunnen für Trinkwasser (1 cbm/s \Rightarrow 86400 cbm/d = Wasserverbrauch einer Stadt mit ca. 620.000 Einwohnern).

4. Felder

Parameter, die über dem betrachteten Gebiet nicht homogen sind, werden als Matrizen eingegeben. Die Eingabe erfolgt mit einer sehr aufwendigen und komfortablen Prozedur. Bei der Implementierung wurde versucht, die Eingabe des Tabellenkalkulationsprogrammes Lotus 1-2-3 nachzuempfinden. Die Bedienung dieser Prozedur ist zur Zeit nur mit Hilfe der Cursortasten möglich, auf den Einsatz der Maus und von GEM-Fenstern habe ich verzichtet.

Die Befehle im einzelnen:

1) Bewegung innerhalb der Matrix

Mit Hilfe der Cursortasten und den Tasten "/", "*", "+" im Zehner-Tastenblock kann der Cursor bewegt werden. Das jeweils aktuelle Feld ist invers dargestellt. Die Koordinaten dieses Feldes und sein Inhalt sind links unter der Matrix angezeigt.

2) Eingabe von Werten

Ein Werte kann durch direktes Eintippen der Zahl in allen Formaten eingegeben werden. Leider klappt das beim ersten Aufruf dieser Prozedur nicht immer. Die erste eingegebene Ziffer ist dann noch einmal einzugeben. Später tritt dieser Fehler nicht mehr auf.

3) "w" oder ")" im Zehner-Tastenblock

Das entsprechende Feld wird mit dem zuletzt eingegebenen Wert gefüllt.

4) "g" oder "(" im Zehner-Tastenblock

Die Matrix wird nach Eingabe einer Zahl mit dieser komplett besetzt. Mit dieser Option ist also die Belegung der Matrix mit einem globalen Wert sehr schnell möglich.

5) "s"

Die Matrix wird im ASCII-Format in einer mit der Fileselectbox zu bestimmenden Datei gespeichert. Die Dateierweiterung muß dabei ".TXT" lauten. Auf diese Weise kann die Ergebnismatrix in speziellen Graphik- oder Textsystemen weiter bearbeitet werden, ohne daß in diesen Programmen die Werte neu eingetippt werden müssen.

6) "p"

Ausgabe der Matrix auf dem angeschlossenen Drucker.

7) "u"

Möglichkeit der Übernahme eines durch einen A/D-Wandler bereitgestellten Wertes. Mit einem geeigneten A/D-Wandler könnte z.B. die Meßwertaufnahme in einem analogen Modell komfortabel durchgeführt werden. Der von mir gebaute Wandler erfüllte leider nicht alle an ihn gestellten Anforderungen. Im Prinzip funktioniert das Verfahren jedoch.

8) "l"

Eine vorher mit "s" gespeicherte Matrix kann vom Massenspeicher geladen werden.

9) "a"

Beendigung der Eingabe.

4.1 Standrohrspiegel [m]

Eingabe der Standrohrspiegel in [m] (d.h. bildlich: die Wasserstände in den Probebohrungen).

4.2 Transmissivitäten [m^2/s]

4.3 Speicherfähigkeit

Speicherfähigkeitskoeffizienten für einen gespannten Grundwasserleiter.

4.4 Diffuse Zu-/Abflüsse [m^3/s]

Mit dieser Matrix läßt sich die Grundwasserneubildung durch Niederschläge simulieren. Achtung! Ein Niederschlag von mehr als $1E-7$ cbm/s kann verheerende Auswirkungen auf die Bevölkerung haben.

4.5 Leakage Faktor (zur Zeit nicht implementiert)

Bestimmt die Durchlässigkeit einer über dem Grundwasserleiter liegenden halbdurchlässigen Schicht.

4.6 absolute Höhe eines Flusses (zur Zeit nicht implementiert)

4.7 absolute Höhe der Flußsohle (zur Zeit nicht implementiert)

4.8 absolute Höhe der Grundwasserleitersohle (zur Zeit nicht implementiert)

5. Arbeit

Ist ein Datensatz erstellt bzw. geladen, so kann die Berechnung der Standrohrspiegel durchgeführt werden. Das dabei zu lösende lineare Gleichungssystem kann mit verschiedenen Gleichungslösern bearbeitet werden. Bevor mit der eigentlichen Berechnung begonnen wird, ruft jeder Untermenüpunkt zunächst verschiedene Dialogboxen auf. Diese sind entsprechend zu beantworten.

5.1 Explizites Verfahren

Das explizite Verfahren löst im eigentlichen Sinne kein LGS und ist nur in instationären Situationen einsetzbar. Der Algorithmus stammt aus dem Programm SAM1 aus [1] S. 31ff.

Das explizite Verfahren ist sehr instabil bei der Überschreitung bestimmter Parametergrößen. Daher sind nur Kurzzeitversuche möglich. Sollte das Verfahren durch schlechte Wahl der Zeitschrittlänge dt instabil werden, so wird die Berechnung abgebrochen (die graphische Ausgabe der Werte liefert schönen Bilder).

5.2 Implizites Verfahren (Gauß)

Die gelieferten linearen Gleichungssysteme werden mit dem Gauß-Jordan-Verfahren gelöst.

5.3 Implizites Verfahren (SOR-Verfahren)

Die gelieferten linearen Gleichungssysteme werden mit dem SOR-Verfahren gelöst. Die Wahl des Relaxationsparameters kann dabei selbständig durch verschiedene Methoden erfolgen (siehe Kapitel 3) oder per Hand vorgenommen werden (siehe Menüpunkt (3.4.)).

5.4 ADI-Verfahren

Entwickelt von Peaceman und Rachford. Reagiert auf zu lange Zeitschritte am Anfang der Simulation mit falschen Lösungen.

5.5 IADI-Verfahren

Ein iteratives Verfahren als Weiterentwicklung des ADI-Verfahrens aus [1], S. 59 ff.

Bei allen Verfahren wird der Stand der Berechnung angezeigt (Zeitschritt, Zeitschrittlänge, maximale Abweichung). Außerdem wird eine Rechenzeitbestimmung mit einer Auflösung von 1/100 sec. vorgenommen. Die hierzu erforderliche Funktion habe ich in Zusammenarbeit mit Herrn York Schmitke (Projekt Verkehrssysteme) entwickelt.

Bei über der Zeit unveränderlichen Randbedingungen gehen die Simulationen in einen stationären Zustand über. Das Programm erkennt dies und bricht die Berechnung mit einer entsprechenden Meldung ab.

5.6 Graphik

Die 2D-Graphik (Isolinien) der Kinzelbach-Implementation ([1], S. 73 ff) wurde beibehalten. Hinzugekommen ist eine 3D-Graphik und eine Schnittgraphik. Die 3D-Graphik ist der Zeitschrift "ST Computer Extra" Nr.2, 1987 entnommen. Die Schnittgraphik wurde durch das Programm Lotus 1-2-3 angeregt und selbst programmiert.

6. Sonstiges

6.1 Vergleich

Zwei Matrizen können auf einfache Weise miteinander verglichen werden. Das Einlesen der ersten Matrix erfolgt wahlweise direkt aus dem Programm (berechnete Standrohrspiegel) oder vom Massenspeicher. Die zweite Matrix wird immer vom Massenspeicher gelesen. Nach dem Einlesen der Matrizen werden diese voneinander subtrahiert und das Ergebnis ausgegeben.

6.2 Uhrzeit

Spielerei. Abgelesen werden können das Datum, die Uhrzeit (beides muß am Anfang der Sitzung mit dem Kontrollfeld gesetzt werden) und die verstrichene Arbeitszeit.

Literaturangabe zum Anhang 4

- 1) Wolfgang Kinzelbach
"Groundwater Modelling. An Introduction with Sample Programs in BASIC"
1. Auflage
Elsevier, Amsterdam, 1986

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit an Eides Statt, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Die Arbeit wurde bisher keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt und auch noch nicht veröffentlicht.

A handwritten signature in cursive script, appearing to read 'Klaus Liegert'.

Bremen, den 24.11.1989

