



Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V.

## **Schlussbericht**

Eingehende Darstellung der erzielten Ergebnisse

Projektverbund

Untersuchungen zur Gewässerbeschaffenheitsentwicklung der Spree

### **TP 5.3: Aufbau eines gekoppelten Oberflächenwasser-Grundwassermodells und seine Reduktion zu einem konzeptionellen Blockmodellsystem am Beispiel Bärwalde**

Berichtsautoren: Dipl.-Ing. M. Müller, M.Sc.  
Dr. rer. nat F. Werner

Unter Mitwirkung von: Dr. rer. nat. F. Börner  
Dipl.-Ing. K. Eulitz  
Dipl.-Geol. F. Bilek  
Dipl.-Geol. A.-C. Isner  
Dipl.-Geol. S. Mannigel  
Dipl.-Geol. I. Rohrmoser

Dresden, den 24.02.2003

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen 02WB9971/4 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Aufgabenstellung</b>	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>Modellbildung und Algorithmen</b>	<b>13</b>
2.1	Überblick über systembestimmende Prozesse . . . . .	13
2.2	Strömungs- und Transportprozesse . . . . .	14
2.2.1	Widerspiegelung der Strömungs- und Transportprozesse im Modell . . . . .	15
2.3	Stoffwandlungsprozesse im Grundwasser . . . . .	16
2.3.1	Doppelporositätsmodell . . . . .	17
2.4	Stoffwandlungsprozesse im See . . . . .	20
2.4.1	Eisenoxidation . . . . .	21
2.4.2	Gasaustausch zwischen See und Atmosphäre . . . . .	22
2.4.3	Redoxreaktionen . . . . .	25
2.4.4	Photosynthese . . . . .	26
2.4.5	Bindung von Phosphat . . . . .	28
2.5	Verbindung von biologischen und chemischen Prozessen . . . . .	28
2.6	Einfluss von Erosionserscheinungen . . . . .	28
2.6.1	Massenabtrag durch Windwellenerosion . . . . .	29
2.6.2	Elution . . . . .	32
<b>3</b>	<b>Methoden</b>	<b>37</b>
3.1	Modellkopplung . . . . .	37
3.2	Analogie der objektorientierten Programmierung . . . . .	37
3.3	Nutzung der Programmiersprache Python . . . . .	38
3.4	Anwendung von objektorientierten Entwurfsmustern . . . . .	39
3.5	Process Oriented Modelling through Objects (POMO) . . . . .	39
3.6	Objekte des Modellsystems MODGLUE . . . . .	40
3.6.1	Objekt <i>cequalw2</i> . . . . .	40
3.6.2	Objekt <i>phreeqc</i> . . . . .	41
3.6.3	Objekt <i>pcgeofim</i> . . . . .	42
3.6.4	Objekt <i>lake</i> . . . . .	42
3.6.5	Objekt <i>groundwater</i> . . . . .	42
3.6.6	Objekt <i>erosion</i> . . . . .	43
3.7	Parallelisierung . . . . .	43
3.8	Wiederverwendung von Komponenten . . . . .	43
3.9	Schlussfolgerungen . . . . .	44

<b>4</b>	<b>Verifikation und Testung</b>	<b>45</b>
4.1	Vorgehensweise . . . . .	45
4.2	Verifikation des Seemodells . . . . .	46
4.2.1	Testung der pH-Modellierung (Tests 1 - 4) . . . . .	46
4.2.2	Testung des Gasaustausches (Tests 5 und 6) . . . . .	52
4.2.3	Testung des Versauerungsprozesses (Tests 7-10) . . . . .	54
4.2.4	Testung der kinetischen Redoxreaktionen (Tests 11-14) . . . . .	56
4.2.5	Testung der Photosynthese (Tests 15 bis 17) . . . . .	65
4.2.6	Kopräzipitation von Phosphat mit Eisenhydroxid (Test 18) . . . . .	68
4.3	Verifikation des Grundwassermodells . . . . .	70
4.3.1	See-/Grundwasseraustausch (Tests 19 und 20) . . . . .	70
4.3.2	Doppelporositätsmodell im Grundwassermodell . . . . .	71
4.4	Verifikation des Erosionsmodells . . . . .	74
4.4.1	Testung des Massenabtrages (Test 23) . . . . .	74
4.4.2	Testung der Elution (Test24) . . . . .	78
<b>5</b>	<b>Simulationsrechnung</b>	<b>85</b>
5.1	Beschreibung des Modellgebietes . . . . .	85
5.1.1	Gebietseinordnung . . . . .	85
5.1.2	Der Restsee Bärwalde . . . . .	86
5.1.3	Lagerungs- und Abbauverhältnisse . . . . .	86
5.1.4	Geologie im Niederlausitzer Braunkohlenrevier . . . . .	88
5.2	Parameterermittlung . . . . .	90
5.2.1	Geologisches Strukturmodell . . . . .	90
5.2.2	Abbildung der Kippen im Modell . . . . .	92
5.2.3	Chemische Untergrund- und Böschungsparameter . . . . .	94
5.2.4	Seeparameter . . . . .	95
5.3	Modellaufbau . . . . .	99
5.3.1	Aufbau des Grundwassermodells . . . . .	99
5.3.2	Randbedingungen 1. und 2. Art - Modellränder . . . . .	100
5.3.3	Randbedingung 2. Art - Grundwasserneubildung . . . . .	100
5.3.4	Randbedingung 3. Art - Fließgewässer . . . . .	102
5.3.5	Randbedingung 3. Art - Restsee . . . . .	102
5.3.6	Aufbau des Seemodells . . . . .	103
5.4	Modellkalibrierung . . . . .	107
5.4.1	Kalibrierung des Grundwassermodells . . . . .	107
5.4.2	Kalibrierung des Seemodells . . . . .	110
5.5	Prognoserechnungen . . . . .	114
5.6	Diskussion der Prognoseergebnisse . . . . .	120
<b>6</b>	<b>Modellreduktion</b>	<b>123</b>
6.1	Reduzierung des Seemodells . . . . .	123
6.2	Reduktion des Grundwassermodells . . . . .	124
6.3	Vergleich komplexes und reduziertes Modell . . . . .	124
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>131</b>

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	5
<b>A Ergebnisse See-Grundwasseraustausch</b>	<b>139</b>
<b>B Ergebnisse Elution</b>	<b>145</b>
<b>C BASIC-Subroutinen in PHREEQC</b>	<b>157</b>
<b>D Ergebnisse der Messungen</b>	<b>163</b>