

Institut für Hydrologie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i. Br.

Thorben Römer

Die hydrologische Dynamik als Parameter der Risikoabschätzung von Trinkwasserversorgungen

Diplomarbeit unter der Leitung von
Prof. Dr. Christian Leibundgut
Freiburg i. Br., Dezember 2007

Institut für Hydrologie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i. Br.

Thorben Römer

Die hydrologische Dynamik als Parameter der Risikoabschätzung von Trinkwasserversorgungen

Referent: Prof. Dr. Christian Leibundgut
Koreferent: Dr. Christoph Külls
Betreuer: Gunter Adolph

Diplomarbeit unter der Leitung von
Prof. Dr. Christian Leibundgut
Freiburg im Brsg., Dezember 2007

erstellt mit:



L^AT_EX

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	i
Abbildungsverzeichnis	v
Tabellenverzeichnis	ix
1 Zusammenfassung	1
2 Abstract	3
3 Einleitung	5
3.1 Projekt ERGO	5
3.2 Ziele der Arbeit	6
3.3 Gliederung der Arbeit	6
4 Grundgleichungen der Hydrogeologie	7
4.1 Gesetz von Darcy	7
4.2 Vektor des spezifischen Abflusses	8
4.3 Laplace-Gleichung	8
4.4 Dupuit-Forchheimer Annahme	9
4.5 Abflussvektor und Abflusspotential (Φ)	10
4.6 Poisson-Gleichung	11
4.7 Superpositionsprinzip	12
5 Grundwassermodellierung und Analytische Elemente Methode (AEM)	13
5.1 Numerische Methoden der Grundwassermodellierung	13
5.1.1 Finite Differenzen Methode (FDM)	13
5.1.2 Finite Elemente Methode (FEM)	13
5.1.3 Randelemente Methode (BEM)	14
5.2 Analytische Elemente Methode (AEM)	14
5.2.1 Aufbau und Funktionsweise eines AEM-Modells	15
5.2.2 AEM-Randbedingungen und Arten analytischer Elemente	16
5.2.2.1 Brunnen - <i>well</i>	17
5.2.2.2 Linienhafte Senke / Quelle - <i>line-sink</i>	17
5.2.2.3 Gebietssenke / -quelle - <i>area-sink</i>	18
5.2.2.4 Inhomogenität - <i>inhomogeneity</i>	18
5.3 Konzeptionelle AEM-Modellierung	19
5.3.1 AEM - Verbreitung und Stand der Forschung	19

5.3.2	Partikel Tracking	21
5.3.3	Flux inspection lines	22
5.4	Fazit	22
6	Hydrologische Dynamik	23
6.1	Wasseralter, Altersdatierung und Altersverteilung	23
6.2	Abbildung durch Tracer	25
6.3	Abbildung durch Grundwassermodelle und kombinierte Ansätze	28
6.4	Fazit	30
7	Risikoabschätzung von Trinkwasserversorgungen	33
7.1	Möglichkeiten und Methoden	33
7.1.1	Indexmethode	34
7.1.2	Statistische Methoden	34
7.1.3	Prozessbasierte Methoden	35
7.1.4	Hybridmethoden	35
7.1.5	Wahl und Beurteilung wissenschaftlich haltbarer Methoden	36
7.2	Schutzzonenkonzept	37
7.2.1	Rechtliche Grundlagen	37
7.2.2	Gliederung eines Trinkwasserschutzgebietes	38
7.2.3	Schutzzonenausweisung	38
7.2.4	Schutzzonenausweisung mittels Grundwassermodellen	40
7.3	Hydrologische Dynamik	41
7.4	Fazit	42
8	Methode, Vorgehensweise und Implementierung	43
8.1	Methode des Projektes ERGO	43
8.1.1	Doppelstrategie des ERGO-Ansatzes	43
8.1.2	Ermittlung der Altersstruktur im Projekt ERGO	44
8.2	Anzuwendende Methode	45
8.3	Wahl der AEM	46
8.4	Python und Tim ^{ML}	46
8.4.1	Erweiterung des bestehenden Quellcodes	47
8.4.1.1	Optimierung der Modelleingabe und -ausgabe	48
8.4.1.2	Automatisierte Ermittlung der Altersverteilung	49
8.4.1.3	Vorbereitung der Modellkopplung	49
8.4.1.4	<i>Exception handling</i>	49
8.5	Datenanforderung und -aufbereitung	50
8.5.1	Aquifergeometrie	50
8.5.2	Daten im <i>far-field</i> bzw. der gesamten Modellregion	50
8.5.3	Daten im <i>near-field</i>	51
8.6	Fazit	51

9	Anwendung	53
9.1	Einführung in das Untersuchungsgebiet der Langen Erlen	53
9.1.1	Geologie	54
9.1.2	Quartärgeologie	54
9.1.2.1	Pleistozän	54
9.1.2.2	Holozän	55
9.1.3	Hydrogeologie	56
9.1.4	Hydrologie	57
9.1.4.1	Oberflächengewässer	57
9.1.4.2	Grundwasserneubildung und künstliche Grundwasseranreicher- ung	59
9.1.4.3	Entnahmen	61
9.1.4.4	Konzeptmodell	61
9.2	AEM-Modellierung	61
9.2.1	Datenquellen	61
9.2.2	Modellgeometrie	61
9.2.3	<i>Farfield</i>	63
9.2.4	<i>Nearfield</i>	63
9.2.5	Validierung des Grundwassermodells	64
9.2.6	Szenarien	64
9.3	Modellergebnisse	64
9.3.1	Altersverteilungen	66
9.3.2	Fließpfade der ERGO-Verdachtsflächen	66
9.4	Fazit	67
10	Diskussion und Ausblick	69
10.1	Grenzen der AEM-Modellierung	69
10.2	Hinweise zu weiteren Arbeiten	70
10.2.1	Implementierung einer automatisierten Schutzzonenausweisung	70
10.2.2	Implementierung von <i>flux inspection lines</i>	71
10.3	Abschließende Bemerkungen	71
	Literaturverzeichnis	73
A	Modellergebnisse	79
B	Modellierungsparameter	83
C	Quellcode	89
C.1	TShape.py	91
C.2	trace_tim.py	103
D	Geologische Karte	109

Abbildungsverzeichnis

3.1	ERGO Projektschema; orange markierte Bereiche kennzeichnen Abschnitte des Gesamtprojektes, in die diese Diplomarbeit einzuordnen ist (verändert nach: IHF, unveröffentlicht).	5
4.1	Darcy Experiment (nach: STRACK, 1989, S. 9).	7
4.2	Kontinuität des Flusses (nach: STRACK, 1989, S. 15).	9
4.3	Überhöhte Darstellung (a) und nicht überhöhte Darstellung (b) eines geologischen Profils - die blau eingefärbten Schichten repräsentieren den Lockergesteins-Grundwasserleiter, die orange eingefärbte Schicht repräsentiert den tertiären Grundwasserstauer; Fließbahnen im Aquifer sind mit schwarzen Pfeilen angedeutet.	10
5.1	„Stammbau„ der AEM (nach: KRAEMER, 2007).	15
5.2	Beispiele analytischer Elemente, die in AEM-Modellen zur Verfügung stehen; Elemente - rot angedeutet bzw. rot begrenzt, Isopotentiallinien - schwarz, Geschwindigkeitsvektoren - schwarz (verändert nach: CRAIG, 2007).	17
5.3	A: zwei rechtwinklige Inhomogenitäten (orange Signatur) mit gemeinsamer Grenze, Vergleich der analytische Elemente Methode (blaue Grundwassergleichen) und MODFLOW2000 (grüne Grundwassergleichen); B: Stromlinien in einem Mehrschichtmodell, die eine kreisförmige Inhomogenität (orange Signatur) passieren, in der Draufsicht, Vergleich der AEM (blaue Stromlinien) und der exakten Lösung (rote Stromlinien); C: seitlicher Schnitt der in B beschriebenen Situation, Leaky Layers(grüne Signatur) (verändert nach: BAKKER, 2006a).	20
5.4	Verteilung der AEM-Anwendungen der Basis von 114 berücksichtigter Studien (verändert nach: HUNT, 2006).	20
5.5	(a) Trend-Histogramm von AEM Veröffentlichungen (Balken zeigen absolute Publikationsanzahl, Linie zeigt die Anzahl der Publikationen in Fachzeitschriften); (b) Veröffentlichungen zur Grundwassermodellierung (Stand: Oktober 2006), nach Methode klassifiziert: FEM - Finite Elemente Methode, FDM - Finite Differenzen Methode, BEM - Boundary Elemente Methode, AEM - analytische Elemente Methode; (jeweils verändert nach: KRAEMER, 2007).	21
6.1	Überblick über unterschiedliche Alterskomponenten in einem fiktiven Aquifersystem (verändert nach: HEATH,1983 und WINTER ET AL.1998; In: FOCAZIO ET AL., 2002, S. 4).	24
6.2	Änderung des Tritiumgehalts mit zunehmender Probenahmetiefe; tritiumfreie Bereiche stellen den Übergang vom aktiven zum passiven Neubildungsbereich dar (verändert nach: SEILER, 2001, S. 62).	26

6.3	Übersicht der natürlichen Tracer, die zur Datierung von Grundwässern mit einem Alter von null bis zu mehr als einer Million Jahre zur Verfügung stehen (verändert nach: R. Purtschert, verändert; In: HINSBY, 2001).	27
6.4	Inputfunktionen verschiedener natürlicher Tracer, die zur Datierung jungen Grundwassers herangezogen werden können (verändert nach: HINSBY, 2001).	27
6.5	Verbindung zwischen Amplitude und saisonaler Veränderung von $\delta^{18}\text{O}$ für Niederschlag und Grundwasser mit unterschiedlicher mittlerer Verweilzeit (T_m) entsprechend dem Exponentialmodell (EM); die Phasen-Verschiebung reicht bis zu 3 Monaten mit steigender T_m (verändert nach: GEYH, 2001, S. 69)	27
6.6	Verschiedene mögliche Box-Model-Typen, die zur Modellierung von Verweilzeiten in Aquiferen herangezogen werden können; q: Aufteilungsfaktor, m: mixing / Exponentialmodell, p: Piston Flow, d: Totvolumen (nach: OZYURT und BAYARI, 2003).	29
7.1	Beurteilung des objektiven, wissenschaftlichen Ansatzes zur Abschätzung der Schadenanfälligkeit der Grundwasserressource (verändert nach: FOCAZIO ET AL., 2002).	36
7.2	Zustrombereich eines Brunnens (verändert nach: DVGW, 2006).	40
7.3	Isolinien des Anteils der Flusswasserkomponente am Grundwasser (verändert nach: PLUMMER ET AL., 1998 und FOCAZIO ET AL., 2002).	41
8.1	Altersverteilung (verändert nach: IHF, unveröffentlicht).	44
8.2	Die erstellte Arc-Toolbox ermöglicht u.a. die automatische Konfigurierung der Tim^{ML} -Input-Shapefiles.	48
9.1	Übersicht der Region Basel und des WSG Lange Erlen.	53
9.2	Quartärgeologische Übersicht der Region (verändert nach: SCHWEIZERISCHE GEOLOGISCHE KOMMISSION, 1971).	55
9.3	Pardé-Regime des (a) Rheins am Pegel Rheinhalle (LH 2899) und der (b) Wiese am Pegel Basel (LH2199) (Datengrundlage: BAFU, 2007).	58
9.4	Lange Erlen: Brunnen, Pegel, Wässermatten - Übersicht	59
9.5	Verschiedene Parameterkombinationen des Modelllaufes 10 führten zu unterschiedlichen Abweichungen vom mittleren Pegel der Referenzpegel (eingezeichnete Balkendiagramme); Stauergeometrie des Modelllaufes 10; die Inhomogenitäten sind durch schwarze Polygone verzeichnet.	62
9.6	Szenarien am Brunnen 10a und 10f überlagernd dargestellt für Partikellaufzeiten von 10, 50 und > 50 Tagen.	67
9.7	Brunnengruppe 10, Modelllauf 10 (Anreicherung aktiv).	68
10.1	(a) Konturlinien der Standrohrspiegelhöhen (gepunktet), Stromlinien (durchgezogen) und Stagnationspunkte (S). Einzugsgebiet des Brunnens (gepunktet) zur Zeit (t), ermittelt mit (b) 12 Stromlinien (durchgezogen) und (c) 48 Stromlinien (nach: BAKKER und STRACK, 1996).	71

A.1	Übersicht der In- und Exfiltrationen der Wiese für Modellauf 07; negative Strength Parameter entsprechen infiltrierenden Verhältnissen in den Aquifer.	80
A.2	Modellauf 07 (ohne Grundwasseranreicherung) Brunnen 3 und 3a.	81
A.3	Übersicht der Ergo Verdachtsflächen in den Schutzzonen von Lange Erlen.	82
B.1	Modellgeometrie Run07.	83
D.1	Ausschnitt der Geologischen Karte - Blatt 1047 Basel (verändert nach: SCHWEI- ZERISCHE GEOLOGISCHE KOMMISSION, 1971).	110

Tabellenverzeichnis

5.1	Klassifizierung von Techniken der Grundwassermodellierung (verändert nach: KRAEMER, 2007).	16
7.1	DRASTIC Faktoren (nach: ALLER ET AL., 1987).	34
7.2	Schutzzonen: Gliederung und Dimensionierung in der Schweiz (CH) und Deutschland (D) zusammengestellt nach BUWAL (2004) und DVGW (2006).	39
7.3	Grundwasser-Schadenanfälligkeitsklassen, definiert durch den Gehalt an natürlichen Tracern in Beobachtungsbrunnen. Annahme von kurzen Filterstrecken und / oder keiner signifikanten Mischung von Wassertypen (verändert nach: HINSBY, 2006).	42
9.1	Hydrologische Kennwerte der Wiese am Pegel Basel (LH 2199) und des Rheins bei Rheinhalle (LH 2899) (Datengrundlage: BAFU, 2007).	58
9.2	Übersicht der Wässerungen im Kalenderjahr 2006 nach Wassermatten (Datengrundlage: IWB).	60
9.3	Aufstellung der Gesamtinfiltration bzw. Exfiltration der <i>line-sinks</i> im nearfield.	65
9.4	Spezifische Infiltrationen verschiedener alpiner und voralpiner Flüsse (nach: HUGENBERGER und GULDENFELS, 2003b, S. 17).	65
9.5	Altersverteilung ermittelt für den Modelllauf 07.	66
B.1	Übersicht der Tim ^{ML} -Modellläufe.	84
B.2	Brunnenparameter.	85
B.3	Übersicht der Inhomogenitäten (aquifer100101).	86
B.4	Übersicht Grundwasserneubildung.	87
B.5	Übersicht Wässerungen.	88
C.1	Übersicht der in für Tim ^{ML} neu entwickelten Module und Programmteile.	90

1 Zusammenfassung

Ein hydrologisches System unterliegt einer gewissen Dynamik. Nicht nur die Wasserhaushaltskomponenten unterliegen dieser zeitlich-räumlichen Variabilität, sondern auch die Zusammensetzung eines Wassers und somit seine Altersstruktur. Es bildet sich zu jedem Zeitpunkt an einem Ort im Aquifer eine charakteristische Altersverteilung aus, die als direktes Produkt der hydrologischen Dynamik des betrachteten Systems angesehen werden kann. Das Projekt ERGO, in welches diese Diplomarbeit eingegliedert ist, nutzt die hydrologische Dynamik als prozessbasierte Methode und Parameter zur effektiven Risikoabschätzung einer Trinkwasserversorgung.

Im Allgemeinen steigt das Risiko eines Schadens mit Zunahme der jungen Komponenten eines Wassers. In dieser Arbeit werden zunächst Möglichkeiten und Methoden beschrieben und diskutiert, die die Abbildung der hydrologischen Dynamik oder Teilaspekte dieser zum Ziel haben und Aussagen zur Quantifizierung eines Kontaminationsrisikos für Trinkwasserauffassungen geben können. Es wird die Methode des Partikel Tracking herausgestellt um die Altersverteilung eines Aquifers zu simulieren. Die Grundwassermodellierung dieser Diplomarbeit wird mit Hilfe der Analytischen Elemente Methode (AEM) durchgeführt, die eine Sonderstellung unter den Methoden der Grundwassermodellierung einnimmt. In Hinblick auf die Ziele des Projektes ERGO wurde das frei verfügbare, stationäre AEM-Modell Tim^{ML} angepasst und erweitert. Herausforderungen, die sich hierbei ergaben, werden dargelegt und die Ergebnisse diskutiert. Nach Abschluss der Modellanpassungen fand die Anwendung der Methode auf ein ERGO-Pilotgebiet statt. Das Wasserschutzgebiet der Langen Erlen (Basel-Stadt, Schweiz) wird durch die Industriellen Werke Basel (IWB) genutzt und liefert über die effektive Anwendung der künstlichen Grundwasseranreicherung einen großen Anteil des Basler Trinkwassers. Die Langen Erlen stellen mit ihren Besonderheiten gehobene Anforderungen an die eingesetzte Methode und die Grenzen der AEM können aufgezeigt werden. Die kritisch betrachteten Ergebnisse zeigen, dass sich die Methode der hydrologischen Dynamik als Parameter der Risikoabschätzung von Trinkwasserversorgungen als praktikabel erweist. Hinweise zu weiteren Entwicklungsschritten innerhalb des Projektes ERGO können ausgewiesen werden.

Stichworte: *Risikoabschätzung Grundwasser, Analytische Elemente Methode (AEM), Altersverteilung*

2 Abstract

To a certain extend a hydrological system is influenced by dynamical processes. Not only components of the water balance but also the composition and thus the age-structure of the water are subject to this spatiotemporal variability. For any point in space and time a characteristic age-distribution is found. This may be considered as a direct result from hydrological dynamics. This thesis is part of the research project ERGO and utilizes the hydrological dynamics as a process-based method or parameter for deriving an effective risk-assessment of a water supply. The risk-potential in general terms rises in background of young water fractions. At first the possibilities and methods for displaying the hydrological dynamics in total or in part and quantifying the risk of well-contamination are treated within this thesis. Particle tracking is described as a tool to derive the age-distribution of a ground water system. Groundwater modelling within this work is executed by the use of the Analytical Element Method (AEM). Accounting for goals of the ERGO project the royalty-free AEM-model Tim^{ML} was adapted and extended. Challenges arising within this process and the final results are subject to discussion. The case-study application to an ERGO water supply follows upon the model-customization. The wellhead protection area Langen Erlen (Basel-Stadt, Switzerland) is managed by the Industrielle Werke Basel (IWB). A big part of the drinking water of City of Basel can be provided by the use of an effective system of artificial groundwater recharge. Extended requirements in the use of AEM arise due to the uniqueness of Langen Erlen. The discussed results show that the applied method of treating the hydrological dynamics as a parameter in risk-assessment of water supplies can be considered as applicable. Finally, it is also possible to provide details for potential developments within the ERGO project.

key-words: *groundwater risk-assessment, Analytical Element Method (AEM), age-distribution*

3 Einleitung

3.1 Projekt ERGO

Diese Diplomarbeit ist in das Projekt ERGO eingebettet. ERGO umfasst die „Entwicklung eines Bewertungskonzeptes und orientierende Risikoabschätzung zur Gefährdung des Trinkwassers durch Altlasten im Oberrheingraben“. Das Projekt wird im Auftrag der Arbeitsgemeinschaft Wasserwerke Bodensee-Rhein (AWBR) durchgeführt. Die Leitung liegt beim Institut für Hydrologie (IHF) der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, weiterhin ist das Technonogiezentrum Wasser (TZW) in das Projekt eingebunden.

Im Rahmen des Projektes wurde eine Methode entwickelt, mit der für den gesamten Oberrheingraben abgeschätzt werden kann, ob und inwieweit Trinkwasserversorgungen durch vorhandene Altlasten und katalogisierte Verdachtsflächen gefährdet werden (IHF, unveröffentlicht). Abb. 3.1 stellt die einzelnen Bearbeitungsschritte und Zwischenziele des ERGO-Projektes dar. Diese Diplomarbeit ist in der Phase II-B einzuordnen, in der eine Gefährdungsabschätzung über die Stoff- und Systemdynamik vorgenommen wird. Primäres Interesse liegt hierbei auf der Altersstruktur.

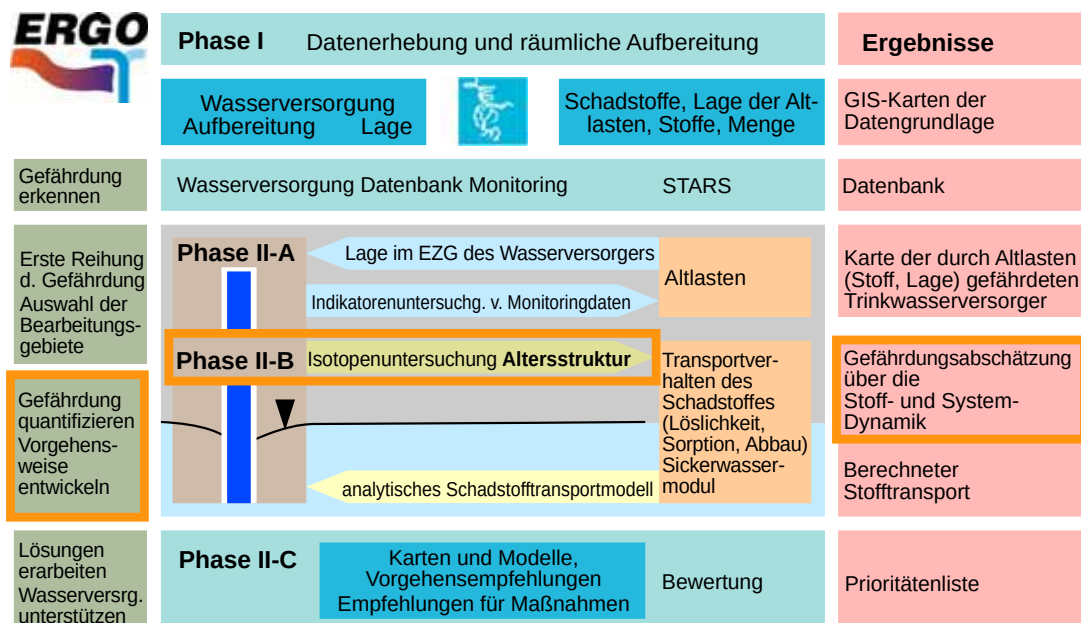


Abbildung 3.1: ERGO Projektschema; orange markierte Bereiche kennzeichnen Abschnitte des Gesamtprojektes, in die diese Diplomarbeit einzuordnen ist (verändert nach: IHF, unveröffentlicht).

3.2 Ziele der Arbeit

Ziel der Arbeit ist es, die hydrologische Dynamik als Parameter der Risikoabschätzung von Trinkwasserversorgungen darzustellen, diese im Projekt ERGO als Methode effektiv anwendbar zu machen und abschließend, im Kontext der Anwendung auf ein Pilotgebiet, zu bewerten. Praktisch ist die Altersstruktur des Wassers an Trinkwasserbrunnen mit Hilfe eines geeigneten Modells der Analytischen Elemente Methode (AEM) abzubilden. Die hierfür bereits eingesetzte Methode des *Partikel Trackings* (Kap. 5.3.2) soll erweitert und an die Anforderungen des Projektes ERGO angepasst werden. Die Anwendung wird auf das schweizer ERGO-Pilotgebiet der Langen Erlen im Kanton Basel-Stadt erfolgen.

3.3 Gliederung der Arbeit

Die Arbeit untergliedert sich in sieben weitere Kapitel. Zunächst werden im Kap. 4 die hydrogeologischen Grundgleichungen und Grundlagen dargestellt, die in der Arbeit zur Anwendung kommen. In Kap. 5 wird die analytische Elemente Methode (AEM) als gewählte Methode der Grundwassermodellierung eingeordnet und näher ausgeführt. Die in der Praxis bisher schwach vertretene AEM kann hinsichtlich des Standes der Forschung und ihrer Verbreitung ausgeführt werden. Neben dem Verfahren der AEM, welches im Rückgriff auf die besprochenen Grundgleichungen (Kap. 4) in seinen wichtigsten Punkten dargelegt werden kann, wird das in der Arbeit verwendete Verfahren des *Partikel Trackings* eingeführt.

Mit der hydrologischen Dynamik wird in Kap. 6 der erste Themenkomplex des Diplomthemas aufgegriffen. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf der Untersuchung der sich durch die hydrologische Dynamik ausbildenden Altersstruktur in einem Aquifer. Verschiedene, in der Literatur beschriebene, Verfahren zur Abbildung der Dynamik werden diskutiert. Im Kap. 7, „Risikoabschätzung für Trinkwasserversorgungen“, wird der zweite Themenkomplex des Diplomthemas abgehandelt. Das Risiko einer Trinkwasserversorgung wird definiert. Dazu werden verschiedene Konzepte vorgestellt, eingeordnet und diskutiert. Zum Abschluss des Kapitels (siehe Kap. 7.3) kann die hydrologische Dynamik als Parameter der Risikoabschätzung wieder aufgegriffen werden. Es erfolgt eine Zusammenführung der beiden Themenkomplexe des Diplomthemas.

Vor dem Hintergrund der Kapitel 4 bis 7 kann nun in Kap. 8 eine präzise Methodenvorstellung erfolgen. Neben der generellen Methode werden die einzelnen praktischen Aspekte der Arbeit beleuchtet. Die verwendete Software und die Erweiterungen, die im Rahmen der Methodenimplementierung vorgenommen wurden, werden vorgestellt und beschreiben.

Die Anwendung (Kap. 9) erfolgt schließlich auf das schweizer Pilotgebiet Lange Erlen. Das Gebiet stellt mit seinen Besonderheiten eine gehobene Anforderung an die im ERGO-Projekt ausgearbeitete Methode. Innerhalb der Anwendung werden daher die einzelnen Schritte der Modellierung dargestellt und neben Endresultaten auch Zwischenergebnisse präsentiert. Die abschließende Diskussion (Kap. 10) wertet Ergebnisse in Hinblick auf die Problemstellung aus und nimmt eine Einordnung und einen Ausblick in Bezug auf das ERGO-Projektvorhaben vor.

4 Grundgleichungen der Hydrogeologie

Die hydrogeologischen Grundgleichungen, auf die im weiteren Verlauf der Arbeit zurückgegriffen wird, werden in diesem Kapitel abgehandelt. Die Grundlagen zur Hydrogeologie wurden bewusst kompakt gehalten und folgen weitestgehend den Ausführungen von STRACK (1989) und FETTER (2001). Für umfassendere Ausführungen wird an die üblichen Standardlehrbücher verwiesen, die zu diesem Thema publiziert sind (u.a. STRACK (1989), HAITJEMA (1995), KINZELBACH und RAUSCH (1995), FETTER (2001), HÖLTING und COLDEWEY (2005)).

4.1 Gesetz von Darcy

Abb. 4.1 lässt sich durch das Gesetz von Darcy (1865) nach Gl. 4.1 beschreiben. Nach Darcy kann der Fluss durch einen mit Substrat gefüllten Zylinder der Querschnittsfläche (A) proportional zur Differenz der an den beiden Enden (Abb. 4.1, 1 und 2) des Zylinders wirkenden Standrohrspiegelhöhen ϕ_1 und ϕ_2 beschrieben werden. Die *Standrohrspiegelhöhe* (ϕ) ist als Sum-

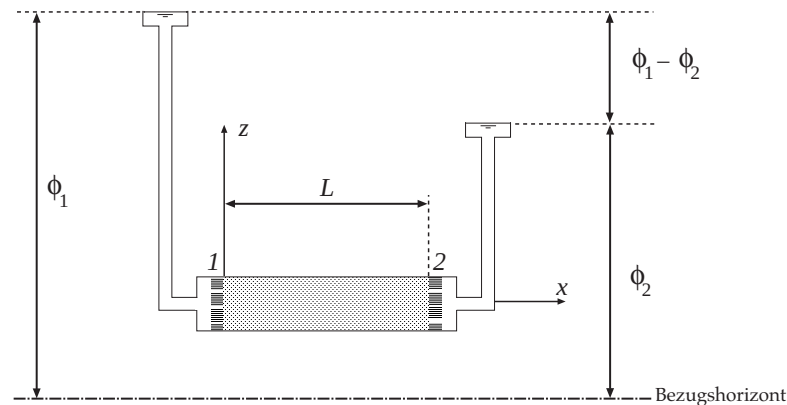


Abbildung 4.1: Darcy Experiment (nach: STRACK, 1989, S. 9).

me der geodätischen Höhe und der Druckhöhe definiert (DIN 4049, Teil 1). Sie wird in der Einheit [m] ausgedrückt. In der englischen Verwendung wird sie als *hydraulic head* oder kurz *head* bezeichnet (STRACK, 1989, S. 7).

$$Q = k_f A \frac{\phi_1 - \phi_2}{L} \quad (4.1)$$

Q entspricht dem Abfluss [m^3/s], A dem Querschnitt [m^2] und L der Länge [m] des durchflossenen Weges in Abb. 4.1. Die Proportionalitätskonstante k_f wird allgemein als *hydraulische Leitfähigkeit* bezeichnet; die Einheit - Gl. 4.1 folgend - entspricht einer Geschwindigkeit [m/s]. Gl. 4.1 lässt sich auch in Form des *spezifischen Abflusses* oder *Flusses* (q) (eng.: *specific discharge* /

flux) formulieren; mit $q = Q/A$.

$$q = k_f \frac{\phi_1 - \phi_2}{L} \quad (4.2)$$

Der Fluss q ist in der Einheit $[\text{m}^3/(\text{m}^2\text{s})]$ oder $[\text{m/s}]$ angegeben. Will man die Standrohrspiegelhöhe an jedem beliebigen Punkt im Zylinder entlang der in Abb. 4.1 eingezeichneten x -Achse beschreiben, so lässt sich dies über Gl. 4.3 tun.

$$\phi = \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{L} x \quad (4.3)$$

Aus Gl. 4.3 folgt

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{\phi_1 - \phi_2}{L} \quad (4.4)$$

zudem kann Gl. 4.2 nun als

$$q_x = -k_f \frac{d\phi}{dx} \quad (4.5)$$

geschrieben werden.

4.2 Vektor des spezifischen Abflusses

In der praktischen Anwendung kommt der bisher beschriebene Fall des Gesetzes von Darcy (Abb. 4.1, Gl. 4.5) nicht vor. Es ist daher notwendig, eine allgemeine Form des Gesetzes zu formulieren. Im kartesischen Koordinatensystem x, y, z können die spezifischen Abflüsse durch q_x, q_y und q_z repräsentiert werden. Es wird der so genannte *Vektor des spezifischen Abflusses* (eng.: *specific discharge vector*) definiert. Die allgemeine Form des Darcy Gesetzes für den dreidimensionalen Fluss durch ein isotropes, poröses Medium ist somit wie folgt zu formulieren:

$$\begin{aligned} q_x &= -k_f \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ q_y &= -k_f \frac{\partial \phi}{\partial y} \\ q_z &= -k_f \frac{\partial \phi}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.6)$$

In kompakter Schreibweise lässt sich auch Gl. 4.7 formulieren,

$$q_i = -k_f \partial_i \phi \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4.7)$$

wobei q_i die drei Komponenten des Vektors des spezifischen Abflusses repräsentiert.

4.3 Laplace-Gleichung

Neben der Formulierung des Gesetzes von Darcy für die drei Komponenten im kartesischen Koordinatensystem wird die Massenbilanz-Gleichung benötigt, um eine vollständige Beschreibung der Grundwasserströmung zu ermöglichen. Die Gleichung der Massenbilanz vereinfacht sich im stationären Fall zur Kontinuitätsgleichung und resultiert aus der Annahme, dass es keine Quell- oder Senkenterme gibt. Abb. 4.2 verdeutlicht dies noch einmal.

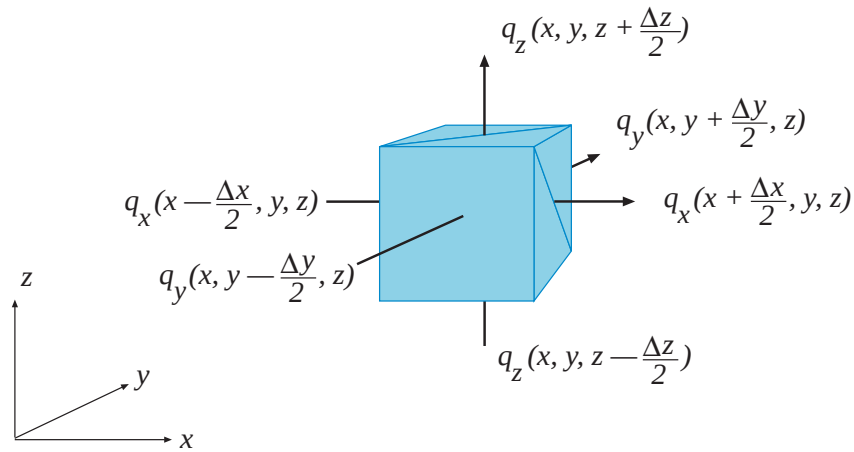


Abbildung 4.2: Kontinuität des Flusses (nach: STRACK, 1989, S. 15).

Im Grenzfall von $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$, $\Delta z \rightarrow 0$ lässt sich die Kontinuitätsgleichung in partieller Schreibweise (Gl. 4.8) formulieren.

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = 0 \quad (4.8)$$

Wird nun q_i der Kontinuitätsgleichung durch $-k_f \partial_i \phi$ der Darcy-Gleichung substituiert, führt dies zu Gl. 4.9.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[-k_f \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[-k_f \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[-k_f \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] = 0 \quad (4.9)$$

Falls die hydraulische Leitfähigkeit als konstant angesehen werden kann, darf Gl. 4.9 auch entsprechend Gl. 4.10 formuliert werden.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 \quad (4.10)$$

Gl. 4.10 wird auch als *Laplace-Gleichung* bezeichnet.

4.4 Dupuit-Forchheimer Annahme

DUPUIT (1863) sowie FORCHHEIMER (1886) haben unabhängig voneinander Lösungen zur mathematischen Beschreibung der regionalen Grundwasserströmung gefunden. Sie treffen die Annahme, dass Stromlinien hauptsächlich horizontal verlaufen und die Fließgeschwindigkeit über die Aquifermächtigkeit nicht variiert. Die Variation der Standrohrspiegelhöhe ϕ in vertikaler Richtung wird vernachlässigbar. Die so genannte *Dupuit-Forchheimer Annahme* setzt voraus, dass die horizontale Länge einer Fließbahn im Vergleich zur Aquifermächtigkeit groß ist. Bei Problemen, die sich im Kontext der Wasserversorgung aus Lockergesteinsaquiferen ergeben, ist diese Voraussetzung im Allgemeinen erfüllt (HAITJEMA, 1995, S. 23).

Klassische graphische Darstellungen von geologischen Schnitten sind mehrfach überhöht (Abb. 4.3 (a)). Betrachtet man einen geologischen Schnitt ohne eine vorgenommene Überhöhung (Abb. 4.3 (b)), so wird deutlich, dass die vertikale Komponente die horizontale Komponente überwiegt. Die horizontale Komponente der angedeuteten Fließbahnen dominiert.

In HAITJEMA (1995, Kap. 3) wird die Dupuit-Forchheimer Annahme weiter ausgeführt. Die Annahme des allein horizontalen Flusses wird allgemein wie folgt interpretiert:

$$q_z = 0 \quad (4.11)$$

Dadurch vereinfacht sich die z-Komponente nach Darcy (Gl. 4.2) zu:

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \quad (4.12)$$

Damit die Dupuit-Forchheimer Annahme gültig ist, ist lediglich Gl. 4.12 zu erfüllen. Gl. 4.11 kann auch durch die Annahme eines (hypothetischen) Aquifers mit infinitesimaler vertikaler hydraulischer Leitfähigkeit angesehen werden (Gl. 4.13).

$$\lim_{\substack{k_z \rightarrow \infty \\ \partial \phi / \partial z \rightarrow 0}} (-k_z \frac{\partial \phi}{\partial z}) \neq 0 \quad (4.13)$$

Die Laplace-Gleichung (Gl. 4.10) lässt sich unter Erfüllung der Dupuit-Forchheimer Annahme zu Gl. 4.14 vereinfachen.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (4.14)$$

4.5 Abflussvektor und Abflusspotential (Φ)

Bei realen Problemen, die sich mit Lockergesteinsaquiferen beschäftigen, besteht das primäre Interesse darin, den Abfluss, der über die gesamte Mächtigkeit des Aquifers (H) (gespannte Verhältnisse) oder über die gesamte gesättigte Mächtigkeit des Aquifers (h) (ungespannte Verhältnisse) stattfindet, zu quantifizieren. Dabei wird im ungespannten Fall der atmosphärische Druck, der an der Grundwasseroberfläche wirkt, vernachlässigt und angenommen, dass $h = \phi$ ist.

Der Vektor des spezifischen Abflusses (q_i) (Kap. 4.2) wird unbrauchbar und der *Abflussvektor* (Q_i) (eng.: *discharge vektor*) wird stattdessen eingeführt. Ist die Dupuit-Forchheimer Annahme erfüllt und liegen somit zwei Dimensionen vor, so besitzt der Abflussvektor die Komponenten Q_x und Q_y und definiert sich als Gl. 4.15 für den gespannten oder Gl. 4.16 für den ungespannten Fall.

$$Q_i = H q_i = H(q_x, q_y) \quad (4.15)$$

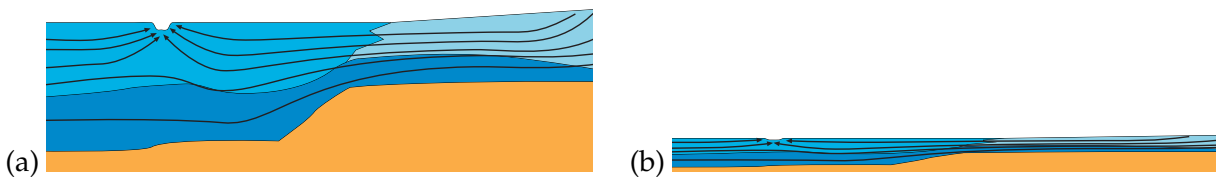


Abbildung 4.3: Überhöhte Darstellung (a) und nicht überhöhte Darstellung (b) eines geologischen Profils - die blau eingefärbten Schichten repräsentieren den Lockergesteins-Grundwasserleiter, die orange eingefärbte Schicht repräsentiert den tertiären Grundwasserstauer; Fließbahnen im Aquifer sind mit schwarzen Pfeilen angedeutet.

$$Q_i = h q_i = h(q_x, q_y) \quad (4.16)$$

Die Komponenten des Abflussvektors können auch als Differentiale der Standrohrspiegelhöhe (ϕ) durch Kombination von Gl. 4.15 bzw. Gl. 4.16 und Gl. 4.2 dargestellt werden. Es ergeben sich wiederum nach gespanntem und ungespanntem Fall getrennt Gl. 4.17 und Gl. 4.18; H und k_f werden hierbei als konstant angesehen.

$$Q_i = H q_i = -\frac{\partial [k_f H \phi]}{\partial i} \quad (i = x, y) \quad (4.17)$$

$$Q_i = h q_i = -\frac{\partial [\frac{1}{2} k_f \phi^2]}{\partial i} \quad (i = x, y) \quad (4.18)$$

STRACK (u.a. 1981a; 1981b; 1981; 1989) macht sich nun das Konzept des *Abflusspotentials* (Φ), 1946 eingeführt durch GIRINSKI, zu Nutze. Der Gebrauch eines Potentials in Verbindung mit laminarem Fluss ist ein Konzept der *Potentialtheorie* (HAITJEMA, 1995, S. 30). Das Konzept des Abflusspotentials ermöglicht u.a. die Beschreibung von Aquiferen, in denen die Durchlässigkeit in vertikaler Richtung variiert und in denen gespannter und ungespannter Fluss nebeneinander vorliegen (STRACK, 1984). STRACK ET AL. (2006) nimmt einen in seiner Basis nicht geneigten Aquifer an. Der Aquifer kann in Bereiche konstanter hydraulischer Leitfähigkeit unterteilt werden. Zwischen den Bereichen kann es dabei zu Sprüngen der hydraulischen Leitfähigkeit kommen. Hierbei lässt sich das Abflusspotential (Φ) sowohl für gespannten als auch für ungespannten Fluss definieren (Gl. 4.19 und Gl. 4.20).

$$\Phi = k_f H \phi + C_{gesp} \quad (4.19)$$

$$\Phi = \frac{1}{2} k_f \phi^2 + C_{ungesp} \quad (4.20)$$

C_{gesp} und C_{ungesp} sind dabei frei wählbare Konstanten für die gleichermaßen gilt, dass $\partial C / \partial x = \partial C / \partial y = 0$ ist. Gl. 4.17 und Gl. 4.18 können daher zu Gl. 4.21 vereinfacht werden.

$$Q_i = -\frac{\partial \Phi}{\partial i} \quad (i = x, y) \quad (4.21)$$

Die Bedingungen der Laplace-Gleichung sind erfüllt, und in der Abflusspotentialschreibweise lässt sich diese für den zweidimensionalen Fluss in der x, y Ebene nach Gl. 4.22 formulieren.

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \nabla^2 \Phi = 0 \quad (4.22)$$

4.6 Poisson-Gleichung

Die Laplace-Gleichung stößt z.B. im Fall der Grundwasserneubildung an ihre Grenzen, da keine Quellen und Senken existieren. Es muss daher die Poisson-Gleichung als zweite fundamentale Gleichung eingeführt werden (STRACK, 1989, S. 75ff). Infiltration (N) kann in der Einheit [m/s] beschrieben werden und entspricht einer Wassermenge, die pro Einheitsfläche in den

Aquifer in Einheitszeit infiltriert. Unter Berücksichtigung der Dupuit-Forchheimer Annahme wird der Widerstand gegenüber dem vertikalen Fluss vernachlässigbar. Betrachtet man die Kontinuität des Flusses (Abb. 4.2) und formuliert die Kontinuitätsgleichung (Gl. 4.8) in der Abflussnotation, so ergibt sich Gl. 4.23.

$$\frac{\partial Q_x}{\partial x} + \frac{\partial Q_y}{\partial y} = N \quad (4.23)$$

Die Differentialgleichung des Abflusspotentials, unter Berücksichtigung von Infiltration, ergibt schließlich Gl. 4.24, die als Poisson-Gleichung bezeichnet wird.

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \nabla^2 \Phi = -N \quad (4.24)$$

4.7 Superpositionsprinzip

Die Formulierung der Laplace-Gleichung und der erweiterten - die Infiltration beinhaltende - Poisson-Gleichung in der Abflusspotential-Notation hat einen entscheidenden Vorteil. Es handelt sich um homogene lineare partielle Differentialgleichungen. Das Superpositionsprinzip darf angewandt werden. Die Lösungen für den gespannten und ungespannten Fluss sind linear und identisch (Gl. 4.22, Gl. 4.24). Formuliert man die Laplace-Gleichung oder die Poisson-Gleichung in Form von Standrohrspiegelhöhen, so ist dies nicht der Fall, da ϕ^2 in die Gleichung einfließt (Gl. 4.25 bzw. vereinfacht Gl. 4.26) (HAITJEMA, 1995, S. 55).

$$\frac{\partial^2 \left[\frac{1}{2} k_f \phi^2 \right]}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \left[\frac{1}{2} k_f \phi^2 \right]}{\partial y^2} = -N \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial^2 \phi^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi^2}{\partial y^2} = -N \quad (4.26)$$

Auf Lösungen zur Beschreibung des Grundwasserflusses, die die Laplace- oder Poisson-Gleichung erfüllen, kann das Superpositionsprinzip angewandt werden. Das Ergebnis der Superposition stellt dann die Gesamtlösung dar.

5 Grundwassermodellierung und Analytische Elemente Methode (AEM)

Die Grundwassermodellierung ist - wie in Kap. 7.2.3 ausgeführt - als eine gängige Methode akzeptiert, die der Ausweisung von Schutzzonen behilflich sein kann. Routinemäßige Grundwassermodellierungen im Zuge einer Schutzzonenausweisung oder der Ausweisung eines allgemeinen Gefährdungspotentials für Grundwasserfassungen sind bisher nicht die Praxis. Die in dieser Arbeit dargestellte Methode zur Risikoabschätzung hat eine routinemäßige Modellierung von Grundwasserfassungen zum Ziel (siehe Kap. 8). Bevor die Methode vorgestellt werden kann, wird in den folgenden Abschnitten zunächst die gewählte Art der Grundwassermodellierung eingeordnet und näher ausgeführt.

5.1 Numerische Methoden der Grundwassermodellierung

Fast alle Grundwassermodellierungen werden heute mit numerischen Grundwassermodellen durchgeführt (HAITJEMA, 1995). Im Bereich der numerischen Grundwassermodellierung stehen sich vor allem die Finite Differenzen Methode (FDM) und die Finite Elemente Methode (FEM) gegenüber.

5.1.1 Finite Differenzen Methode (FDM)

Die FDM verlangt eine räumliche und zeitliche Diskretisierung und die Differentialquotienten der Strömungsgleichung werden durch Differenzenquotienten ersetzt. Der Aquifer wird in ein rechteckiges Netz unterteilt, wobei man zwischen blockzentriertem und gitternetzcentriertem Netz unterscheiden kann. Der Knoten, an dem die Standrohrspiegelhöhe berechnet wird, liegt somit entweder im Zentrum der Zelle oder auf den Schnittpunkten der einzelnen Gitterlinien (KINZELBACH und RAUSCH, 1995). Für jeden Knoten wird eine Gleichung erstellt, die die Zustände der Nachbarknoten durch die Differenzenquotienten mit berücksichtigt. Dieses Gleichungssystem wird iterativ gelöst und man erhält eine Näherungslösung.

5.1.2 Finite Elemente Methode (FEM)

Unter der FEM wird das Modellgebiet in eine finite Anzahl an Elementen, die ein Netzwerk bilden, unterteilt. Für jedes Element - meist Dreiecke oder Vierecke - wird dann eine Lösung für die Strömungsgleichung gesucht. Man wendet beispielsweise das Prinzip der Energiemini-mierung an; so werden alle Lösungen derart gewählt, dass sie zusammen eine Näherung der Strömungsgleichung bilden (HAITJEMA, 1995).

5.1.3 Randelemente Methode (BEM)

Bei der Randelemente Methode (eng.: *boundary element method*) (BEM) werden die Randwertprobleme in Form von Integralgleichungen formuliert (STRACK, 1989, S. 589). Es werden nur Ränder diskretisiert, über Sprungrelationen werden die partiellen Differentialgleichungen zu Integralgleichungen umgewandelt. Die Lösungen der Integrale werden über numerische Verfahren gefunden und erfüllen die Differentialgleichungen exakt; die Randbedingungen werden näherungsweise erfüllt (STRACK, 1989, S. 589).

5.2 Analytische Elemente Methode (AEM)

Bei der FDM und FEM wird auf die kontinuierliche Lösung verzichtet. Analytische Lösungen liefern jedoch für jeden beliebigen Punkt des Modellgebietes eine Lösung, lediglich an den Elementrändern ist eine Lösung aufgrund von Diskontinuitäten nicht möglich. Die AEM entspricht im Allgemeinen der BEM, jedoch erfolgt die Lösung der Integrale analytisch. Die AEM grenzt sich zudem deutlich von der BEM durch den Gebrauch von Gebietssenken / -quellen ab (STRACK, 1999).

Eine weitere Methode der Grundwassermodellierung stellt daher die *analytische Elemente Methode* (AEM) (eng.: *Analytical Element Method*) dar. An dieser Stelle wird nur eine kurze Einführung gegeben. STRACK (1989) und HAITJEMA (1995) gelten als die zentralen Lehrbücher und Standardwerke zum Thema der AEM (KRAEMER, 2007). Für weitere Ausführungen wird der interessierte Leser an die genannten Werke verwiesen. Weitere Einführungen und umfassende Literaturzusammenstellungen zum Thema der AEM bietet der Internetauftritt der Analytical Element Community¹.

Es existieren zahlreiche analytische Lösungen zur Beschreibung des Grundwasserflusses. Bei der Auswertung von Pumpversuchen in der Praxis angewandte geschlossene analytische Lösungen stellen z.B. die Theis- und die Hantush-Funktion dar (KINZELBACH und RAUSCH, 1995). Die elementaren analytischen Lösungen liefern kontinuierliche Lösungen. Wenn es sich um lineare, homogene, partielle Differentialgleichungen handelt, kann das Superpositionsprinzip (Kap. 4.7) angewandt werden. Als Beispiel kann die analytische Lösung für einen Brunnen genommen werden. Existieren mehrere sich beeinflussende Brunnen, so erhält man die Gesamtlösung, indem die Einzellösungen aufaddiert werden. Die einzelnen Funktionen, auf die das Superpositionsprinzip angewandt wird, werden als *analytische Elemente* (eng.: *analytical elements*) (AE) bezeichnet (STRACK, 1989, S. 404).

Die analytische Elemente Methode (AEM) wurde in den späten 1970er Jahren entwickelt. Die Auswirkungen des regionalen Kanalbauprojektes „Tennessee-Tombigbee Waterway“ in den USA auf lokale Flüsse sollten bewertet werden. Eine numerische Simulation, die regionale und lokale Aspekte gleichzeitig und mit der geforderten Genauigkeit abbilden konnte, war computertechnisch nicht möglich (HUNT, 2006). Otto D.L. Strack schlug die Modellierung mittels Superposition hunderter analytischer Funktionen vor (STRACK, 1981a). Hieraus entwickelte sich das Feld der AEM. Die Entwicklung und Weiterentwicklung der AEM beschränkt sich dabei auf einen kleinen Kreis an Wissenschaftlern (siehe auch: Abb. 5.1).

¹<http://www.analyticelements.org/> (letzter Abruf: 15.11.2007)

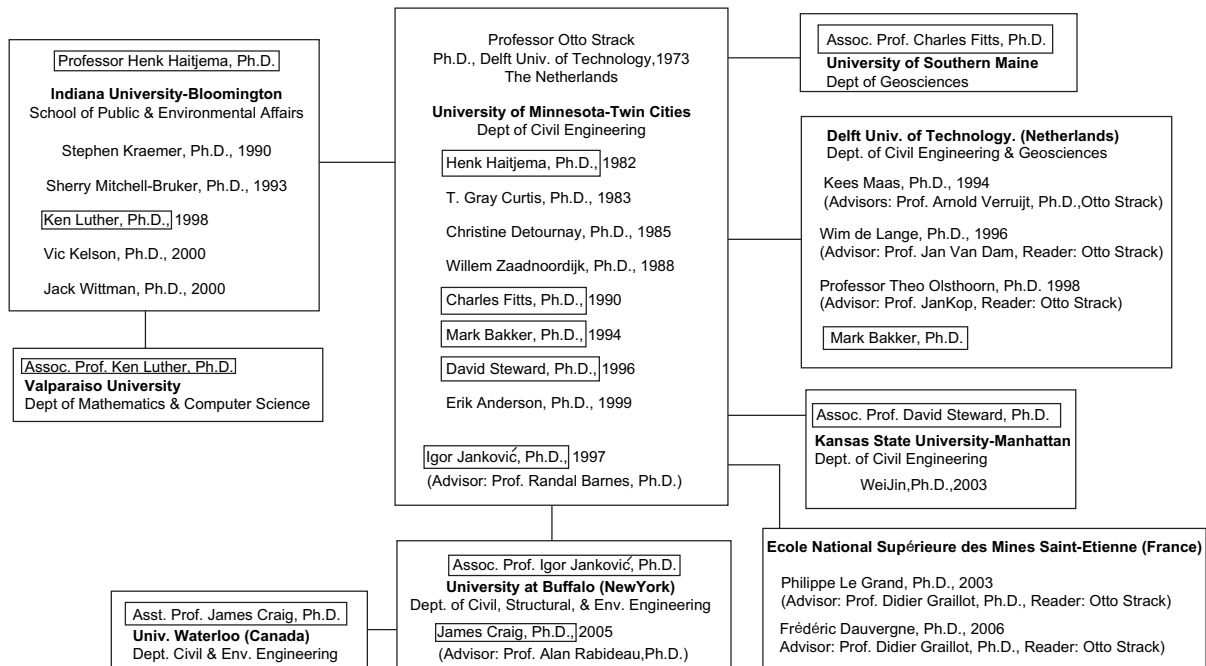


Abbildung 5.1: „Stammbau„ der AEM (nach: KRAEMER, 2007).

Zur Grundwassermodellierung stehen verschiedene AEM-Modelle zur Verfügung. Kommerzielle als auch frei verfügbare Modelle können gewählt werden. In dieser Arbeit wird das frei verfügbare Modell Tim^{ML} auf die Fragestellung hin angepasst und angewandt (Kap. 8, Kap. 9). Auch wenn AEM-Modelle vergleichsweise einfach zu handhaben sind, so sind diese in komplexer Formulierung aufgebaut. Sie machen sich analytische Lösungen zu Nutze, deren Entwicklung höherer mathematischer Kenntnisse bedarf. Weitergehend erfordert die Implementierung dieser Lösungen spezialisierte Programmierkenntnisse (HAITJEMA, 1995, S. 3).

5.2.1 Aufbau und Funktionsweise eines AEM-Modells

Um ein AEM-Modell aufzubauen, stehen unterschiedlichste Elemente zur Verfügung. Als *analytische Elemente* werden analytische Lösungen für den Grundwasserfluss bezeichnet. Jede analytische Lösung muss in die Form einer homogenen, linearen, partiellen Differentialgleichung überführt werden können (Kap. 4.3, Kap. 4.6), damit das Prinzip der Superposition (Kap.: 4.7) angewendet werden darf. Die Abflusspotential-Notation (Kap. 4.5) wird verwendet, um analytische Lösungen für den gespannten und ungespannten Fluss gemeinsam betrachten zu können und zu linearisieren. Weiterhin erfordert die Berechnung die Formulierung des Abflusspotentials in komplexer Schreibweise.

Ist die Dupuit-Forscheimer-Annahme (Kap. 4.4) erfüllt, so kann der Rechenaufwand der AEM verringert werden. In Fragestellungen im Rahmen der Wasserversorgung aus Lockergesteinsaquiferen wird die Dupuit-Forscheimer Annahme in der Regel eingehalten, und eine zweidimensionale Betrachtung ist für die meisten realen Problemstellungen gerechtfertigt (HAITJEMA, 1995, S. 4, S. 23 f.).

Bei einer AEM-Modellierung wird zunächst das Aquifer-System definiert. Es besteht aus einer oder mehreren Schichten, die über Widerstandsschichten (eng.: *resistance layers*) getrennt sind.

Die einzelnen Schichten werden entsprechend der AEM als homogen und isotrop angesehen. *Resistance layers* zwischen den Schichten besitzen einen, dem freien Fluss in vertikaler Richtung entgegengesetzten, *Widerstand* (c [d]) (eng.: *resistance*) (siehe Kap. 5.2.2.2, Gl. 5.1). Hydrogeologische Grenzen werden als nächster Schritt nach und nach in Form von analytischen Elementen hinzugefügt.

Analytische Elemente können bestimmte Freiheitsgrade haben; diese werden als *Elementkoeffizienten* (eng.: *element coefficients*) bezeichnet. Um eine allgemeine Lösung zu erhalten, muss ein Gleichungssystem für alle Koeffizienten unter Einhaltung der Randbedingungen aller Elemente gelöst werden. Ist die globale Lösung für die Koeffizienten gefunden, so kann an jeder Stelle des AEM-Modells das Abflusspotential (Φ) berechnet werden. Das Abflusspotential kann in Fließgeschwindigkeiten (v_i) und Standrohrspiegelhöhen (ϕ) umgerechnet werden. Lediglich an den Elementrändern selbst kommt es zu Diskontinuitäten, die eine Berechnung verhindern. Potentiale können mittels der AEM theoretisch bis weit außerhalb des modellierten Gebietes ermittelt werden. Interpretierbare Werte können allerdings nur in Regionen erwartet werden in denen genügend analytische Elemente definiert wurden (BAKKER und STRACK, 2003). Wie viele Elemente außerhalb des Gebietes, dem das primäre Interesse gilt, notwendig sind, kann nicht a priori bestimmt werden. STRACK weist darauf hin, dass eine Verbesserung der Lösung durch Elemente im *far-field* erreicht werden kann; die Ausdehnung des Gebietes, in dem Elemente definiert werden müssen, wird jedoch mittels „*trial and error*“ abgegrenzt (STRACK, 1989, S. 405).

Inwieweit sich die AEM durch ihren Aufbau von anderen Methoden der Grundwassermodellierung unterscheidet, ist von der Problemstellung abhängig. KRAEMER (2007) klassifiziert die Eignung der AEM und numerischen Methoden und stellt dies tabellarisch dar (Tab. 5.1).

Tabelle 5.1: Klassifizierung von Techniken der Grundwassermodellierung (verändert nach: KRAEMER, 2007).

	analytisch (z.B. Theis-Funktion)	Analytisches Element	Numerisch (z.B. FDM, FEM)
Lösung der jeweiligen Differentialgleichung	exakt	exakt	Näherung
Wiedergabe der Randbedingungen	exakt	Näherung	Näherung
Eignung für komplexe Hydrogeologie	gering	mittel	hoch

5.2.2 AEM-Randbedingungen und Arten analytischer Elemente

Die klassischen Randbedingungen existieren auch in AEM-Modellen, lediglich die Interpretation des Randbedingungs-Konzeptes erfolgt anders.

Randbedingung erster Art (*Dirichlet-Bedingung*): Es existiert ein Festpotential, welches sich in konstantem ϕ ausdrückt.

Randbedingung zweiter Art (*Neumann-Bedingung*): Ein konstanter Fluss wird festgelegt.

Randbedingung dritter Art (*Cauchy-Bedingung*): Kombination aus den Randbedingungen erster und zweiter Art. In AEM-Modellen über Widerstand gegenüber dem Fluss und Festpotential definiert.

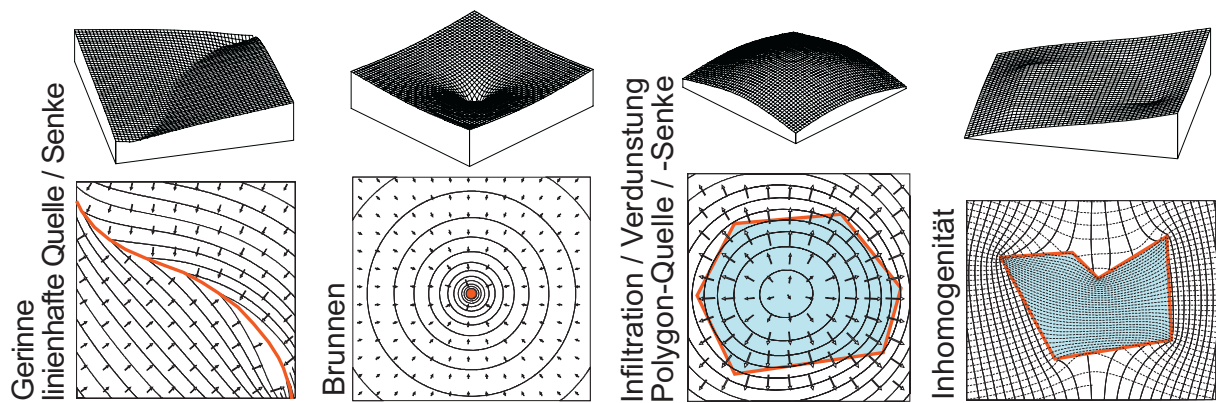


Abbildung 5.2: Beispiele analytischer Elemente, die in AEM-Modellen zur Verfügung stehen; Elemente - rot angedeutet bzw. rot begrenzt, Isopotentiallinien - schwarz, Geschwindigkeitsvektoren - schwarz (verändert nach: CRAIG, 2007).

Geschlossene Ränder lassen sich für regionale Aquifere kaum definieren. Sie als Aquifere unendlicher Ausdehnung zu betrachten und innere Randbedingungen in Form von Flüssen, Bächen oder Seen zu definieren, stellt daher die beste Herangehensweise dar (STRACK, 1989, S. 221). Diese Vorgehensweise entspricht der AEM. Das Konzept der inneren Randbedingungen wird auch in Anwendungen der FDM oder FEM teilweise umgesetzt. So können Brunnen als Randbedingung der Fluss-Randbedingungen (auch: Randbedingung der zweiten Art) angesehen werden (KINZELBACH und RAUSCH, 1995, S. 11 f.).

Die unterschiedlichen analytischen Elemente, die zur Verfügung stehen (u.a. Abb. 5.2), repräsentieren jeweils hydrogeologische Elemente für die analytische Lösungen gefunden werden können. Ein unendlich ausgedehnter regionaler Aquifer benötigt eine *far-field*-Bedingung, die das Verhalten der mathematischen Lösung im Strömungsfeld nahe der Unendlichkeit, dem *far-field*, kontrolliert. In AEM-Modellen wird daher im *far-field* ein Referenzpunkt (eng.: *reference point*) (P) benötigt, für den eine Standrohrspiegelhöhe (ϕ) vorgegeben wird.

Einige der wichtigsten analytischen Elemente, deren Nomenklatur sich hier am Grundwassermodell Tim^{ML2} (Kap. 8.4) orientiert, werden im Folgenden kurz vorgestellt:

5.2.2.1 Brunnen - *well*

Brunnen werden jeweils über die gesamte Mächtigkeit als verfiltert angesehen. Es wird für einen Brunnen entweder eine Standrohrspiegelhöhe (ϕ) definiert oder eine konstante Pumprate. Ist ein Brunnen nur teilweise verfiltert und soll dies im Modell berücksichtigt werden, so muss das Modell als *Mehrschicht-Modell* (eng.: *multilayer-model*) aufgebaut werden (BAKKER, 2001). BAKKER (2001) beschreibt wie es aufgrund des Mehrschicht-Aufbaus möglich ist, dreidimensionale Aspekte eines nur teilweise verfilterten Brunnens in einem Dupuit-Forchheimer Modell zu berücksichtigen.

5.2.2.2 Linienhafte Senke / Quelle - *line-sink*

Unterschiedliche Arten linienhafter Quellen bzw. Senken, *line-sinks* genannt, stehen zur Abbildung von Gerinnen oder anderen linienhaften Quellen bzw. Senken zur Verfügung. *Line-sinks*

²<http://bakkerhydro.org> (letzter Abruf: 23.11.2007)

entsprechen gleichmäßig entlang einer Linie verteilter Brunnen. Diese Entnahme der Brunnen ist identisch und der Zufluss erfolgt somit gleichmäßig entlang der Linie (STRACK, 1989, S. 283). Gleich eines einzelnen Brunnens können *line-sinks* entweder durch einen Fluss („Pumprate“) oder die Standrohrspiegelhöhe, hier der freie Wasserspiegel im Gerinne (ϕ^* [m]), definiert werden. Wird nur ϕ^* angegeben so entspricht der Fluss, bzw. die *Stärke* (σ [m/d]) (eng.: *strength*) dem Elementkoeffizienten des analytischen Elements. Rein über den freien Wasserspiegel im Gerinne (ϕ^*) definierte *line-sinks* werden als *head-line-sinks* bezeichnet und können als Dirichlet-Bedingung angesehen werden. Sie dienen vor allem im näheren *far-field* dazu, die Lösung zu verbessern. Im engeren Modellbereich besteht die Möglichkeit, Gerinne über *resistance-line-sinks* zu repräsentieren. Neben ϕ^* muss ein *Widerstand* (c [d]) (eng.: *resistance*) definiert werden. Die c ist nach Gl. 5.1 als eine Zeit definiert. Sie leitet sich aus dem Quotienten der Dicke (d [m]) der *Widerstandsschicht* (eng.: *resistance layer*), welche dem ungehinderten Wasserfluss in/aus den/dem unterliegenden Aquifer entgegenwirkt, und der vertikalen hydraulischen Leitfähigkeit dieser Widerstandsschicht, ab.

$$c = d/k_{fc} \quad (5.1)$$

Um aus c die Leakage (γ [m/d]) pro Flächeneinheit des Gerinnebettes zu ermitteln, wird die Differenz aus ϕ^* des Gerinnes und ϕ des Aquifers an dieser Stelle gebildet und durch c [d] geteilt (Gl. 5.2) (STRACK, 2006).

$$\gamma = \frac{\phi - \phi^*}{c} \quad (5.2)$$

Das beschriebene Widerstandskonzept gegenüber dem freien Fluss findet bei *resistance elements* wie *resistance-line-sinks* Anwendung. (STRACK, 2006). *Resistance-line-sinks* können als Cauchy-Bedingung aufgefasst werden (HAITJEMA, 1995, S. 299).

Weitere Arten von *line-sinks*, auf die an dieser Stelle nicht weiter eingegangen wird, stehen zur Verfügung (u.a. STRACK, 1989; BAKKER, 2007b).

5.2.2.3 Gebietssenke / -quelle - *area-sink*

Area-sinks simulieren gleichmäßige Infiltration oder Entnahme einer Fläche, die durch ein Polygon begrenzt wird. Damit ist es möglich, *Leakage* in einem Mehrschichten-Modell zu beschreiben und Grundwasserneubildung zu berücksichtigen. Die Nomenklatur der *area-sinks* grenzt sich nach deren Form ab. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden kreisförmige Gebietssenken als *circle-area-sink* (CAS) und durch ein Polygon begrenzte Gebietssenken als *polygon-area-sink* (PAS) bezeichnet. Hergeleitet werden *area-sinks* in STRACK (1989).

5.2.2.4 Inhomogenität - *inhomogeneity*

Die Aquiferschichten sind von konstanter Mächtigkeit und nicht geneigt. Diese Annahmen stellen eine große Vereinfachung der Wirklichkeit dar (HAITJEMA, 1995, S. 2). Um der Heterogenität in einem Aquifersystem zu begegnen, wurden Inhomogenitäten entwickelt. Durch Inhomogenitäten lassen sich Sprünge der effektiven Porosität (n_{eff} [-]), der hydraulischen Leitfähigkeit (k_f [m/d]) sowie der Aquifergeometrie an sich realisieren. Die Grenzen der Inhomogenitäten werden durch sogenannte *line-doublets* gebildet. *Line-doublets* unterschiedlicher Ordnung erlauben es, Sprünge an den Elementgrenzen zu beschreiben (STRACK, 1989, S. 297 ff.). Es ist durch

den Einsatz von Inhomogenitäten möglich, unterschiedliche Tiefenlagen des Stauers oder der *resistance layer* innerhalb eines Aquifersystems zu definieren. Heterogenitäten können kreisförmige, elliptische oder polygonförmige Zylinder sein.

Entsprechend der AEM sind Inhomogenitäten innerhalb ihrer Selbst wiederum als homogen anzusehen. Mehrere, aneinander grenzende Inhomogenitäten ermöglichen es, eine geneigte Aquiferbasis zu repräsentieren (FITTS, 2006).

5.3 Konzeptionelle AEM-Modellierung

Durch HAITJEMA (1995) wird die *konzeptionelle Grundwassermodellierung* mittels der AEM eingeführt und genauer ausgeführt. Modellgebiete verfügen oft über eine schlechte Datenlage und die Datenerhebung kann zeitaufwendig und vor allem kostenintensiv sein. Verfolgt man im Zuge der Modellierung ein streng konzeptionelles Vorgehen, so wird das AEM-Modell Stück für Stück aufgebaut. Die Komplexität des Modells wird nur erhöht, wenn es die Lösung verbessert. Sind z.B. nicht genügend Informationen über ein Gerinne verfügbar und muss entschieden werden, ob eine weitere Datenerhebung erforderlich ist, so wird einmal mit und einmal ohne das angenommene Ergebnis der Datenbeschaffung modelliert. Die Struktur der AEM-Modelle erlaubt und begünstigt die fortlaufende Anpassung sowohl der Modellparameter als auch der Modellgeometrie und Modellkomplexität. Beeinflusst eine Zusatzinformation, die in das Modell aufgenommen wurde, die Modellergebnisse signifikant, so kann anschließend eine erforderliche Datenerhebung gerechtfertigt werden. Erweist sich die Mehrinformation als nicht signifikant, ist die Nichtberücksichtigung des untersuchten Aspektes vertretbar. Diese Form des Hypothesentestens hat sich als effektiv erwiesen (HAITJEMA, 1995, S. 302 ff.)

5.3.1 AEM - Verbreitung und Stand der Forschung

HUNT (2006) gibt einen Überblick über publizierte Anwendungen der AEM. Gut ein Drittel der Studien befasst sich mit der Interaktion Grundwasser und Oberflächenwasser. Oft wird die Eigenschaft der AEM-Modelle genutzt, die eine schrittweise Erweiterung und schrittweise Differenzierung einer Fragestellung zulassen. Diese Art der Modellierung wird auch durch HAITJEMA (1995) vertreten und eingehend beschrieben. AEM-Modelle dienen als Hilfsmodelle im Zuge von numerischen Modellierungen. Einige Anwendungen zur Kopplung von AEM-Modellen und FDM-Modellen (z. B. MODFLOW³) sind publiziert. CRAIG (2005) verbindet die AEM mit der FDM um Stofftransport zu betrachten.

Vergleiche der AEM Lösungen mit der exakten Lösung und Lösungen, ermittelt durch Finite Elemente Methode (FEM) Modelle oder Finite Differenzen Methode (FDM) Modelle, zeigen gute Übereinstimmung (u.a. BAKKER und STRACK, 2003; BAKKER, 2006b). Abb. 5.3 zeigt das graphische Resultat einer vergleichenden Studie, in der AEM Lösungen, MODFLOW2000 Lösungen und exakte Lösungen gegenübergestellt werden (BAKKER, 2006b).

Die Anwendung von AEM-Modellen zur Schutzzonenausweisung wird auch durch die EPA unterstützt. Mit frei verfügbarer Software WhAEM2000 unterstützt die EPA die AEM als relativ einfache, praktikable und schnelle Methode der Grundwassermodellierung (KRAEMER,

³<http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow.html> (letzter Abruf: 15.11.2007)

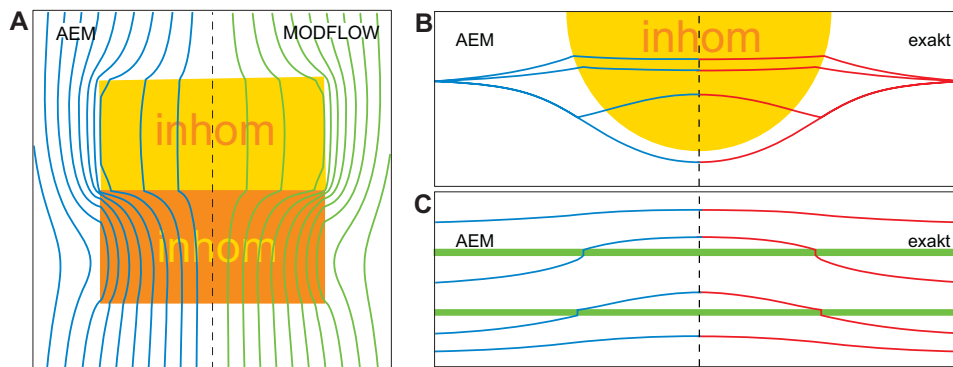


Abbildung 5.3: A: zwei rechteckige Inhomogenitäten (orange Signatur) mit gemeinsamer Grenze, Vergleich der analytische Elemente Methode (blaue Grundwassergleichen) und MODFLOW2000 (grüne Grundwassergleichen); B: Stromlinien in einem Mehrschichtmodell, die eine kreisförmige Inhomogenität (orange Signatur) passieren, in der Draufsicht, Vergleich der AEM (blaue Stromlinien) und der exakten Lösung (rote Stromlinien); C: seitlicher Schnitt der in B beschriebenen Situation, Leaky Layers (grüne Signatur) (verändert nach: BAKKER, 2006a).

2005 In: HUNT, 2006). Neuere und weiterführende Anwendungen beschäftigen sich mit der Modellierung von Mehrschicht-Aquiferen, der 3D Betrachtung von Problemen und instationären Fragestellungen (HUNT, 2006). Mit Tim^{ML} ist auch ein frei verfügbares Modell vorhanden, welches Mehrschicht-Aquifere behandeln kann. STRACK (2006) weist darauf hin, dass die Anwendung von Mehrschichtmodellen oder instationäre Betrachtungen, verglichen mit stationären Einschnittmodellen, bisher nicht sehr erfolgreich waren. Instationäre und Mehrschicht-Probleme sind Gegenstand der aktuellen Forschung und Weiterentwicklung der AEM. Eine makroskalige Studie war der Aufbau des AEM-Mehrschicht-Grundwassermodells NAGROM, welches mit einer Ausdehnung von ca. 30.000 km² bisher die größte Anwendung darstellt (DE LANGE, 2006). Abb. 5.4 fasst die Studien zu existierenden Anwendungen der AEM nach Kategorien zusammen. STRACK (2006) stellt die neusten Entwicklungen auf dem Gebiet der

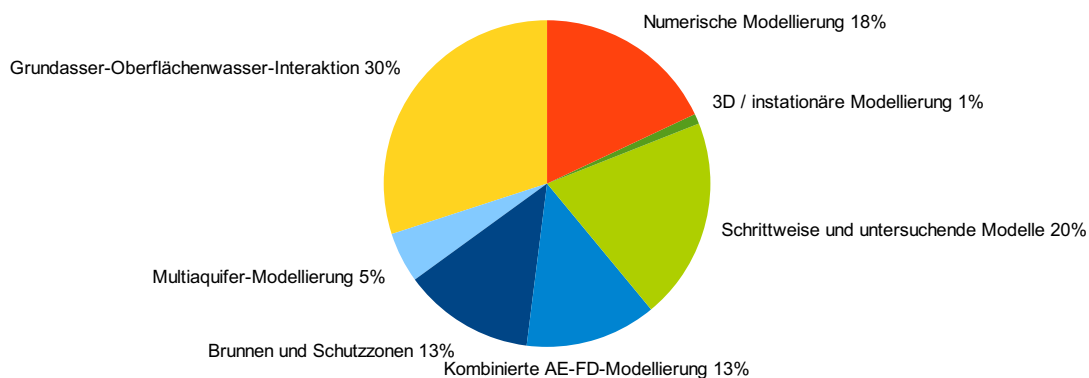


Abbildung 5.4: Verteilung der AEM-Anwendungen der Basis von 114 berücksichtigter Studien (verändert nach: HUNT, 2006).

AEM zusammen. Es gibt zwei Entwicklungsrichtungen. Zum einen liegt das Interesse darin, weitere Elemente herzuleiten, welche die Differentialgleichungen mit hoher Genauigkeit erfüllen, und diese dann mit Rückgriff auf das Prinzip der Superposition anzuwenden. Zahlreiche Elemente wurden für zwei- und dreidimensionale Probleme hergeleitet. Instationäre Elemente wurden entwickelt. Die zweite Entwicklungsrichtung befasst sich mit zwei- oder dreidimen-

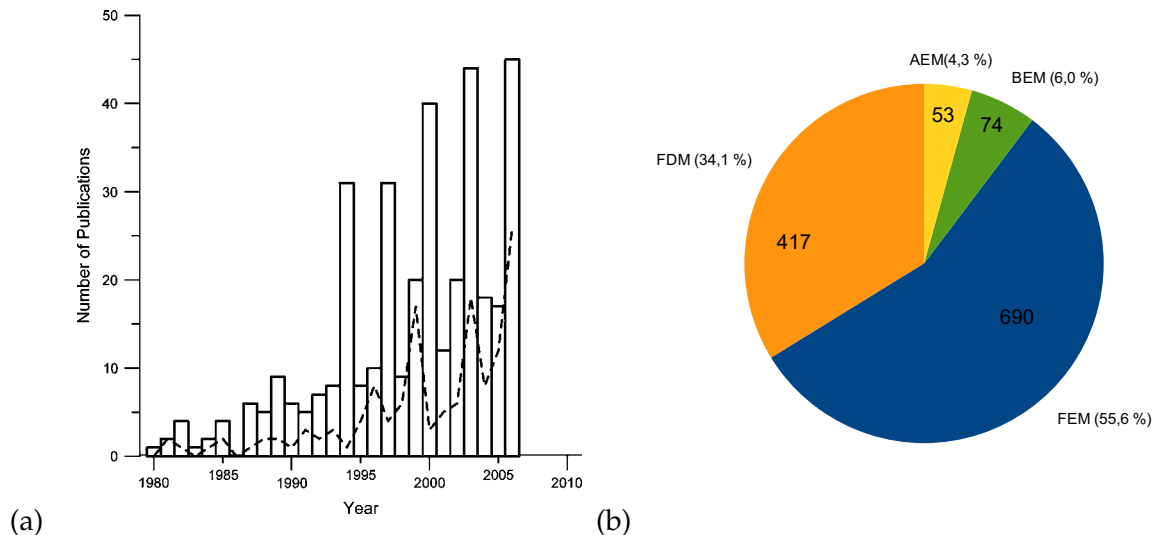


Abbildung 5.5: (a) Trend-Histogramm von AEM Veröffentlichungen (Balken zeigen absolute Publikationsanzahl, Linie zeigt die Anzahl der Publikationen in Fachzeitschriften); (b) Veröfentlichungen zur Grundwassermodellierung (Stand: Oktober 2006), nach Methode klassifiziert: FEM - Finite Elemente Methode, FDM - Finite Differenzen Methode, BEM - Boundary Elemente Methode, AEM - analytische Elemente Methode; (jeweils verändert nach: KRAEMER, 2007).

sionalen Vektorfeldern, die dem Ausdruck von Divergenzen dienen. Divergenzen können z.B. Leakage oder Infiltration sein; Rotationen werden z.B. durch sich verändernde Aquiferparameter verursacht (STRACK, 2006). *Area-sinks*, die der Beschreibung von Leakage dienen, sind frühe Entwicklungen auf diesem Gebiet (STRACK, 2006, 1989). Elemente, die zur Beschreibung von Divergenzen entwickelt wurden, können durch minimale Modifikation auch Rotationsprobleme beschreiben. STRACK (2006) weist darauf hin, dass mit aktuell verfügbaren analytischen Elementen, die Divergenzen und Rotationen berücksichtigen, die Modellierung von geeigneten Aquiferen oder sich kontinuierlich verändernder Infiltration oder *Leakage* möglich ist.

5.3.2 Partikel Tracking

Partikel Tracking dient zur Simulation der Grundwasserbewegung. Es werden Stromlinien von fiktiven Partikeln verfolgt. Partikel Tracking kann daher nur den rein advektiven Transport abbilden. Die Methode kann zum einen zur *Vorwärtsmodellierung* genutzt werden, indem sich Partikel mit positiver Schrittweite entlang des hydraulischen Gradienten bewegen. Zum anderen ist eine *Rückwärtsmodellierung* möglich, indem z.B. Partikel in einem Brunnen (*Br*) gestartet werden und sich mit negativer Schrittweite entgegengesetzt des hydraulischen Gradienten bewegen (HINKLE und SNYDER, 1997).

Für FDM-Modelle wurden dreidimensionale Partikel Tracking Methoden u.a. durch POLLOCK (1989) entwickelt. Einen dreidimensionalen Partikel-Fluss abzubilden ist auch durch eine AEM-Modellierung möglich. Wenn aufgrund der Dupuit-Forchheimer Annahme (Kap. 4.4) die Druckhöhe in vertikaler Ausdehnung des Aquifers als konstant angenommen und der Widerstand gegen vertikalen Fluss vernachlässigt wird, so ist q_z über die Höhe des Aquifers als konstant anzusehen (siehe auch: Gl. 4.13). Dies ermöglicht, die Höhe von Partikeln, die den Aquifer an einem beliebigen Punkt betreten, zu bestimmen (STRACK, 1984). Die von STRACK (1984) einge-

fürte Methode wurde mit der exakten dreidimensionalen Behandlung verglichen. Die Ergebnisse lassen die Anwendung der entwickelten Methode innerhalb der Dupuit-Forchheimer (DF) Annahme zu, es wird aber darauf hingewiesen, dass stets abgewogen werden muss. Eine Kombination aus DF-Modell und dreidimensionaler Modellierung kann in speziellen Fragestellungen erforderlich sein. Die Partikel bewegen sich für jeden Schritt in der mittleren Grundwassergeschwindigkeit und Fließrichtung des jeweiligen Startpunkts. In AEM-Modellen wie Tim^{ML} findet eine automatische Schrittweitenanpassung statt. Nähert sich ein Partikel einem Element wie beispielsweise einem Gerinne, welches durch *line-sinks* repräsentiert wird, so wird die Schrittweite automatisch verringert.

5.3.3 Flux inspection lines

Flux inspection lines dienen innerhalb der AEM als Werkzeug, um Aspekte des Wasserhaushalts zu betrachten. Es wird senkrecht zu einer Linie aus dem Abflusspotential der jeweilige Abfluss bzw. Fluss berechnet. Aus *flux inspection lines* lassen sich Polygone bilden und somit der Fluss in eine oder aus einer zu betrachtenden Region quantitativ betrachten. *Flux inspection lines* wurden innerhalb des AEM-Modells GFLOW2000⁴ und dem darauf basierenden Modell WhAEM2000⁵ realisiert.

5.4 Fazit

In dieser Arbeit findet die Grundwassermodellierung mittels der *analytischen Elemente Methode* (AEM) statt (siehe auch Kap. 8 und Kap. 9). Die AEM nimmt im Kontext der existierenden Methoden zur Grundwassermodellierung eine Sonderstellung ein. Die klassischen numerischen Methoden der Grundwassermodellierung wie die Finiten Differenzen Methode (FDM) oder der Finiten Elemente Methode (FEM) dominieren in der Zahl der Anwendungen. Gerade im deutschen Sprachraum ist die AEM unterrepräsentiert. Entwicklungen fanden und finden vor allem in den USA sowie den Niederlanden statt.

Die Anwendung der AEM erfordert Kenntnisse des Aufbaus und der Funktion dieser Methode. Unter Rückgriff auf die in Kap. 4 gelegten Grundlagen wurde somit die AEM ausgeführt und auch gegenüber anderen Methoden der Grundwassermodellierung abgegrenzt. Während der praktischen Modellierung ist die Kenntnis der hier vorgestellten Arten der analytischen Elemente die entscheidende Voraussetzung, um zu wissenschaftlich haltbaren Modellierungsergebnissen zu gelangen.

Neben der AEM wurde außerdem kurz die Methode des Partikel Trackings eingeführt. Wie geeignet die in der AEM sowie der Partikel Tracking Methode zu treffenden Annahmen in Hinblick auf das ERGO-Projekt sind, wird in Kap. 9 getestet und in Kap. 10 diskutiert werden.

⁴<http://www.haitjema.com/> (letzter Abruf: 23.11.2007)

⁵<http://www.epa.gov/athens/software/whaem/> (letzter Abruf: 23.11.2007)

6 Hydrologische Dynamik

Ein hydrologisches System unterliegt einer gewissen Dynamik. Nicht nur die Wasserhaushaltskomponenten unterliegen dieser zeitlich-räumlichen Dynamik, sondern folglich auch alle durch die Hydrologie und Hydrogeologie betrachteten Größen. Die Erfassung, Beschreibung und Simulation dieser Dynamik ist Gegenstand der Hydrologie. Als integrative Größe dient hierbei meist der Abfluss am Wasserscheidendurchbruch eines Einzugsgebiets, welches das zu untersuchende System darstellt. Neben den beschriebenen Komponenten ist für die Ausbildung einer charakteristischen hydrologischen Dynamik der Aufbau des betrachteten Systems entscheidend. Die Kombination aus Systemaufbau und der Variation des Systeminputs führt letztendlich zur Ausbildung der *hydrologischen Dynamik* (eng.: *hydrological dynamics*).

An Trinkwasserfassungen spiegelt sich die hydrologische Dynamik auf zweierlei Art wider. Zum einen kommt es zu einer Variation des Wasserdargebots, welches sich z.B. im Jahresverlauf in Grundwasserspiegelschwankungen äußert; zum anderen kommt es zu einer typischen Zusammensetzung des geförderten Wassers. Die Zusammensetzung ändert sich in Hinblick auf die chemische Zusammensetzung und, insofern dies in seiner Definition von der chemischen Zusammensetzung getrennt werden kann, auch in Hinblick auf die verschiedenen Wasseralter, die nebeneinander vorliegen können.

In diesem Kapitel werden Möglichkeiten und Methoden beschrieben und diskutiert, die die Abbildung der hydrologischen Dynamik zum Ziel haben. Die Ergebnisse werden dann in Kap. 7 und Kap. 8 wieder aufgegriffen.

6.1 Wasseralter, Altersdatierung und Altersverteilung

Abb. 6.1 stellt die aus der hydrologischen Dynamik resultierenden Alterskomponenten eines Aquifersystems anschaulich dar. Das Alter eines Wassers kann als die Zeitspanne definiert werden, die seit dem letzten Kontakt mit der Erdatmosphäre verstrichen ist (u.a. PLUMMER ET AL., 1993, S. 255f.). CLARK und FRITZ (1997) grenzen den Begriff „Alter“ genauer ab, da der herkömmliche Begriff zu zweierlei Missverständnissen führen kann. (1) Nur Tritium als Bestandteil des Wassermoleküls kann Wasser „datieren“. Andere Methoden der Altersdatierung basieren auf gelösten Bestandteilen, deren Menge wiederum durch physiochemische und biologische Prozesse kontrolliert wird. (2) Mischung und Konvergenz verschiedener Fließbahnen führen im Regelfall zu einer Integration eines ganzen Bereiches an Grundwasserherkunftsräumen und Grundwasseralter. Als Konsequenz dieser zwei Punkte sollte nicht von „Alter“ sondern von der „mittleren Verweilzeit“ gesprochen werden (CLARK und FRITZ, 1997, S. 172).

An einem Punkt des Systems kann es von Interesse sein, die *Altersverteilung* (eng.: *age distribution*) des Wassers zu betrachten. Die Anteile der unterschiedlichen hydrologischen Komponenten am Mischwasser, welches an diesem Punkt vorliegt, besitzen unterschiedliche mittlere

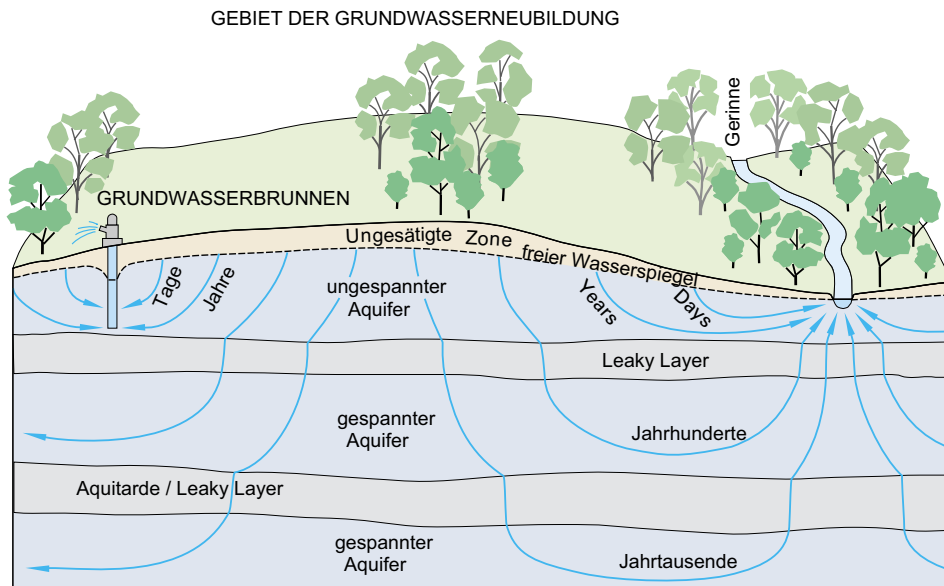


Abbildung 6.1: Überblick über unterschiedliche Alterskomponenten in einem fiktiven Aquifersystem (verändert nach: HEATH, 1983 und WINTER ET AL. 1998; In: FOCAZIO ET AL., 2002, S. 4).

Verweilzeiten. Schlüsselt man diese Anteile nach Altersklassen auf, so erhält man eine Altersverteilung am betrachteten Punkt. In der Literatur wird unter dem Begriff *age distribution* oft auch die räumliche Verteilung der mittleren Verweilzeiten verstanden (u.a. VARNI und CARRERA, 1998). Begrifflich wird zwischen räumlicher und zeitlicher Altersverteilung kaum differenziert. Für Altersverteilungen an einem Punkt werden in der englischsprachigen Literatur u.a. auch die Begriffe *transit time distribution* (MAŁOSZEWSKI und ZUBER, 1982; CORNATON und PERROCHET, 2006) und *travel time distribution* (CORNATON, 2006; CRAIG ET AL., 2006) verwendet. Die Konzepte beschreiben entweder die Altersverteilung des Wassers direkt oder die Altersverteilung eines idealen Tracers. Sie leiten sich entweder von der allgemeinen Transportgleichung (MAŁOSZEWSKI und ZUBER, 1982) oder aus der Reservoirtheorie (CORNATON und PERROCHET, 2006) ab. Werden stagnante Zonen vernachlässigt, so entspricht die Altersverteilung eines idealen Tracers der des Wassers. Einige Konzepte berücksichtigen die Dispersion und Diffusion. MAŁOSZEWSKI und ZUBER (1982) berücksichtigen die Dispersion für den Transport, GOODE (1996) überträgt das Konzept direkt auf Wasseralter. GOODE (1996) berücksichtigt somit diffusive und dispersive Prozesse nicht als Funktion eines zu untersuchenden Tracers, sondern des Wasseralters direkt. Werden Dispersion und Diffusion vernachlässigt, so werden berechnete Wasseralter allgemein unterschätzt (u.a. MAŁOSZEWSKI und ZUBER, 1991; WALKER und COOK, 1991; GOODE, 1996). GOODE (1996) zeigt, dass Dispersive verstärkt in Bereichen geringer Durchlässigkeit ihre Auswirkung auf die Altersstruktur haben. Prozentual nimmt durch eine rein advective Betrachtung der Wasseralter die Abweichung zu Methoden, welche dispersive Prozesse berücksichtigen, zu; absolut betrachtet relativiert sich diese Aussage (GOODE, 1996).

Mathematisch werden Altersverteilungen als Wahrscheinlichkeits- oder Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen beschrieben. Handelt es sich dabei um eine multimodale Altersverteilung, so ist die Aussage einer einzigen mittleren Verweilzeit zur Charakterisierung dieser Verteilung stark begrenzt (CORNATON, 2006; CORNATON und PERROCHET, 2006). Soll die Altersstruktur

eines Wassers betrachtet werden, so erfordert dies daher die Darstellung der Altersverteilung. Stetige wie diskretisierte Altersverteilungen liefern hierbei einen größeren Informationsgehalt als eine mittlere Verweilzeit allein.

Werden einfache Systeme betrachtet, so lassen sich Altersverteilungen bis auf einzelne Strompfäden herunterbrechen beziehungsweise mathematisch als stetige Verteilung abbilden. Konzepte, die für diese Beschreibung bereitstehen, werden u.a. durch MAŁOSZEWSKI und ZUBER (1982), ZUBER und MAŁOSZEWSKI (2001), MAŁOSZEWSKI ET AL. (2004), CORNATON (2006) beschrieben. Die hydrologische Dynamik kann somit über Altersverteilungen beschrieben werden. Verschiedene Methoden stehen zur Ermittlung von Altersverteilungen zur Verfügung und sollen im Folgenden vorgestellt werden.

6.2 Abbildung durch Tracer

Natürliche Tracer ermöglichen, integrierende Aussagen über die hydrologische Dynamik eines hydrologischen Systems zu treffen. Hierbei wird das vollkommene oder zumindest weitestgehend konservative Verhalten natürlicher Tracer ausgenutzt. Ideale natürliche Tracer, wie ^3H , ^{18}O oder Deuterium, sind selbst Bestandteil des Wassermoleküls. Das konservative Verhalten ermöglicht die Gleichsetzung von Tracertransport und Wasserfluss.

Eine Vielzahl natürlicher Tracer sind Teil des Wasserkreislaufes und stehen somit zur Datierung von Grundwässern unterschiedlicher Verweilzeiten zur Verfügung (siehe Abb. 6.3). Meist handelt es sich um Isotopentracer. Anthropogene Pollutionstracer wie FCKW eignen sich allerdings auch. Natürliche Tracer verfügen über eine bekannte oder vorher zu ermittelnde Inputfunktion und markieren das System flächenhaft. Als „jung“ bezeichnet man hierbei Wasser, die durch anthropogene Vorgänge beeinflusst wurden. Emission u.a. von schwer abbaubaren Spurengasen, oberirdischen Nukleartests und Emissionen von Wiederaufbereitungsanlagen für Nuklearbrennstoffe haben zur Ausbildung von charakteristischen Inputfunktionen geführt. Abb. 6.4 stellt die Inputfunktionen verschiedener natürlicher Tracer dar, die zur Untersuchung der hydrologischen Dynamik junger Grundwässer herangezogen werden können. Die Datierung junger Grundwasserkomponenten nutzt SEILER (2001), um in vertikaler Aquiferausdehnung zwei Bereiche unterschiedlicher hydrologischer Dynamik auszuweisen. Aufgrund des mittleren Alters nimmt SEILER (2001) somit eine räumliche Unterteilung des Aquifers in Bereiche aktiver (meist 0-100 m Tiefe) und Bereiche passiver Neubildung (meist 100 bis mehrere 100 m Tiefe) vor. Grundlage dieser Einteilung ist der tiefenabhängige Chemismus, der auf unterschiedlich langen Verweilzeiten basiert (SEILER, 2001). Abb. 6.2 verdeutlicht diese Aussage anhand von Tritium-Werten.

Die Interpretation von gemessenen Tracerkonzentrationen wird gewöhnlich mit Hilfe von Modellen ausgeführt, die mathematisch die Altersverteilung der Grundwasserprobe anpassen (CORCHO ALVARADO ET AL., 2007). Typische Black-Box-Modelle, die hierbei angewandt werden, sind (a) das Piston-Flow-Modell (PFM), (b) das Exponentialmodell (EM), (c) das Dispersionsmodell (DM) und die Kombination aus (a), (b) oder (c) wie z.B. das Exponential-Piston-Flow-Modell (EPFM). Hergeleitet und ausführlich beschrieben u.a. in MAŁOSZEWSKI und ZUBER (1982), MAŁOSZEWSKI ET AL. (2004). Die Box-Modelle verfügen über einen bis wenige anzupassende Parameter wie die mittlere Verweilzeit (T_m) und Dispersionskoeffizient (P_D).

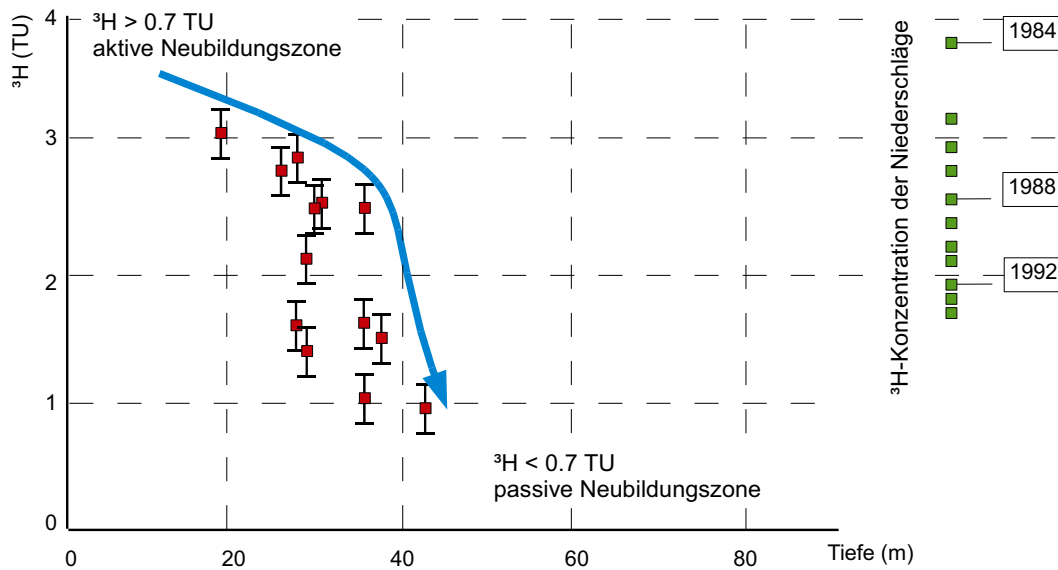


Abbildung 6.2: Änderung des Tritiumgehalts mit zunehmender Probenahmetiefe; tritiumfreie Bereiche stellen den Übergang vom aktiven zum passiven Neubildungsbereich dar (verändert nach: SEILER, 2001, S. 62).

Die Anpassung von freien Modellparametern erfordert eine gewisse Dichte von Messungen. Diese Voraussetzung kann (a) durch eine hohe räumliche Probendichte, (b) durch eine Probenzeitreihe an einem festen Ort oder (c) durch Multitracer Messungen an ausgewählten Probenahmeorten erfüllt werden (CORCHO ALVARADO ET AL., 2007). Die Verwendung von Box-Modellen setzt eine Vereinfachung der komplexen Fließverhältnisse des Aquifers voraus. Treten Mischungen verschiedener Komponenten unterschiedlicher mittlerer Verweilzeit auf, können diese jedoch mit Hilfe von Multitracermessungen identifiziert werden. Für unterschiedliche Datierungszeiträume stehen jeweils geeignete Tracer zur Verfügung (Abb. 6.3). CORCHO ALVARADO ET AL. (2007) verwenden $^3\text{H}/^3\text{He}$, ^{85}Kr , ^{39}Ar und ^{14}C , um die Altersstruktur eines halbgespannten Aquifers im Pariser Becken zu betrachten. CORCHO ALVARADO ET AL. (2005) untersuchten gleichzeitig $^3\text{H}/^3\text{He}$, ^{85}Kr , SF_6 und FCKW-12 in einer Studie auf der Insel Fünen in Dänemark. BAUER ET AL. (2001) führten eine Multitracerstudie mit ^3H , ^{85}Kr , SF_6 und FCKW-113 durch. Bei allen genannten Studien werden multiple Tracer eingesetzt, um ein möglichst genaues Bild der Altersstruktur des Aquifers zu bekommen. Black-Box-Modelle werden angepasst und mittlere Verweilzeiten ermittelt. Der Multitracer Ansatz wird jeweils als geeignet bewertet, um Mischkomponenten zu identifizieren. Es wird hierbei zwischen jungen und älteren Komponenten unterschieden.

Liegt eine Mischung verschiedener Komponenten vor, so können Kompartimentmodelle (auch: Mixing-Cell-Modelle) eingesetzt werden, um die Anteile der verschiedenen Komponenten aus Tracerdaten sowie anderen hydrochemischen Daten zu bestimmen (CAMPANA ET AL., 2001). Auch die beschriebenen Black-Box-Modelle können unter Aufnahme eines weiteren Parameters, der die Aufteilung unter zwei Komponenten beschreibt, Rückschluss auf die Mischungsanteile liefern (ZUBER und MAŁOSZEWSKI, 2001).

Um Komponenten zu datieren, deren Verweilzeit in wenigen Wochen bis zu zwei Jahren liegt, lässt sich ^{18}O und Deuterium einsetzen. Der sich aufgrund der Isotopeneffekte ausbildende

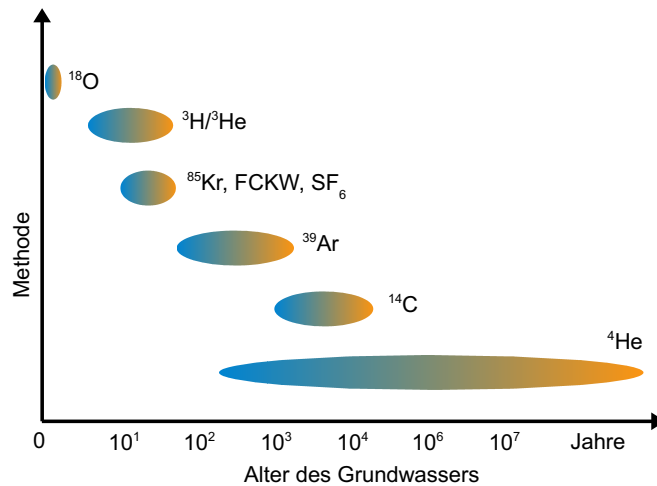


Abbildung 6.3: Übersicht der natürlichen Tracer, die zur Datierung von Grundwässern mit einem Alter von null bis zu mehr als einer Million Jahre zur Verfügung stehen (verändert nach: R. Purtschert, verändert; In: HINSBY, 2001).

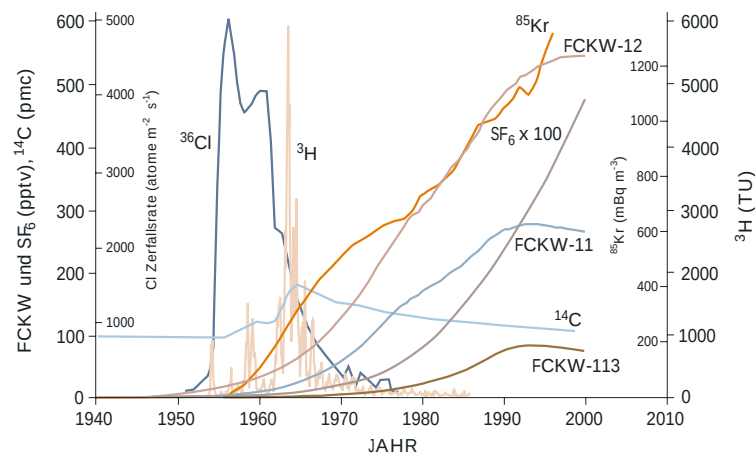


Abbildung 6.4: Inputfunktionen verschiedener natürlicher Tracer, die zur Datierung jungen Grundwassers herangezogen werden können (verändert nach: HINSBY, 2001).

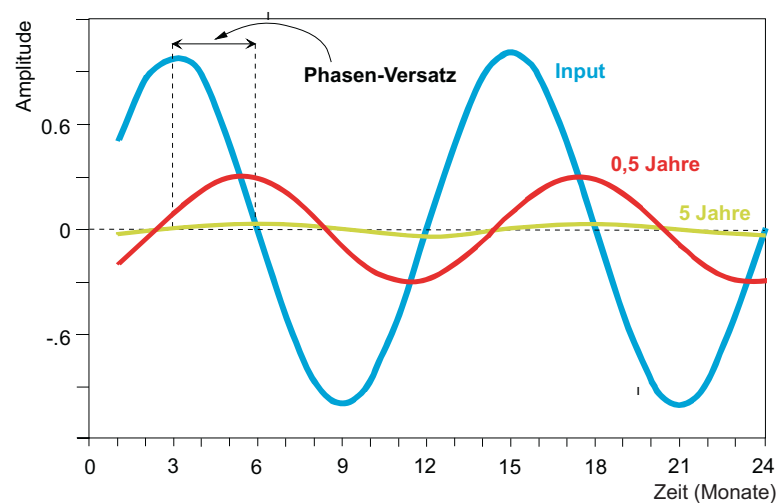


Abbildung 6.5: Verbindung zwischen Amplitude und saisonaler Veränderung von $\delta^{18}\text{O}$ für Niederschlag und Grundwasser mit unterschiedlicher mittlerer Verweilzeit (T_m) entsprechend dem Exponentialmodell (EM); die Phasen-Verschiebung reicht bis zu 3 Monaten mit steigender T_m (verändert nach: GEYH, 2001, S. 69)

Jahresgang im Niederschlag bildet sich gedämpft und mit zeitlichem Versatz in den jüngsten Grundwasserkomponenten ab (CLARK und FRITZ, 1997, S. 173 f.). Diese in Abb. 6.5 dargestellte Phasen-Verschiebung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte kann u.a. zur Datierung genutzt werden; um Aussagen treffen zu können, muss allerdings eine Zeitreihe an Proben vorliegen.

Handelt es sich um kleinräumige bekannte Grundwasserneubildungsgebiete, so kann die Bestimmung der Altersverteilung auch über künstliche Markierversuche geschehen. Verweilzeiten im System von wenigen Tagen bis Wochen sind hierbei Voraussetzung. Handelt es sich um regionale Aquifersysteme wie im Allgemeinen bei Fragestellungen der Wasserversorgung, so ist die Bestimmung über Tracerversuche problematisch. Eine Markierung des gesamten Neubildungsgebietes ist flächenhaft meist nicht möglich. Ausschlusskriterium für künstliche Tracerversuche zur Abbildung der gesamten Spannweite der Altersverteilung bildet der Faktor Zeit.

6.3 Abbildung durch Grundwassermodelle und kombinierte Ansätze

Einfache Black-Box Modelle werden eingesetzt, um entweder direkt oder über die Anpassung an Tracer die hydrologische Dynamik einfacher Systeme abzubilden. Neben den Modellen von MAŁOSZEWSKI und ZUBER (1982) stehen weitere Black-Box-Modellkombinationen (siehe Abb. 6.6) zur Verfügung, um einfache Systeme zu modellieren und Altersverteilungen zu erhalten. Ein anderer Ansatz versucht, die hydrologische Dynamik innerhalb klassischer Grundwassermodelle abzubilden. Hierzu werden Partikel Tracking (siehe auch Kap. 5.3.2) Simulationen angewandt. Die Partikelsimulation liefert rein advective Fließzeiten. Werden hohe Partikelanzahlen verwendet, so lässt sich die Methode annähernd quantitativ nutzen, um Alterskomponenten auszuweisen. Partikel Tracking Methoden werden häufig eingesetzt, um spezifische Transportprobleme zu lösen. Neben der Simulation von Schadstoffausbreitungen finden Partikelsimulationen Anwendung in der Ausweisung von Schutzzonen. Die hydrologische Dynamik wird mittels Partikel Trackings daher oft nur in Teilaspekten abgebildet. Im Mittelpunkt des Interesses steht bei Schutzzonen die minimale Verweilzeit. Einige Studien ermitteln mit Hilfe des Partikel Trackings die mittlere Verweilzeit (T_m). Es handelt sich hierbei um das *kinematische Alter* (eng.: *kinematic age*). Das kinematische Alter stellt eine Vereinfachung der Realität dar, wird jedoch in vielen Studien zur Interpretation von Tracerdaten hingenommen (VARNI und CARRERA, 1998). Diese Limitierung wird von WALTER (1985) wie folgt ausgedrückt (VARNI und CARRERA, 1998):

„The problem is that in many systems the hydraulics of the system are not in equilibrium with the geochemistry. And so it's not really right to try and validate the use of an environmental tracer by comparing tracer times computed from the geochemical data with those computed from the hydraulic model. They're two different things, and the person using the isotope actually hurts his/her case and in some cases discredits the use of his/her tracer when actually the tracer represents the reality and the hydraulics are just a transient artifact of recent history.“

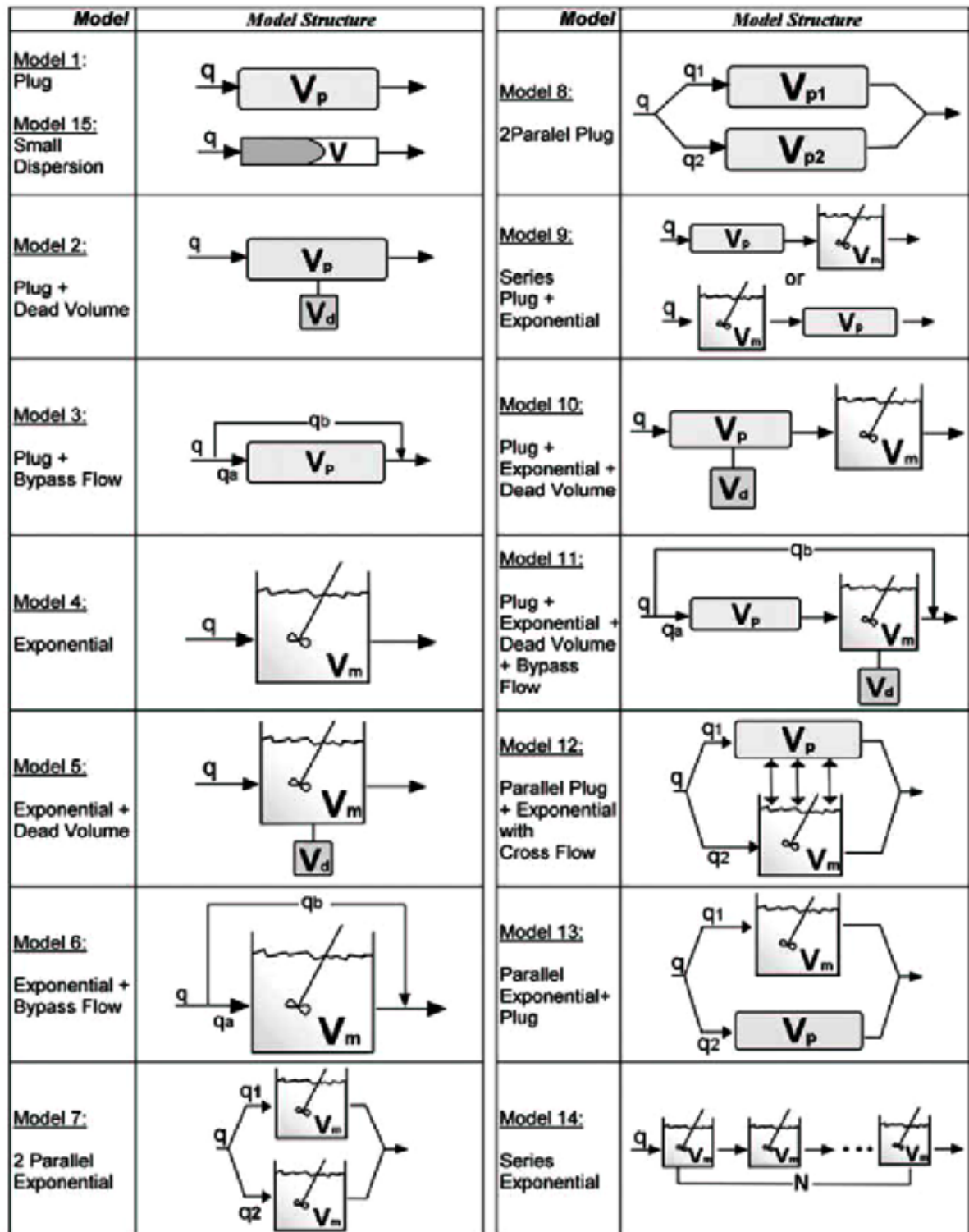


Abbildung 6.6: Verschiedene mögliche Box-Model-Typen, die zur Modellierung von Verweilzeiten in Aquiferen herangezogen werden können; q: Aufteilungsfaktor, m: mixing / Exponentialmodell, p: Piston Flow, d: Totvolumen (nach: OZYURT und BAYARI, 2003).

Dispersion und Diffusion berücksichtigende Modelle, wie behandelt durch MAŁOSZEWSKI und ZUBER (1982), wurden aufgrund der Limitierungen entwickelt, die sich durch die Betrachtung des rein advektiven Flusses ergeben. Die Ansätze sind jedoch transportspezifisch und erfordern starke Vereinfachungen des Systems, wie die Vernachlässigung der räumlichen Heterogenität von Aquiferparametern (VARNI und CARRERA, 1998). VARNI und CARRERA (1998) sehen daher die Anwendung von Partikel Tracking zur Ermittlung der räumlichen Verteilung von Verweilzeiten in einem heterogenen Aquifer als gerechtfertigt an. GOODE (1996) zeigt, dass reine Partikel Trackings durchaus die Alterstruktur eines Aquifers angemessen wiedergeben. CASTRO und GOBLET (2005) vergleichen mittlere Verweilzeiten, die über Partikel Tracking ermittelt wurden, mit direkten Altersberechnungen nach GOODE (1996) und ^{14}C -Altersdatierungen. IZBICKI ET AL. (2004) vergleichen ^3H und ^{14}C Altersdatierungen mit Partikellaufzeiten sowie die Verteilung der Deuterium-Werte im Aquifer mit Partikel-Wegstrecken.

Ansätze, die das hier beschriebene Konzept der Altersverteilung (Kap. 6.1) aufgreifen, finden sich wenige. MODICA ET AL. (1997) wenden Partikelsimulationen nach der Methode von POLLOCK (1989) an, um die Interaktion Fluss-Grundwasser zu betrachten. Hierbei werden drei Altersklassen ausgewiesen (< 20 Jahre, 20 bis 200 Jahre, > 200 Jahre). Die in durch MODICA ET AL. (1997) präsentierten Altersverteilungen werden nicht über weitere Methoden verifiziert. REILLY ET AL. (1994) kombinieren und vergleichen die Methoden des Partikel Trackings und der Altersdatierung mittels FCKW. Räumliche Altersverteilungen werden ausgewiesen und mit FCKW Datierungen an unterschiedlichen Punkten im Aquifer verglichen. REILLY ET AL. (1994) kommen zu dem eindeutigen Schluss, dass die Kombination beider Methoden als sehr hilfreich angesehen werden kann. HINKLE und SNYDER (1997) nutzen ebenfalls diese beiden Methoden nebeneinander. Durch die Kombination natürlicher Tracer (FCKW) und Partikel Trackings mit hohen Partikelanzahlen (500 Partikel pro Brunnenzelle) kann die An- oder Abwesenheit von jungen Wässern simuliert und verifiziert werden. Der im Zitat durch WALTER (s.o.) dargestellte Sachverhalt wird in der Studie von HINKLE und SNYDER (1997) berücksichtigt. Errechnete FCKW-Alter werden nicht mit T_m gleichgesetzt, sondern als „FCKW-Alter“ interpretiert. Im Sinne der hydrologischen Dynamik werden durch HINKLE und SNYDER (1997) lediglich junge, anthropogen beeinflusste Komponenten von älteren Komponenten abgetrennt. Dies geschieht allerdings zu 76 % erfolgreich (HINKLE und SNYDER, 1997, S. 24).

Die Kombination der Analyse natürlicher Tracer und Partikel Trackings haben sich sowohl bei REILLY ET AL. (1994) als auch bei HINKLE und SNYDER (1997) als geeignet gezeigt. Sie ermöglichen, Teilaspekte der hydrologischen Dynamik abzubilden. REILLY ET AL. (1994) betonen, dass sowohl die Methode des Partikel Trackings als auch die Methode der Analyse natürlicher Tracer nur Auskunft zu Teilaspekten liefern kann. Die Methodenkombination ermöglicht es ihnen, erweiterte und belastbarere Aussagen zu treffen, die Probenahme der natürlichen Tracer zu verbessern und Bereiche aufzuzeigen, an denen das konzeptionelle Verständnis des betrachteten Grundwassersystems zu verfeinern ist.

6.4 Fazit

Die *hydrologische Dynamik* ist ein zusammenfassender Begriff, der in diesem Kapitel definiert und abgegrenzt wurde. Sie ist Produkt des Systemaufbaus und der räumlichen wie auch zeit-

lichen Variation des Systeminputs. An Wasserfassungen resultiert die hydrologische Dynamik vor allem in einem sich ändernden Wasserdargebot (Standrohrspiegelschwankungen) sowie einer charakteristischen Zusammensetzung des geförderten Wassers hinsichtlich Chemismus und Altersstruktur.

Es kann gezeigt werden, dass die Altersstruktur des Wassers in der Literatur nicht nur über ein mittleres Alter, sondern auch über *Altersverteilungen* beschrieben wird. Altersverteilungen können als Resultat der hydrologischen Dynamik angesehen werden. Ändert sich die hydrologische Dynamik, so resultiert dies stets in einer veränderten Altersverteilung. Altersverteilungen können somit integrierende Aussagen über ein hydrologisches System liefern.

Unterschiedliche Methoden stehen zur Verfügung, um die hydrologische Dynamik mittels Altersverteilungen abzubilden. Die gleichzeitige Interpretation verschiedener natürlicher Tracer sowie Partikelsimulationen innerhalb von Grundwassermodellierungen stellen zwei mögliche Methoden dar. Die Kombination von Tracerinformationen und Partikelbetrachtungen sind in der Literatur bereits dokumentiert und werden als geeignet angesehen; die Aspekte der hydrologischen Dynamik werden allerdings nur teilweise durch bereits vorhandene Studien untersucht. Die Methode, die innerhalb des ERGO-Projektes entwickelt wird (siehe Kap. 8), greift das Konzept der hydrologischen Dynamik auf und nutzt das Potential dieser integrierten Betrachtungsmethode.

7 Risikoabschätzung von Trinkwasserversorgungen

Das Risiko einer Trinkwasserversorgung oder allgemein eines zur Trinkwasserversorgung nutzbaren Aquifers wird in unterschiedlicher Herangehensweise und Methodik behandelt. Das Risiko einer Wasserversorgung ist als Wahrscheinlichkeit zu definieren, mit der es in einer Trinkwasserfassung zu einer Kontamination kommt. Als kontaminiert ist hierbei gefördertes Wasser zu bezeichnen, welches keine oder nur noch eingeschränkte Trinkwasserqualität besitzt. Eine Kontamination erfordert im schlimmsten Fall eine Sanierung oder Stilllegung der Wasserfassung, in jedem Fall jedoch gesonderte Aufbereitungsprozesse, denen das geförderte Wasser unterzogen werden muss. Eine Kontamination entspricht somit im Falle einer Wasserversorgung immer auch einem monetären Risiko.

Die Ausweisung eines solchen Risikos, welches auf hydrologischen und hydrogeologischen Grundlagen basiert, ist in vielerlei Hinsicht sinnvoll. Es können beispielsweise Handlungsanweisungen erarbeitet werden, die eine Minimierung des bestehenden Risikos zum Ziel haben. Praktische Beispiele hierfür können abgeänderte Fördermengen und Förderzeiträume, bauliche Veränderungen am Brunnen, Nutzungseinschränkungen in Teilbereichen des Einzugsgebiets der Wasserfassung oder auch eingeleitete Sanierungsmaßnahmen sein.

Allgemein steht das Verschmutzungsrisiko durch anthropogene Nutzung oder damit verbundenen Eintrag von Stoffen in das zu fördernde Trinkwasser im Vordergrund. In Deutschland und der Schweiz wird eine Risikominimierung über das Konzept der Trinkwasserschutzgebieten (D) bzw. Grundwasserschutzzonen (CH) (siehe Kap. 7.2) wahrgenommen. Weitergehende Abschätzungen eines Risikos oder der Schadenanfälligkeit werden durch FOCAZIO ET AL. (2002) dargestellt.

7.1 Möglichkeiten und Methoden

Die *immanente Anfälligkeit* (eng.: *intrinsic susceptibility*) eines Grundwassersystems basiert auf den Eigenschaften des Aquifers (hydraulische Leitfähigkeit, Porosität, hydraulischer Gradient) und den jeweiligen Quellen der in ihm enthaltenen Wässer und Belastungen des Gesamtsystems (Direkte Neubildung, Grundwasser-Oberflächenwasser-Interaktion, Bodenpassage, Entnahmen) (FOCAZIO ET AL., 2002). Die Abschätzung der immanenten Anfälligkeit eines Grundwassersystems berücksichtigt nicht die natürlichen und anthropogenen Quellen von Verunreinigung, sondern reduziert die Betrachtung auf die physikalischen Eigenschaften des Aquifers. Die *Schadenanfälligkeit* (eng.: *vulnerability*) der Grundwasserressource muss neben der Betrachtung der immanenten Anfälligkeit auch Orte und Arten von natürlichen oder anthropogenen Verunreinigungen, relative Lage der Brunnen der Trinkwasserversorgung sowie Zustand und

Mobilität der Schadstoffe berücksichtigen (FOCAZIO ET AL., 2002).

HINKLE und SNYDER (1997) fassen zusammen, dass die Gefährdung eines Grundwasserkörpers demnach als Funktion des Umfangs der Schadstoffbelastung, der Empfindlichkeit des Aquifers gegenüber der spezifischen Schadstoffbelastung und der Transport-, Ab- und Umbaubedingungen des Schadstoffes angesehen werden kann. Der Umfang der Schadstoffbelastung wird beispielsweise anhand einer Charakterisierung nach Punktquellen und diffusen Eintragspfaden vorgenommen.

Will man die Methoden zur Abschätzung der Gefährdung eines Aquifers und im weiteren Sinne auch der Trinkwasserfassungen an sich voneinander abgrenzen, so unterscheiden FOCAZIO ET AL. (2002) subjektive Beurteilungsmethoden (Kap. 7.1.1), statistische (Kap. 7.1.2) sowie prozessbasierte Methoden (Kap. 7.1.3); Kombinationen werden als Hybridmethoden ausgewiesen (Kap. 7.1.4).

7.1.1 Indexmethode

Die Indexmethode weist unterschiedlichen Merkmalen jeweils einen subjektiven Wert zu. Aus der Kombination der Einzelwerte wird ein Index ermittelt, der je nach Ausprägung eine Abschätzung der Schadenanfälligkeit eines Grundwasserleiters geben soll. Eine weltweit häufig angewandte Indexmethode stellt die von ALLER ET AL. (1987) beschriebene DRASTIC Methode dar. Tabelle 7.1 listet die sieben Faktoren auf, die im DRASTIC Index integriert betrachtet werden.

FOCAZIO ET AL. (2002) und NATIONAL RESEARCH COUNCIL (1993) bewerten die Indexme-

Tabelle 7.1: DRASTIC Faktoren (nach: ALLER ET AL., 1987).

D	depth of water	Grundwasserflurabstand
R	net recharge	Netto Grundwasserneubildung
A	aquifer media	Aquifermaterial (Kluft- / Porengrundwasserleiter)
S	soil media	Bodenart
T	topograph	Topografie des Einzugsgebiets
I	impact of vadoze zone media	Beschaffenheit der ungesättigten Zone
C	conductivity of the aquifer	Hydraulische Leitfähigkeit des Aquifers

thode als eine kostengünstige und schnelle Methode, um Schadenanfälligkeitsabschätzungen durchzuführen. Aufgrund ihrer Einfachheit und Eindeutigkeit können Resultate der Indexmethode direkt in Entscheidungsprozesse eingebunden werden. Es wird jedoch darauf hingewiesen, dass Indexmethoden aufgrund der hohen subjektiven Komponente wissenschaftlich schwer begründbar sein können (FOCAZIO ET AL., 2002, S. 12).

7.1.2 Statistische Methoden

Die statistischen und prozessbasierten Methoden (Kap. 7.1.3) verfolgen einen wissenschaftlich begründbaren Ansatz. Sie bringen keine subjektiv abgegrenzten Kategorien hervor, sondern

liefern Ergebnisse, die der Interpretation durch die an Entscheidungsprozessen beteiligten Personen bedürfen. Hierbei wird eine Unterstützung durch Wissenschaftler erforderlich (FOCAZIO ET AL., 2002, S. 12f.).

Statistische Methoden umfassen einfache deskriptive Statistiken und reichen bis hin zur multivariaten Datenanalyse. FOCAZIO ET AL. (2002) stellen Studien zusammen, die sich u.a. der multiplen Regression sowie der logistischen Regression bedienen.

7.1.3 Prozessbasierte Methoden

Prozessbasierte Methoden umfassen alle Ansätze, welche einen oder mehrere physikalische Prozesse der Wasserbewegung und die daran gekoppelten Prozesse des Schadstoffzustandes sowie der Schadstoffmobilität berücksichtigen oder simulieren. Sie können auch direkte Feldmessungen von natürlichen Tracern im Kontext eines Grundwassersystems umfassen (FOCAZIO ET AL., 2002, S. 16). Aufgrund ihrer Definition bedienen sich prozessbasierte Methoden der Risikoabschätzung vollkommen deterministischer Grundgleichungen und physikalisch basierter Techniken, um zu Grunde liegende Prozesse zu beschreiben. Es wird nicht über ein Punktesystem (vgl. Kap. 7.1.1) auf Schadenanfälligkeits-Kategorien rückgeschlossen; vielmehr wird die immanente Anfälligkeit oder die Schadenanfälligkeit über physikalisch basierte Wertebereiche von Modellparametern oder Ergebnisswerten abgegrenzt (FOCAZIO ET AL., 2002, S. 16). FOCAZIO ET AL. (2002) führen Beispielstudien an, die sich prozessbasierter Methoden bedienen. Neben dem Einsatz von Grundwassermodellen wird auf die Funktionalität der natürlichen Tracer hingewiesen. Die Anwendung von prozesssimulierenden Modellen, die Quellen, Mobilität und Transport der Schadstoffe sowie die Wasserbewegung im Untergrund zusammenfassend betrachten, ist generell nicht weit verbreitet. Diese zusammenfassende Betrachtung wird allerdings als offensichtlich geeignet angesehen, um alle hydrologisch wichtigen Prozesse integrativ betrachten zu können.

7.1.4 Hybridmethoden

Unter Hybridmethoden werden Kombinationen aus Indexmethoden und statistischen bzw. prozessbasierten Methoden verstanden. Es werden ähnlich der Indexmethode Kategorien oder Abstufungen ausgewiesen; diese müssen jedoch gegen statistische oder prozessbasierte Ergebnisse abgeglichen werden. NOLAN ET AL. (1997) bemühen statistische Methoden, um mit Hilfe nichtparametrischer Testverfahren Klassifikationen für potentielle Nitratkonzentrationen auszuweisen. MORGAN (1999) kombinieren kartenbasierte Bewertungen mit Ergebnissen des prozess-basierten Schadstoffmobilitäts-Modells (PRZM) der United States Environmental Protection Agency (U.S. EPA), um Auswaschungstendenzen für spezifische Pestizide auszuweisen.

KIRSCH und HINSBY (2006) fassen modifizierte Indexmethoden zusammen, die sich auf geophysikalische Bemessungen stützen. Die Mächtigkeit und Beschaffenheit der ungesättigten Zone sowie Schichten, die den Aquifer vor direkter anthropogener Kontamination schützen, werden hierbei über geophysikalische Messungen quantifiziert und in einem Schadenanfälligkeitsindex umgesetzt.

7.1.5 Wahl und Beurteilung wissenschaftlich haltbarer Methoden

Die Wahl der Methode zur Beurteilung der Schadenanfälligkeit sollte auf mehreren Kriterien beruhen. Kosten und wissenschaftliche Begründbarkeit der Aussagen müssen gegeneinander abgewogen werden. Abb. 7.1 stellt diese Zusammenhänge dar. Allgemein wird somit ein Optimum aus der Komplexität der gewählten Methode und der wissenschaftlich haltbaren Aussage gesucht, bei dem der Kostenaufwand nicht außer Acht gelassen wird. Werden statistische oder



Abbildung 7.1: Beurteilung des objektiven, wissenschaftlichen Ansatzes zur Abschätzung der Schadenanfälligkeit der Grundwasserressource (verändert nach: FOCAZIO ET AL., 2002).

prozessbasierte Methoden zur Beurteilung einer Fragestellung herangezogen, so erfordert dies auch eine Betrachtung der Güte der getroffenen Aussage. Die statistischen Methoden bieten die Möglichkeit, Vertrauensintervalle und Parameter zur Stärke der beschriebenen Zusammenhänge auszuweisen.

Prozessbasierte Methoden verlangen explizit nach einer Unsicherheitsanalyse, um wissenschaftlich haltbare Aussagen zu treffen (FOCAZIO ET AL., 2002, S. 20). Nur wenige publizierte Studien berücksichtigen Unsicherheiten aus Modell oder Daten (NATIONAL RESEARCH COUNCIL, 1993, S. 7). Unsicherheiten in Schadenanfälligkeitsbetrachtungen von Grundwasser sind unvermeidbar und setzen sich aus mehreren Fehlerquellen zusammen. Genannt werden Fehlerquellen in der Datenbeschaffung, der räumlichen und zeitlichen Heterogenität, der Digitalisierung, Verarbeitung und Speicherung von Daten, der Modellierung und der Konzeptionalisierung (NATIONAL RESEARCH COUNCIL, 1993, S. 7).

Gesondert muss auch auf die Unsicherheit hingewiesen werden, die aus der fehlerhaften Probenahme bzw. Verwendung von Wasserqualitätsdaten basiert (FOCAZIO ET AL., 2002, S. 20). Werden Proben aus Wasserfassungen entnommen, so können Wasserqualitätsparameter und Proben natürlicher Tracer nur dann haltbare, interpretierbare Informationen liefern, wenn Grundregeln der Probenahme beachtet werden. Sowohl die Brunnengeometrie als auch die Probenahme selbst, müssen zur Interpretation von hydrochemischen Daten in Betracht gezogen werden (APPELO und POSTMA, 2005, S. 10). Brunnenausbaupläne und bohrlochgeophysikalische Voruntersuchungen müssen gesichtet werden. Um differenzierte Aussagen über den Aquifer treffen zu können, ist eine tiefenabhängige Probenahme notwendig (APPELO und POSTMA, 2005, S.

11). Wasserproben sollten im laufenden Pumpbetrieb und erst nach genügend langer Vorlaufzeit der Pumpen entnommen werden. Die Probenahme sollte erst erfolgen, wenn sich Messwerte von z.B. Temperatur, pH-Wert und elektrischer Leitfähigkeit stabilisiert haben. APPELO und POSTMA (2005) geben an, dass zumindest das Mehrfache des Brunnenvolumens zu pumpen ist, bevor die Proben entnommen werden. Wird eine Mischprobe entnommen, so muss bei der Interpretation stets berücksichtigt werden, dass die Probe nicht die geochemischen Zustände des Aquifers widerspiegelt, sondern immer ein Produkt aus der Geochemie des Aquifers, Pumprate und Brunnengeometrie ist.

Unsicherheiten in Risikobetrachtungen können nur dann reduziert werden, wenn (a) Risiken bekannt und eingegrenzt werden können und (b) eine Kombination aus verschiedenen Methoden und wissenschaftlichen Ansätzen genutzt wird, um Aussagen zu verifizieren und validieren. Weiterführende, ausführliche Ansätze zur Beurteilung der Unsicherheit im Kontext der Beurteilung der Schadenanfälligkeit von Grundwasser werden in NATIONAL RESEARCH COUNCIL (1993) gegeben.

7.2 Schutzzonenkonzept

Das Schutzzonenkonzept hat sich als Konzept des Grundwasserschutzes durchgesetzt. Dieser vorsorgende Grundwasserschutz hat zum Ziel, das Grundwasser vor Verunreinigungen und sonstigen Beeinträchtigungen flächenhaft zu schützen (DVGW, 2006, S. 5). Grundwasserschutzzonen gelten somit als das wichtigste Instrument des nutzungsorientierten, planerischen Grundwasserschutzes (BUWAL, 2004, S. 39). Im Schutzzonenkonzept wird keine direkte Risikoabschätzung für die jeweiligen Trinkwasserfassungen vorgenommen. Aspekte der Risikoabschätzung fließen jedoch in die Dimensionierung von Schutzzonen mit ein. Neben der genauen Definition treffen die gesetzlichen Regelwerke zwar Aussagen über Kriterien, die letztlich zur Ausweisung von Schutzzonen führen, sie lassen aber Spielraum in der Wahl der verwendeten Methoden. Methoden zur Risikoabschätzung für Grundwasserressourcen bzw. Trinkwasserfassungen sollten bestenfalls wissenschaftlich haltbare Ergebnisse liefern, die im Kontext des gesetzlich festgelegten Konzepts der Schutzzonen verwendbar sind. Neben den rechtlichen Grundlagen soll deshalb kurz auf die Definition eingegangen und das Vorgehen zur Ausweisung von Schutzzonen ausgeführt werden.

7.2.1 Rechtliche Grundlagen

Rechtliche Grundlagen zur Ausweisung von Wasserschutzgebieten bzw. Schutzzonen im Zustrombereich (Z_U) einer Wasserfassung bilden in der Schweiz das Gewässerschutzgesetz (GSchG, SR 814.20) vom 24. Januar 1991 sowie die Gewässerschutzverordnung vom 28. Oktober 1998 (GSchV, SR 814.201). In Deutschland gilt als Rahmengesetz das Wasserhaushaltsgesetz (WHG) vom 21. August 2002 (BGBl. I S. 3245) § 19 „Wasserschutzgebiete“. In Baden-Württemberg gilt § 24 des Wassergesetzes von Baden-Württemberg (WG) in der Fassung vom 20. Januar 2005 (GBl. S. 219, Berichtigung GBl. S. 404) sowie die Verwaltungsvorschrift des Umweltministeriums über die Festsetzung von Wasserschutzgebieten (VwV-WSG) vom 14. November 1994 (GABl. S. 881). Zur Abgrenzung von Wasserschutzgebieten wird in VwV-WSG (1994, Kap. 2.2)

auf die „Hydrogeologischen Kriterien für die Abgrenzung von Wasserschutzgebieten in Baden-Württemberg“ (GLA, 1991) sowie ergänzend auf die Richtlinien der Deutschen Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e. V. (DVGW) verwiesen. In der Schweiz dient die „Praxishilfe zur Bemessung des Zuströmbereiches Z_U “ des Bundesamtes für Umwelt, Wald und Landschaft als Vollzugshilfe (BUWAL, 2005).

7.2.2 Gliederung eines Trinkwasserschutzgebietes

Wie schon die Grundlagen der Hydrogeologie, so beschränken sich auch die folgenden Ausführungen aufgrund der ERGO-Projektregion auf Porengrundwasserleiter. Für Kluftaquifere, insbesondere Karstaquifere, gelten weitergehende Ausführungen, die in den aufgeführten Regelwerken enthalten sind.

DVGW (2006) für Deutschland und BUWAL (2004) für die Schweiz führen den Aufbau und insbesondere die Gliederung eines Trinkwasserschutzgebietes näher aus. Man unterscheidet „Fassungsbereich“, „Engere Schutzzone“ und „Weitere Schutzzone“. Tab. 7.2 stellt im Ländervergleich die Gliederung bzw. Hinweise zur Dimensionierung von Schutzzonen im Überblick dar.

Ergänzend zu den in Tab. 7.2 gemachten Angaben sehen deutsche Regelwerke zudem eine Unterteilung in Schutzzone III A und III B vor, die je nach Standortbedingungen erfolgen kann und Nutzungseinschränkungen entsprechend abstufen lässt (DVGW, 2006). Ergänzend zum Schutzzonenkonzept existieren in der Schweiz der Gewässerschutzbereich A_U und der Zuströmbereich Z_U . Der Z_U dient entweder dem „präventiven“ oder dem „kurativen“ Grundwasserschutz und ist dann festzulegen, wenn eine Verunreinigung vorliegt oder eine konkrete Gefährdung existiert (BUWAL, 2004, S. 35). Der A_U umfasst das nutzbare Grundwasser sowie die zu ihrem Schutz notwendigen Randgebiete (BUWAL, 2004, S. 34). A_U und Z_U werden ergänzend zu den drei Schutzzonen ausgewiesen. Z_U soll etwa das Einzugsgebiet einer Grundwasserfassung abdecken, aus welchem 90 % des geförderten Wassers stammen. Inhaltlich kommt der Z_U somit der deutschen Zone III recht nah.

7.2.3 Schutzzonenausweisung

Grundlage für die Ausweisung von Schutzzonen stellt jeweils ein hydrogeologisches Gutachten der zuständigen Behörde dar. Um den Teil des Grundwasserleiters abzugrenzen, aus dem eine Fassung gespeist wird, müssen mehrere Methoden abgewogen werden. Die Wahl der Methode sollte je nach Beschaffenheit des Grundwasserleiters erfolgen, und die Kombination mehrerer Methoden führt grundsätzlich zur potentiell genauesten Bestimmung (BUWAL, 2005, S. 23f). In Deutschland soll nach DVGW (2006) die Bemessung der Schutzzonen auf der fachlichen Grundlage einer konzeptionellen Beschreibung der hydrogeologischen, geohydraulischen und hydrochemischen Verhältnisse (Hydrogeologisches Modell) erfolgen. Eine Aufzählung möglicher Unterlagen und Ergebnisse von Untersuchungen, die hierbei herangezogen werden können, wird gegeben (DVGW, 2006, S. 7):

- Unterlagen zur Wassergewinnungsanlage und zum Messstellennetz (u.a. Lage- und Ausbauparameter, Betriebsdaten),

Tabelle 7.2: Schutzzonen: Gliederung und Dimensionierung in der Schweiz (CH) und Deutschland (D) zusammengestellt nach BUWAL (2004) und DVGW (2006).

Bezeichnung	Dimensionierung	weitere Hinweise
Fassungsbereich	Zone S1 (CH)	-
	Zone I (D)	-
Engere Schutzzone	Zone S2 (CH)	mind. 10 Tage Fließzeit; mind. 100 m von S1 zum Rand von S2 - maximal über längere Zeit genehmigte Entnahmemenge und niedriger Wasserstand sind anzunehmen
	Zone II (D)	50 Tage Fließzeit; 100 m zur Fassung sollte nicht unterschritten werden - 50-Tage-Linie unter Annahme der maximal genehmigten Tagesentnahme - Berücksichtigung der Dispersion nicht erforderlich - zeitliche und räumliche Variation der Zuflussrichtung ist zu beachten
Weitere Schutzzone	Zone S3 (CH)	Abstand Rand S2 zu Rand S3 etwa so groß wie Abstand Rand S1 zu Rand S2 -
	Zone III (D)	in der Regel bis zur Grenze des unterirdischen Einzugsgebietes der Wasserfassung - wasserrechtlich genehmigte Jahresentnahme und mittlere hydrologische Verhältnisse sind der Dimensionierung zu Grunde zu legen

- Geologische Untersuchungen (z.B. Kartierung, Bohrungen, Aufschlussdaten, Geophysik),
- Geohydraulische Untersuchungen (z.B. Grundwassergleichenpläne, Pumpversuche),
- Markierungsversuche und isotopenhydrologische Untersuchungen,
- Physikalische, hydrochemische und mikrobiologische Untersuchungen des Rohwassers und des zuströmenden Grundwassers,
- Bodenkundliche Karten und Untersuchungen,
- Wasserhaushaltsbilanz, insbesondere Daten zur Grundwasserneubildung.

Die Ausführungen des BUWAL (2004) und BUWAL (2005) decken sich in vielen Punkten mit denen des DVGW.

Die Schutzbedürftigkeit des gesamten Einzugsgebietes bildet den Ausgangspunkt, es gilt jedoch der Verhältnismäßigkeitsgrundsatz (GLA, 1991). Dieser Verhältnismäßigkeitsgrundsatz wird auch in der Schweiz im Rahmen der Ausweisung des Z_U angewandt (BUWAL, 2005).

Die Grenzen des Schutzzonenkonzeptes in Bezug auf den Verhältnismäßigkeitsgrundsatz werden durch GLA (1991) aufgezeigt. Probleme treten auf, wenn es sich z.B. (a) um Einzugsgebiete großer Ausdehnung handelt, (b) größere Mengen durch infiltrierende Verhältnisse von Gewässern eingetragen werden oder (c) es entnahmebedingt über untere Aquiferstockwerke zur Einspeisung kommt.

7.2.4 Schutzzonenausweisung mittels Grundwassermodellen

Neben den bisher genannten Aspekten kann auch eine Modellierung (siehe Kap. 5) zur Abgrenzung der Schutzzonen bzw. des Z_U herangezogen werden. Die schweizer Vollzugshilfe benennt die Ermittlung von Stromlinien mittels Grundwassermodellen und schlägt somit die Abgrenzung des Entnahmebereiches mittels Partikel Tracking (Kap. 5.3.2) vor (BUWAL, 2005, S. 24); auch im Regelwerk des DVGW wird eine zusätzliche Betrachtung durch eine numerische Modellierung (Kap. 5.1) als sinnvoll angesehen (DVGW, 2006, S. 7). Numerische Modellierungen werden unterstützend zu den bisher genannten Informationen zur Festsetzung der Schutzzonen als Methode zwar benannt und als sinnvoll erachtet (BUWAL, 2005; DVGW, 2006), eine routinemäßige Grundwassermodellierung im Zuge des Verfahrens der Schutzzonenausweisung ist jedoch weder in der Schweiz noch in Deutschland vorgesehen.

BUWAL (2005) weist darauf hin, dass mittels Partikel Tracking oder durch analytische Lösungen ermittelte Zustrombereiche im Allgemeinen vergrößert werden müssen, da diese nur den rein advektiven Transport berücksichtigen. Das frühere GEOLOGISCHE LANDESAMT BADEN-WÜRTTEMBERG (GLA), heute LANDESAMT FÜR GEOLOGIE UND ROHSTOFFE BADEN-WÜRTTEMBERG (LGRB), stellt jedoch fest, dass Betrachtungen, die Dispersion vernachlässigen, in der Vergangenheit bewährte Ergebnisse geliefert haben (GLA, 1991, S. 12). Partikel Trackings zur

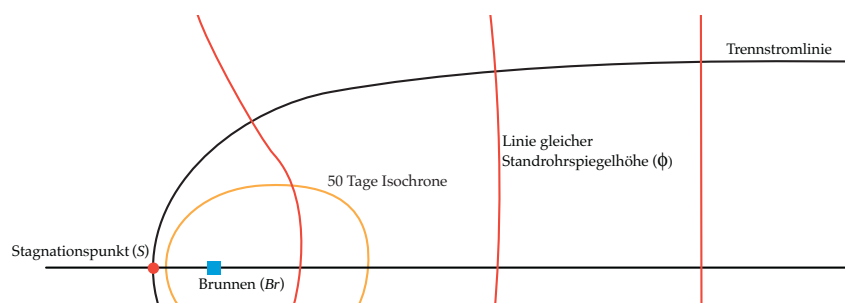


Abbildung 7.2: Zustrombereich eines Brunnens (verändert nach: DVGW, 2006).

Schutzzonenausweisung werden sowohl innerhalb von numerischen Modellen (KINZELBACH ET AL., 1992) als auch innerhalb von AEM-Modellen (BAKKER und STRACK, 1996) angewandt. Die AEM wurde im Zuge der schnellen Schutzzonenausweisung in den USA gefördert. Die United States Environmental Protection Agency (US EPA) stellt mit WhAEM2000 eine AEM Software bereit, die explizit auf Ausweisung von Schutzzonen abgestimmt wurde und innerhalb der Schutzprogramme der Bundesstaaten für Trinkwasserfassungen (*State's Wellhead Protection Programs* (WHPP)) eingesetzt wird (US EPA, 2007).

Eine erweiterte Methode zur Abgrenzung von Schutzzonen durch Modelle stellt die inverse stochastische Modellierung dar. VASSOLO ET AL. (1998) berücksichtigen mittels Partikel Trackings und Monte-Carlo-Simulationen unterschiedlichste Variationen der Transmissivität. Dies ermöglicht, neben der einfachen Ausweisung der Schutzzonen, die Zugehörigkeit eines Punktes zur Schutzzone zusätzlich mit einer Wahrscheinlichkeitsaussage zu belegen.

7.3 Hydrologische Dynamik

Die in Kap. 6 eingeführte hydrologische Dynamik ist im Kontext der Risikoabschätzung direkt von Bedeutung. Aspekte der hydrologischen Dynamik dienen direkt zur Quantifizierung des Kontaminationsrisikos an einer Wasserfassung. Betrachtet man die ausgebildete Altersstruktur an einer Wasserfassung als Produkt der hydrologischen Dynamik, so steigt die Schadenanfälligkeit mit Zunahme der jungen Komponenten. Versucht man die Nutzung von Informationen zur hydrologischen Dynamik als Methode der Risikoabschätzung in die durch FOCAZIO ET AL. (2002) eingeführte Klassifizierung einzuordnen, so kann sie eindeutig als prozessbasierte Methode angesehen werden. Kombiniert man Informationen der hydrologischen Dynamik mit einem Klassifizierungssystem, kann die Methode als Hybridmethode angesehen werden.

Vor allem natürliche Tracer werden im Kontext prozessbasierter Methoden (siehe Kap. 7.1.3)

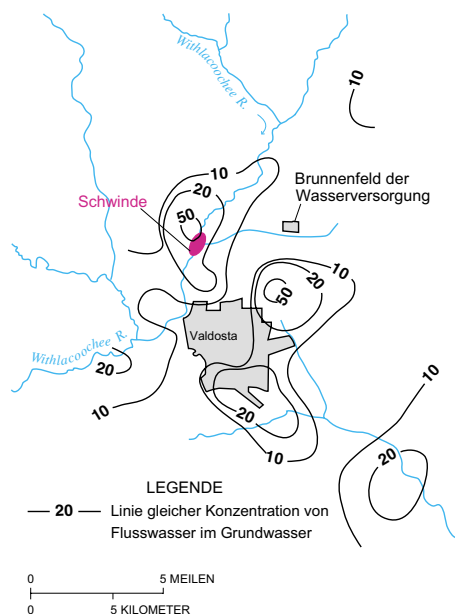


Abbildung 7.3: Isolinen des Anteils der Flusswasserkomponente am Grundwasser (verändert nach: PLUMMER ET AL., 1998 und FOCAZIO ET AL., 2002).

vielseitig angewandt. Entweder dienen sie als Hilfsmittel in der Kalibrierung von Grundwassermodellen, oder sie werden direkt eingesetzt, um Herkunft und Alter der Grundwässer zu bestimmen und daraus Rückschlüsse auf die Schadenanfälligkeit zu ziehen (FOCAZIO ET AL., 2002, S. 16). Informationen verschiedener natürlicher Tracer als Methode zur Beschreibung von Aspekten der hydrologischen Dynamik werden durch HINSBY (2006) somit direkt zur Risikoabschätzung genutzt. HINSBY (2006) grenzt anhand von Informationen natürlicher Tracer drei Gefahrenklassen für potentielle Grundwasserkontamination ab (siehe Tab. 7.3). MANNING ET AL. (2005) differenzieren mittels $^3\text{H}/^3\text{He}$ -Datierung zwischen alten Wässern, Mischwässern und jungen Wässern. Es gelingt in der Studie, eine Korrelation zwischen dem Vorkommen allgemeiner anthropogener Spurenstoffe sowie speziell Nitrat und den ausgewiesenen Klassen nachzuweisen. PLUMMER ET AL. (1998) nutzen ebenfalls natürliche Tracer und weisen dadurch Anteilsbereiche von Flussinfiltrations-Komponenten im Grundwasser aus (Abb. 7.3). Flusswasserkomponenten weisen ein höheres Risiko von anthropogener Kontamination auf, und der An-

Tabelle 7.3: Grundwasser-Schadenanfälligkeitsklassen, definiert durch den Gehalt an natürlichen Tracern in Beobachtungsbrunnen. Annahme von kurzen Filterstrecken und / oder keiner signifikanten Mischung von Wassertypen (verändert nach: HINSBY, 2006).

Schadenanfälligkeit:	hoch	mittel	niedrig
Kalenderjahr der Grundwasserneubildung	1970 - heute	1950 – 1970	< 1950
Wasseralter (Jahre)	0 – 35	35 – 55	> 55
^3H (TU) ¹	5 – 25	< ~1 oder > 25	< 0,5
^{39}Ar (pma) ²	> 90	70 – 90	< 70
^{14}C (pmc) ³	> 50	40 – 60	< 50

¹TU - Tritium Units; ²pma - percent modern argon; ³pmc - percent modern carbon

teil der Flusswasserkomponente ist ein direktes Resultat der hydrologischen Dynamik eines Systems. Die Informationen, die aus den Tracerdaten zur hydrologischen Dynamik erhalten werden, können auch hier direkt in eine Risikoabschätzung übersetzt werden. HINKLE und SNYDER (1997) differenzieren (siehe auch: Kap. 6.3) mittels FCKW-Analysen zwischen anthropogen beeinflusstem (jung) und älterem Wasser. Die Ergebnisse werden zudem durch Partikel Trackings verifiziert (siehe auch Kap. 5.3.2). Die Methode des Partikel Trackings wird von SNYDER ET AL. (1998) als geeignet angesehen, die Schadenanfälligkeit an jedem Punkt des Aquifers ausweisen zu können. Zwei Methoden, die der Abbildung der hydrologischen Dynamik dienen, führen unabhängig von einander zu weitestgehend übereinstimmenden Ergebnissen. Die durch HINKLE und SNYDER (1997) vorgenommene Methodenkombination führt dadurch zu wissenschaftlich haltbaren Resultaten. Die Methodenkombination des Partikel Tracking und der Interpretation natürlicher Tracer (hier ^3H) wird auch durch BROERS (2004) genutzt, um junges und altes Wasser abzutrennen. Schadenanfälligkeitsbewertungen in räumlicher Ausdehnung des Aquifers werden durch BROERS (2004) über die Quantifizierung des prozentualen Anteils junger Komponenten (< 40 Jahre) gemacht.

7.4 Fazit

Zur Risikoabschätzung von Grundwasserleitern und Wasserversorgungen im Speziellen stehen unterschiedliche Methoden und Konzepte bereit, die in diesem Kapitel vorgestellt wurden. Es wurde das Klassifikationssystem nach FOCAZIO ET AL. (2002) übernommen, um die unterschiedlichen Methoden einzuordnen. Speziell um an Wasserfassungen dem Risiko von Kontaminationen vorzubeugen, hat sich das Schutzzonenkonzept bewährt und etabliert. Es darf bei Risikoabschätzungen für Wasserversorgungen nicht unberücksichtigt bleiben. Die im ERGO-Projekt entwickelten und angewandten Methoden werden später direkt mit den Konzepten der Schutzzonen abgeglichen.

Inwieweit Aspekte der hydrologischen Dynamik zur Risikoabschätzung eingesetzt werden können und bereits werden, wurde im letzten Abschnitt dieses Kapitels diskutiert. Bisher dokumentierte Anwendungen, die dieses Konzept der Risikoabschätzung anwenden, konnten zusammengestellt werden.

8 Methode, Vorgehensweise und Implementierung

Verschiedene Methoden zur Risikoabschätzung stehen bereits zur Verfügung. Die hydrologische Dynamik wird in dieser Arbeit herangezogen, um eine effektive Risikoabschätzung zu gewährleisten. Das angewandte Verfahren ist in die prozessbasierten Methoden einzuordnen. Es verfolgt einen wissenschaftlich begründbaren Ansatz und gliedert sich in das methodische Konzept des Projektes ERGO ein, welches zunächst dargelegt wird.

8.1 Methode des Projektes ERGO

Innerhalb des Projektes ERGO wurde eine Methode entwickelt, die es erlaubt, für den gesamten Oberrhein abzuschätzen, ob und inwieweit Trinkwasserversorgungen durch vorhandene Altlasten und katalogisierte Verdachtsflächen gefährdet werden. Im Hinblick auf Altlasten und die Zahl der in ERGO zusammengestellten Verdachtsflächen existierte jedoch bisher keine prozessbasierte, wissenschaftlich fundierte Methode, die eine effiziente und kostensparende Betrachtung ermöglichen würde und zudem Informationen über die Gefährdung durch nicht erfasste Flächen berücksichtigen kann (IHF, unveröffentlicht; WILLSCHEID, 2007). Vor diesem Hintergrund wurde die Methode des ERGO Projektes konzipiert.

8.1.1 Doppelstrategie des ERGO-Ansatzes

Die ERGO-Methode verfolgt zwei Wege der Risikoabschätzung (IHF, unveröffentlicht):

verdachtsflächenorientiert: Verdachtsflächen werden aus historischen Untersuchungen und amtlichen Registern abgeleitet. Verschneidet man diese bekannten Verdachtsflächen innerhalb eines geographischen Informationssystems (GIS) mit Wasserschutzgebieten, so können Flächen, die für die Wasserversorgung relevant sind, ausgewiesen werden. Anschließende Sickerwasser- und Transportprognosen ermöglichen es daraufhin, eine erste realistische Einschätzung der potentiellen Gefährdung durch die Verdachtsflächen vorzunehmen. Aufgrund der Ergebnisse können dann orientierende Untersuchungen oder andere Maßnahmen abgewogen und eingeleitet werden.

versorgerorientiert: Im versorgerorientierten Ansatz wird neben der potentiellen Gefährdung durch bekannte Verdachtsflächen eine allgemeine Risikoabschätzung, ausgehend von der Wasserfassung, vorgenommen. Die sich in der Altersstruktur des geförderten Wassers ausdrückende hydrologische Dynamik, wird sowohl durch eine AEM-Modellierung als auch über die Untersuchung multipler natürlicher Tracer ausgewiesen. Die Ergebnisse dienen der direkten Risikoabschätzung.

Im Verlauf des Projektes ERGO wurde der versorgerorientierte Ansatz bereits erfolgreich eingesetzt (ADOLPH ET AL., 2007; WILLSCHEID, 2007). Der Einsatz des AEM-Grundwassermodells WhAEM2000 und die Nutzung multipler natürlicher Tracer (^{18}O , FCKW-11, -12, -113 und SF_6) ermöglichten die Ausweisungen und Validierung einer Altersstruktur für die Wasserversorgung Freiburg-Ebnet im Zartener Becken durch zwei voneinander unabhängige Methoden (ADOLPH ET AL., 2007).

8.1.2 Ermittlung der Altersstruktur im Projekt ERGO

Verschiedene Methoden zur Beschreibung der Altersstruktur an einem Punkt im Aquifer stehen zur Verfügung und wurden im Rahmen dieser Arbeit bereits vorgestellt (Kap. 6) zum Ziel, welche die hydrologische Dynamik des betrachteten Systems berücksichtigt und daraus zur Abschätzung eines Risikos der anthropogenen Kontamination kommt. Studien haben gezeigt, dass die Nutzung von Aspekten der hydrologischen Dynamik zur Risikoabschätzung genutzt werden kann, indem Partikel Tracking Ergebnisse mit Informationen natürlicher Tracer kombiniert werden (u.a. HINKLE und SNYDER, 1997). ADOLPH ET AL. (2007) adaptieren diesen Ansatz und nutzen im Zuge dessen die AEM.

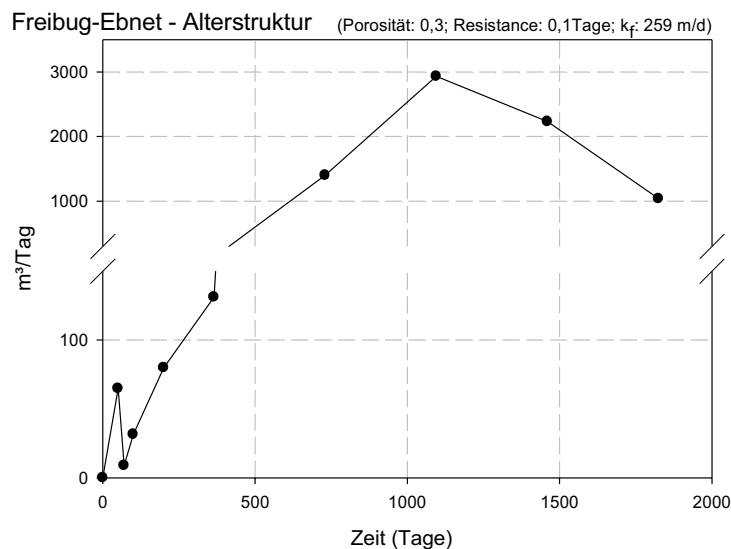


Abbildung 8.1: Altersverteilung (verändert nach: IHF, unveröffentlicht).

Verschiedene Bearbeitungsschritte erfolgten hierbei. WILLSCHEID (2007) führte zunächst die AEM-Modellierung durch. Im zweiten Schritt wurde die Altersverteilung erstellt. Partikel Tracking Analysen und der daran anschließende Einsatz der in WhAEM2000 implementierten Methode der *flux inspection lines* ermöglichten es, eine volumenspezifische Altersverteilung des geförderten Wassers auszuweisen. Die Altersverteilung (Abb. 8.1) weist Maxima im Bereich von 70 Tagen und 2-4 Jahren Partikellaufzeit auf. Ein weiteres Maximum wurde bei Partikellaufzeiten > 15 Jahren ausgewiesen (ADOLPH ET AL., 2007).

Im Anschluss an die Partikel Tracking Analysen konnte die ermittelte Altersverteilung über mehrere natürliche Tracer verifiziert werden. ^{18}O -Zeitreihen wurden genutzt, um den Anteil der Fließkomponente auszuweisen, deren mittlere Verweilzeit kleiner als ein Jahr war. FCKW

(11, 12, 113) sowie SF_6 wurden zur Validierung der Komponenten < 1 bis 50 Jahren mittlerer Verweilzeit herangezogen. Die Informationen, die die erste Anwendung der innerhalb des Projektes ERGO verwendeten Methode zur Bestimmung der hydrologischen Dynamik liefern konnte, sind eindeutig. Sie zeigen klar, dass die Ausweisung detaillierter Altersverteilungen über natürliche Tracer und Partikel Tracking Analysen möglich ist und einen Informationsgewinn gegenüber Methoden darstellen, die nur die mittlere Verweilzeit berücksichtigen (ADOLPH ET AL., 2007).

8.2 Anzuwendende Methode

In dieser Diplomarbeit wird die beschriebene Methode zum zweiten Mal eingesetzt. Sie kommt hierbei in leicht veränderter Form zum Einsatz und wird durch die Implementierung einer teilweisen Automatisierung effizienter in das Projekt ERGO eingebunden. Die Anwendung beschränkt sich in dieser Arbeit auf den ersten Teil der entwickelten Methode, in der es zur Ausweisung der Altersverteilungen innerhalb eines AEM-Modells kommt. Zur Probenahme der natürlichen Tracer im behandelten Projektgebiet Langen Erlen kommt es erst nach bzw. zum Ende dieser Diplomarbeit. Die Ergebnisse werden dann zu einem späteren Zeitpunkt des Projektes ERGO wieder aufgegriffen und über die Traceranalysen validiert. Die Methode weicht auch in der Umsetzung von der ersten Pilotstudie durch WILLSCHEID (2007) ab. Im bisher am IHF eingesetzten stationären AEM-Modell WhAEM2000 ist die Funktion der *flux inspection lines* implementiert. Im hier verwandten stationären AEM-Modell Tim^{ML} fehlt diese. Entsprechend der Vorgehensweise von HINKLE und SNYDER (1997) wird daher die Altersverteilung allein durch Partikellaufzeiten bestimmt.

Das Vorgehen kann in einzelne Abschnitte untergliedert werden. Im ersten Schritt wird, der konzeptionellen Vorgehensweise (Kap. 5.3) in der Modellierung folgend, das stationäre AEM-Modell Schritt für Schritt aufgesetzt. Als Kontrolle der daraus resultierenden Lösungen dient der Vergleich der errechneten und gemessenen Standrohrspiegelhöhen an Referenzpegeln im Untersuchungsgebiet.

Sobald das AEM-Modell plausible Ergebnisse liefert, wird mit dem Partikel Tracking begonnen. Hohe Partikelanzahlen werden in einer Rückwärtsmodellierung von den jeweils zu untersuchenden Wasserfassungen gestartet. HINKLE und SNYDER (1997) haben in ihren Sensitivitätsanalysen ermittelt, dass für Zellgrößen ihres FDM-Modells von ca. $0,8 \text{ km}^2$ die Anzahl von ca. 500 Partikeln pro Brunnen eingesetzt werden muss, um plausible Resultate zu erlangen (HINKLE und SNYDER, 1997, S. 18). Die Partikel werden gleichmäßig um den Brunnen und in verschiedenen Tiefen gestartet. Zu bestimmten Zeitintervallen werden die Partikel automatisch gestoppt, um Isochronen auszuweisen. Durch Differenzenbildung der Partikelanzahlen, innerhalb der durch die Isochronen begrenzten Bereiche, kann schließlich die Altersverteilung ermittelt werden. Die Altersverteilung wird in den durch den Modellierer definierten Zeitintervallen klassifiziert. Eine nachträgliche Klassifizierung durch ergänzende GIS-Operationen ist denkbar.

Mit der Ermittlung einer einzelnen Altersverteilung innerhalb eines stationären Grundwassermodells wird nur ein Aspekt der hydrologischen Dynamik berücksichtigt. Die hydrologische Dynamik führt jedoch in der zeitlichen Dimension zu unterschiedlichen Systemzuständen, die

wiederum in einer charakteristischen Altersverteilung münden. Da eine instationäre Betrachtung innerhalb des Projektes ERGO zu aufwendig ist, werden für das betrachtete System mehrere Szenarien abgeleitet. Neben unterschiedlichen Systemzuständen finden Parameterunsicherheiten Berücksichtigung, indem die Eingabekennwerte in vorher definierten Fehlerbereichen variiert werden. Die Partikel Trackings werden für jedes Szenario gerechnet, und die Altersverteilungen werden für alle Modellläufe einzeln erstellt und zusammengeführt. Dieses Verfahren ermöglicht es, einen gewissen Fehlerbereich bzw. die Streuung der sich ergebenden Altersverteilungen zu betrachten.

Neben der versorgerorientierten Vorgehensweise wird zusätzlich ein Teilabschnitt der verdachtsflächenorientierten Vorgehensweise realisiert, indem von den ERGO-Verdachtsflächen weitere Partikel Trackings vorgenommen werden. Die im Zuge einer Vorwärtsmodellierung ermittelten Fließpfade können in folgenden Arbeiten des Projektes Einsatz in der vorgesehenen Transportmodellierung finden.

8.3 Wahl der AEM

Im Projekt ERGO wird die Grundwassermodellierung mit Hilfe der analytischen Elemente Methode durchgeführt. Das komplette Projektgebiet von ERGO umfasst den gesamten Oberrhein und den letzten Hochrheinabschnitt unterhalb des Bodensees. Mit einer Ausdehnung von fast 6000 km² ließe sich eine numerische Betrachtung des Gesamtgebietes nur schwer realisieren. Einzelne numerische Grundwassermodelle für das jeweils zu betrachtende Wasserschutzgebiet müssten erstellt werden. Für jedes numerische Teilmodell muss eine Gebietsgrenze gefunden werden, an der hydrogeologische Randbedingungen zu formulieren sind. Sobald das numerische Modell dann realisiert ist, wäre eine grundlegende Änderung an der Modellstruktur, beispielsweise der Diskretisierung oder den Grenzen des Teilmodells, kaum oder zumindest nur unter größerem Arbeitsaufwand zu realisieren. Wenn es gewollt ist, innerhalb eines regionalen Modells lokale dreidimensionale Aspekte mittels konventioneller Verfahren der Grundwassermodellierung (FDM oder FEM) zu betrachten, kann es „beschwerlich“ werden (HAITJEMA, 1985).

Die AEM kennt keine Modellgrenzen und ist daher innerhalb des ERGO Projektes flexibler einzusetzen. Die jeweils zu betrachtenden Wasserschutzgebiete werden zwar auch einzeln modelliert, aber ein Zusammenfügen aller Teilmodelle gestaltet sich als wesentlich unkomplizierter. Ein AEM-Modell kann schrittweise nach dazugewonnenen Erkenntnissen erweitert und verfeinert werden. Wenn zu einem späteren Zeitpunkt neue hydrogeologische Fragestellungen auftreten, so können diese z.B. nach einer gezielten weiteren Datenerhebung und einer effizienten Anpassung des bestehenden AEM-Modells beantwortet werden.

8.4 Python und Tim^{ML}

Das AEM Grundwassermodell Tim^{ML} wurde für diese Arbeit aufgrund verschiedener Vorzüge ausgewählt. Tim^{ML} ist frei verfügbar und unter GNU Lesser General Public License¹ lizenziert.

¹<http://www.gnu.org/copyleft/lesser.html> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007)

Es handelt sich um ein stationäres Modell, welches die Modellierung von Ein- (eng.: *single-layer*) wie auch Mehrschichtproblemen (eng.: *mulit-layer*) ermöglicht. Zahlreiche analytische Elemente stehen zur Verfügung (BAKKER, 2007b). Zu großen Teilen ist Tim^{ML} in der open source² Programmiersprache Python 2.4 erstellt. An einigen Stellen wird innerhalb des Python Quellcodes auf FORTRAN zurückgegriffen, um die Rechenzeiten zu verkürzen (BAKKER, 2007b). Die Aufnahme weiterer analytischer Elemente ist durch die objektorientierte Programmstruktur einfach zu realisieren und wird durch die Entwickler auch über ein ausführliches Tutorial³ bestärkt (BAKKER ET AL., 2005).

Python ist eine dynamische, objektorientierte Programmiersprache und zeichnet sich durch Benutzerfreundlichkeit aus. Mitsamt seiner zahlreichen Bibliotheken, die der Erweiterung des Python Kernes dienen, findet es breite Anwendung in den Naturwissenschaften (PYTHON SOFTWARE FOUNDATION, 2007). Diese Rahmenbedingungen ermöglichen, dass Tim^{ML} für die Ziele des Projektes ERGO individuell weiterentwickelt und erweitert werden kann.

Hauptsächlich wurde neben der vorhandenen Standardbibliothek auf die Bibliotheken NumPy und Matplotlib sowie dbfLib und shapelib zurückgegriffen. Nach OLIPHANT (2006) legt NumPy den Grundstein einer brauchbaren Programmierumgebung in der wissenschaftlichen Datenverarbeitung (OLIPHANT, 2006, S. 13). Matplotlib bildet hingegen mit seiner Nähe zu MATLAB⁴ eine Umgebung zur Visualisierung der Ergebnisse dieser Arbeit, welche außerhalb eines geographischen Informationssystems geschehen kann.

8.4.1 Erweiterung des bestehenden Quellcodes

Tim^{ML} wurde im Rahmen dieser Arbeit um unterschiedliche Module erweitert. In der derzeit verfügbaren Version 3.0 ist Tim^{ML} nur eingeschränkt für die Ziele des Projektes einsetzbar. Unter Berücksichtigung der Anzahl der Projektgebiete und dem dafür zur Verfügung stehenden Zeitaufwand ist die Automatisierung von möglichst vielen Bearbeitungsschritten ein zentrales Ziel der Weiterentwicklung des bestehenden Programmcodes. Tim^{ML} muss für den Einsatz im Projekt dabei unter verschiedenen Gesichtspunkten erweitert werden:

- Ein- und Ausgabeoptimierung
- Automatisierung von Teilschritten
- Schaffung von Schnittstellen für weitere Projektabschnitte
- Reduktion der Fehleranfälligkeit

Die folgenden Abschnitte gehen genau auf die vorgenommenen Implementierungen der verschiedenen Teilaspekte ein. Aufgrund des Umfangs der Arbeit konnten nur einige der Entwicklungen im Anhang C aufgenommen werden. Alle im Rahmen der Arbeit entwickelten Programmteile (Tab. C.1) finden sich mit weiteren Erläuterungen, Beispielen und komplettem Quellcode auf der beiliegenden CD-ROM.

²<http://www.opensource.org/docs/osd> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007)

³<http://bakkerhydro.org/timml/Python4aem.pdf> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007)

⁴MATLAB ist ein registriertes Warenzeichen der The MathWorks, Inc.

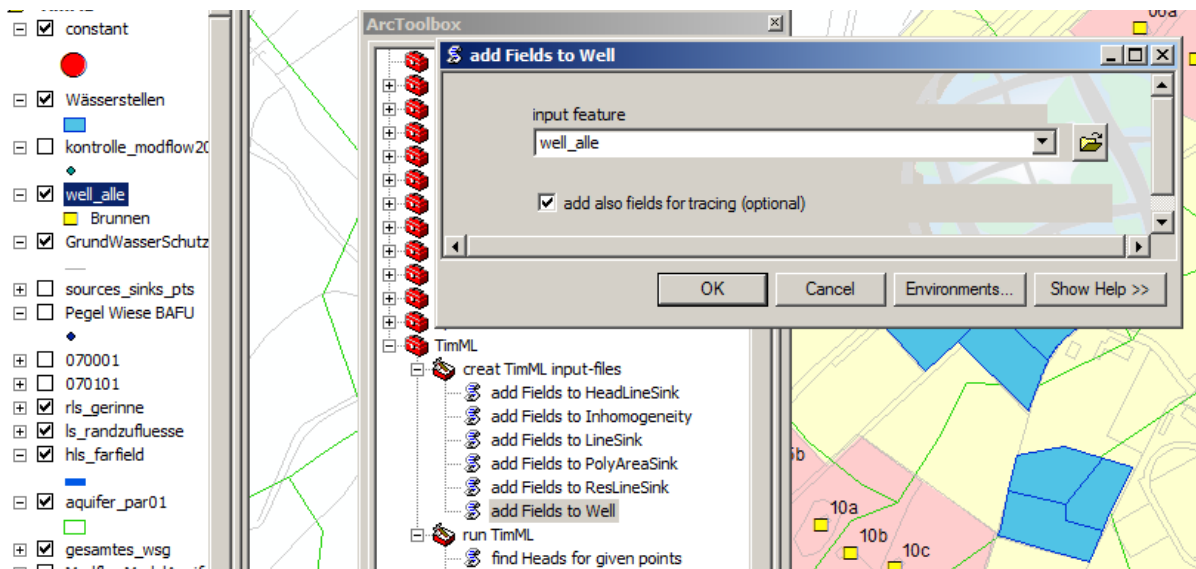


Abbildung 8.2: Die erstellte Arc-Toolbox ermöglicht u.a. die automatische Konfigurierung der Tim^{ML}-Input-Shapefiles.

8.4.1.1 Optimierung der Modelleingabe und -ausgabe

Der bestehende Programmcode von Tim^{ML} ermöglicht eine Bedienung des Programms über Inputdateien, die manuell erstellt werden müssen; zudem ist eine manuelle Bedienung mittels der Shell-Konsole im interaktiven Python Modus möglich. Für die praktische Anwendung der eingesetzten Methode ist dies nicht praktikabel, da die Definition mehrerer hundert analytischer Elemente mit den jeweiligen Lage-Koordinaten und Element-Parametern zu einer unüberschaubar großen Arbeits- und Fehlerquelle führen würde. Tim^{ML} wurde daher im Rahmen dieser Diplomarbeit zu großen Teilen an ein geographisches Informationssystem (GIS) gekoppelt. Das ESRI-Shapefile-Format⁵ (kurz: Shapefile-Format) stellt das am weitesten verbreitete Dateiformat dar, welches zum Vorhalten von raumbezogenen Daten dient. Da es sich bei Shapefiles zudem um einen offenen Standard handelt und somit keine Bindung an ein kommerzielles GIS erfolgt, wurde dieses Format als Schnittstelle implementiert, um die Dateneingabe und -ausgabe von Tim^{ML} zu optimieren und zu beschleunigen. Um bei der Visualisierung eine gewisse Unabhängigkeit gegenüber einem GIS zu sichern, wurde zudem ein Modul für die graphische Ausgabe mit Matplotlib angefertigt.

Auch im Hinblick auf die Kopplung mit einem existierenden GIS erweist sich das in Python programmierte Modell Tim^{ML} als geeignet. Kommerzielle (ESRI) wie auch frei verfügbare (z.B. Quantum GIS⁶) GIS-Software existiert, die über eine Python Schnittstelle verfügt. Dies ermöglichte im letzten Abschnitt der Diplomarbeit eine teilweise Kopplung von Tim^{ML} mit ESRI ArcGIS DesktopTM 9.2. Es wurde eine so genannte *Toolbox* erstellt, die verschiedene Skripte zur Generierung der Tim^{ML}-Shapefiles erlaubt. Zusätzlich können einige einfache Tim^{ML}-Befehle direkt aus dem GIS ausgeführt werden.

⁵ESRI ist ein registriertes Warenzeichen der Environmental Systems Research Institute, Inc.

⁶<http://www.qgis.org/> (letzter Abruf: 15.11.2007)

8.4.1.2 Automatisierte Ermittlung der Altersverteilung

In der ursprünglichen Version von Tim^{ML} ist keine automatische Partikel Tracking Methode für Brunnen oder andere Objekte im Aquifer realisiert. Zur Verfügung stehen lediglich einzeln zu startende Partikel.

Mehrere Teilschritte der in Kap. 8.2 beschriebenen Vorgehensweise zur Ermittlung der Altersverteilung wurden in Tim^{ML} implementiert und können nun genutzt werden, um beliebig zu bestimmende Partikelanzahlen von Brunnen oder anderen Punkten im Aquifer zu starten. Die Partikel werden automatisch in ihren Startpositionen angeordnet und in, durch den Benutzer zu definierende, Zeitintervallen berechnet. Neben der in dieser Arbeit eingesetzten Rückwärtsmodellierung zur Ermittlung der Altersverteilung konnten auch erste Methoden implementiert werden, die eine Vorwärtsmodellierung erlauben. Es besteht die Möglichkeit, so genannte *Partikelwände* in beliebiger Ausrichtung über ein Shapefile zu definieren. Partikel werden dann homogen über die Partikelwand verteilt und können zur Vorwärtsmodellierung als auch zur Rückwärtsmodellierung eingesetzt werden.

8.4.1.3 Vorbereitung der Modellkopplung

Da im Rahmen Projektes ERGO eine, an die analytische Grundwassermodellierung anknüpfende, Transportprognose vorgenommen wird, ist die Modellkopplung mit der verwendeten Software PHREEQC⁷ zu berücksichtigen. Bisher wurde mit dem Modul „csvTim.py“ ein Verfahren implementiert, welches die im Partikel Tracking berechneten Fließpfade in seinen Einzelzeitschritten in eine CSV-Datei speichert. Die folgenden Informationen sind in der Ausgabedatei enthalten und können zur weiteren Verarbeitung genutzt werden:

- Start-, Stop-Zeitpunkt und -Ort,
- x-, y- und z-Koordinaten,
- hydraulische Leitfähigkeiten(k_f) und effektive Porositäten (n_{eff}),
- Fließgeschwindigkeiten in Fließrichtung (v),
- aktuelle Tim^{ML}-Schichten (layer).

8.4.1.4 Exception handling

Tim^{ML} verfügt derzeit über nahezu keinerlei Ausnahmeverarbeitung (eng.: *exception handling*). Die Entwickler setzten eine „gewisse Intelligenz des Benutzers“ und damit eine fehlerfreie Bedienung des Modells voraus (BAKKER, 2007b, S. 8). Die vollständige Implementierung der Shapefile-Anbindung und die begonnene GIS-Kopplung tragen diesem Missstand Rechnung und bedingen, dass Tim^{ML} resistenter gegenüber Fehlern des Modellierers geworden ist. In einigen Aspekten konnte bei der Modellerweiterung somit *exception handling* Berücksichtigung finden.

⁷http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/ (letzter Abruf: 15.11.2007)

8.5 Datenanforderung und -aufbereitung

Da es sich bei der AEM immer um eine konzeptionelle Modellierung (Kap. 5.3) handelt, wird berücksichtigt, dass nicht immer alle geforderten Daten verfügbar sind und dass gleichzeitig nicht alle verfügbaren Daten eingesetzt werden. Für einen ersten Aufbau des Modells oder sobald neue Informationen in das Modell aufgenommen werden sollen, sind jedoch gewisse Datenanforderungen zu berücksichtigen.

8.5.1 Aquifergeometrie

Es müssen ausführliche Daten zur Aquifergeometrie vorhanden sein. Sowohl der unendlich ausgedehnte Aquifer der Tim^{ML}-Modellierung als auch alle Inhomogenitäten, die im Verlauf der Modellierung definiert werden, benötigen folgende Informationen:

Lage der Aquifersohle: Informationen zur Aquifersohle können aus Bohrprofilaten abgeleitet werden. Zudem können bereits vorhandene geologische Schnitte ausgewertet werden, insofern sie in ihrer Skalierung die betrachteten Schichten detailliert genug berücksichtigen. Wünschenswert ist es, dass Informationen zur Aquifersohle bereits in Rasterform oder als Punktdaten bzw. als Isolinien in Shapefiles vorliegen. Die Mindestanforderung ist hierbei die Kenntnis der mittleren Lage der Sohle für die betrachtete Modellregion.

Obere Begrenzung des Aquifers: Die obere Begrenzung des Aquifers wird entweder aus vorhandenen Informationen zur Mächtigkeit (gespannter Fall) oder den mittleren Standrohrspiegelhöhen (ϕ) des Systems (ungespannter Fall) abgeleitet.

Mehrschichtinformation: Beim *multi-layer* Aufbau des Modells müssen für die trennenden Schichten der Widerstand sowie die Mächtigkeit definiert werden (s.a. Kap. 5.2.2.2).

Aquiferparameter: Für das Gesamtmodell mit allen Schichten und Inhomogenitäten, die ausgewiesen werden sollen, müssen Daten zur horizontalen hydraulischen Leitfähigkeit (k_f) und zur effektiven Porosität (n_{eff}) vorliegen. Für eventuelle Widerstandsschichten muss die vertikale hydraulische Leitfähigkeit (k_{fv}) vorhanden sein oder geschätzt werden.

8.5.2 Daten im *far-field* bzw. der gesamten Modellregion

Um die Potentiale im *far-field* kontrollieren und den lokalen in den regionalen Grundwasserfluss einzubetten zu können, werden Informationen zu den natürlichen hydrogeologischen Randbedingungen außerhalb der intensiv zu betrachtenden Modellregion (auch: *near-field*) erforderlich.

Referenzpunkt (P): Da P durch eine Standrohrspiegelhöhe im *far-field* festgelegt werden muss, ist es hilfreich, Grundwassergleichenpläne der Gesamtregion zur Verfügung zu haben. Mindestens einige Grundwasserpegel-Informationen werden benötigt.

Grundwasserneubildung (GWN): Es werden für die über Gebietssenken berücksichtigte Grundwasserneubildung Polygon-Shapefiles mit Gebietsmitteln benötigt. Stehen Rasterdaten zur Verfügung, muss die Ausweisung von Regionen gleicher GWN separat im GIS geschehen und ein Polygon-Shapefile generiert werden.

Gerinne im *far-field*: Da die Abbildung von Gerinnen im *far-field* ausschließlich als *head-line-sinks* erfolgen sollte (s.a.: HAITJEMA, 1995, S. 301) und eine Definition nur über die Wasserstände erfolgt, sind genaue Informationen zur Kote des Gerinnebettes und der Wasserstände erforderlich. Im Idealfall dienen vorhandene Punkt- oder Linien-Shapefiles als Input zur späteren Generierung der Tim^{ML} -Shapefiles. Falls die geforderten Informationen nicht direkt verfügbar sind, können die Input-Daten aus der topographischen Karte des Gebietes abgeleitet werden.

8.5.3 Daten im *near-field*

Gerinne: Die Datenanforderungen zur Abbildung von Gerinnen im *near-field* sind von der Art der Elemente, die hierfür ausgewählt werden, abhängig. Die Anforderungen der *head-line-sinks* sind bereits im vorhergehenden Abschnitt ausgeführt (s.a.: Kap. 8.5.2).

Line-sinks (Neumann-Bedingungen) benötigen die Angabe eines konstanten Abflusses in den Aquifer oder in das zu modellierende Gerinne. Zusätzlich muss die Breite des Gerinnes verfügbar sein.

Resistance-line-sinks (Cauchy-Bedingungen) decken sich in der Datenanforderung mit *head-line-sinks*. Zusätzlich muss der Widerstand (c [d]) definiert werden. Dies kann aufgrund der in Gl. 5.1 abgeleiteten Beziehung geschehen. Informationen zur Mächtigkeit (d [m]) und zur vertikalen hydraulischen Leitfähigkeit (k_{fv} [m/d]) des Interstitials werden hierzu benötigt und müssen ggf. abgeschätzt werden.

Brunnen: Es müssen mindestens Informationen zum Radius der Filterstrecke und zu den mittleren Entnahmemengen vorgehalten werden. Sollen unterschiedliche Ergiebigkeiten verschiedener Tiefenbereiche, unvollständige Verfilterung oder dreidimensionale Aspekte im näheren Zustrombereich des Brunnens Berücksichtigung finden, so erfordert dies genaue Brunnenausbaupläne und Informationen zum genauen Schichtaufbau im Umkreis des Brunnens.

Idealerweise liegen die Daten in Form von Punkt-Shapefiles vor.

Lokale, flächenhafte Infiltration: Um lokale, flächenhafte Infiltration - wie z.B. durch Wässerungen im Zuge der künstlichen Grundwasseranreicherung - zu berücksichtigen, sind Informationen zur infiltrierten Menge als auch zur Ausdehnung der betrachteten Fläche notwendig. Flächenhafte Infiltrationen oder auch Entnahmen bzw. Verdunstung können in Tim^{ML} als beliebig geformte Polygone oder über Kreisflächen abgebildet werden. Vorteilhaft ist das Vorliegen der Flächen innerhalb von Shapefiles.

8.6 Fazit

Die beschriebene Methode gliedert sich in das Projekt ERGO mit seinem verdachtsflächenorientierten und versorgerorientierten Vorgehen ein. Im Zuge der genauen Beschreibung der im nächsten Kapitel Anwendung findenden Methode wurden Teilschritte ausgewiesen und der

praktische Handlungsablauf skizziert. Die genauen Anforderungen an Daten und deren Aufbereitung wurden kurz dargelegt.

Die Wahl der in dieser Arbeit eingesetzten Software Tim^{ML} und der Python Programmierungsumgebung konnten auch im Hinblick auf die Anforderungen des Gesamtprojektes begründet werden. Es wurden Implementierungen notwendig, welche die eingesetzte Software Tim^{ML} zielgerichtet auf die Bedürfnisse des Projektes ERGO anpassen ließen. An diesem Punkt steht daher ein erweitertes Tim^{ML} -Modell zur Verfügung, das über eine Teilautomatisierung zur Erstellung der im Projekt ERGO verwendeten Altersverteilung, über eine benutzerfreundliche Anbindung an ein beliebiges GIS und über eine erste direkte Kopplung mit der kommerziellen GIS-Software ArcGIS Desktop aufweist. Die Anwendung auf ein ERGO Pilotgebiet kann nun erfolgen.

9 Anwendung

Das Wasserschutzgebiet (WSG) der Langen Erlen wird durch die Industriellen Werke Basel (IWB) zur Trinkwasserversorgung großer Teile der Stadt Basel genutzt. Die hydrologische Dynamik wird nun als Parameter der Risikoabschätzung für die Trinkwasserefassungen dieser Wasserversorgung angewandt. Nach einer Einführung in das Untersuchungsgebiet, auch im Hinblick auf die hier vorherrschenden Besonderheiten, wird die Umsetzung ausgeführt. Die Herausforderungen bei der Umsetzung in Tim^{ML} werden dargelegt und die Ergebnisse diskutiert.

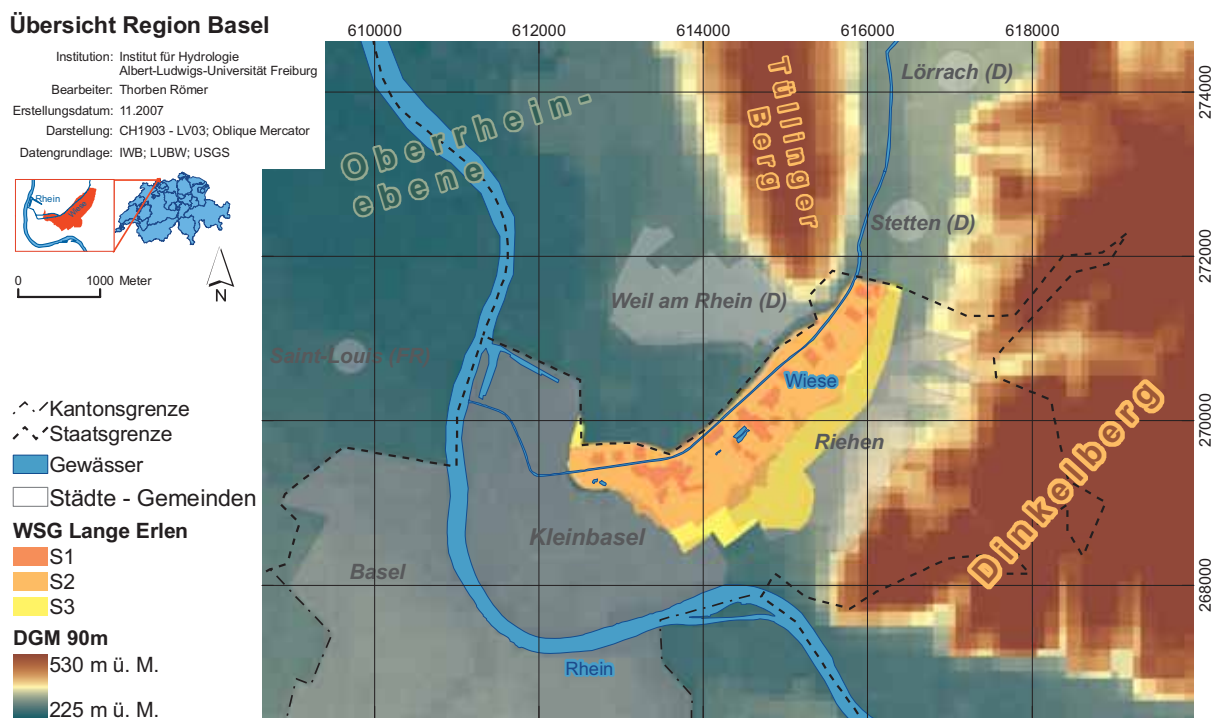


Abbildung 9.1: Übersicht der Region Basel und des WSG Lange Erlen.

9.1 Einführung in das Untersuchungsgebiet der Langen Erlen

Einen ersten Überblick der Langen Erlen bietet Abb. 9.1. Das Gebiet der Langen Erlen oder Lange Erlen befindet sich im Kanton Basel-Stadt, Schweiz. Es gliedert sich in den südöstlichsten Abschnitt der Oberrheinebene ein. Die natürliche Grenze im Westen und Südwesten der betrachteten Region stellt der Rhein mit dem Basler Rheinknie dar. Auf der Höhe Basel betritt der Rhein durch die Talfurche des Hochrheins die Region und weitet sich im Verlauf des Basler Rheinknies nach Norden hin zur Oberrheinebene. Das Hauptgerinne im näheren Un-

tersuchungsgebiet der Langen Erlen ist die Wiese. Sie tritt, durch den Tüllinger Berg und den Dinkelberg eingeschlossen, im NNE in das Gebiet ein und nimmt dann langsam einen Richtung Westen abknickenden Verlauf hin zum Rhein. Nördlich der Wiese grenzt Baden-Württemberg an. Im Osten wird das Untersuchungsgebiet durch die Siedlungsgebiete der Gemeinde Riehen (CH) und dem sich hier erhebenden Dinkelberg eingefasst. Die östliche Nordbegrenzung stellt die dem Tertiär zuzuordnende Erhebung des Tüllinger Berges dar.

Eine grundlegende Untersuchung zur Hydrogeologie der Langen Erlen stellt die Dissertation von ZECHNER (1996) dar. Im Rahmen der Arbeit wurden, neben allgemeinen Gebiets-Informationen, Sachverhalte zur Geologie, Hydrogeologie, Hydrologie und Hydraulik des Gebietes zusammengestellt, die auch in dieser Arbeit Verwendung finden. Informationen zur Geologie gibt das Blatt 1047 (Abb. D.1) des Geologischen Atlas der Schweiz und seine weiteren Tafeln und Erläuterungen (SCHWEIZERISCHE GEOLOGISCHE KOMMISSION, 1971; FISCHER ET AL., 1971). Zusätzliche Studien, die zur Bearbeitung herangezogen wurden, sind die Untersuchungen durch HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003b,a).

9.1.1 Geologie

Das Untersuchungsgebiet der Langen Erlen gliedert sich in das südöstlichste Ende der Großstruktur des Oberrheingrabens ein. Die Rheintalflexur, die Verlängerung der äußeren Randverwerfung des Oberrheingrabens, durchzieht als Struktur erster Ordnung das Gebiet von NNE streichend. Der Tüllinger Berg ist Teil des Markgräfler (Lörracher) Tertiär-Hügellandes, welches ein Schollenland aus der Folge Rupélie-Chattien ist. Es stellt die Nordbegrenzung des Wiesetales dar, bevor dieses sich auf Höhe der deutsch-schweizerischen Grenze fächerartig in Richtung Rhein öffnet. Das Hügelland ist zu größeren Teilen durch Löss bedeckt (FISCHER ET AL., 1971, S. 5).

Östlich der Rheintalflexur folgt der Dinkelberg mit flach lagerndem Trias. Am Westrand des Dinkelberges findet sich wiederum Lössbedeckung. Im Wesentlichen handelt es sich beim Dinkelberg um Muschelkalk, in welchem ein System aus rheinisch streichender, mit Keuper erfüllter, Zerrgräben eingesenkt ist (FISCHER ET AL., 1971, S. 6). Gegen Süden taucht der Dinkelberg unter das Hochrheintal ab.

9.1.2 Quartärgeologie

Abb. 9.2 gibt einen Überblick über die im Folgenden abgehandelten quartärgeologischen Verhältnisse der Region.

9.1.2.1 Pleistozän

FISCHER ET AL. (1971) unterscheiden in der Region Basel vier Schotterniveaus. Ältere Deckenschotter, jüngere Deckenschotter, Hoch- und Niederterrassenschotter werden aufgrund von Höhenlage und morphologischen Gesichtspunkten abgegrenzt. Hochterrassenfelder finden sich z.T. am Westrand des Dinkelberges. In der engeren Untersuchungsregion der Langen Erlen finden sich nur Niederterrassenschotter. Weiter in Höhere-Niederterrassenschotter (Würm-Eiszeit) und Tiefere-Niederterrassenschotter (Erosionsfelder) differenziert, entsprechen die Schotterfel-

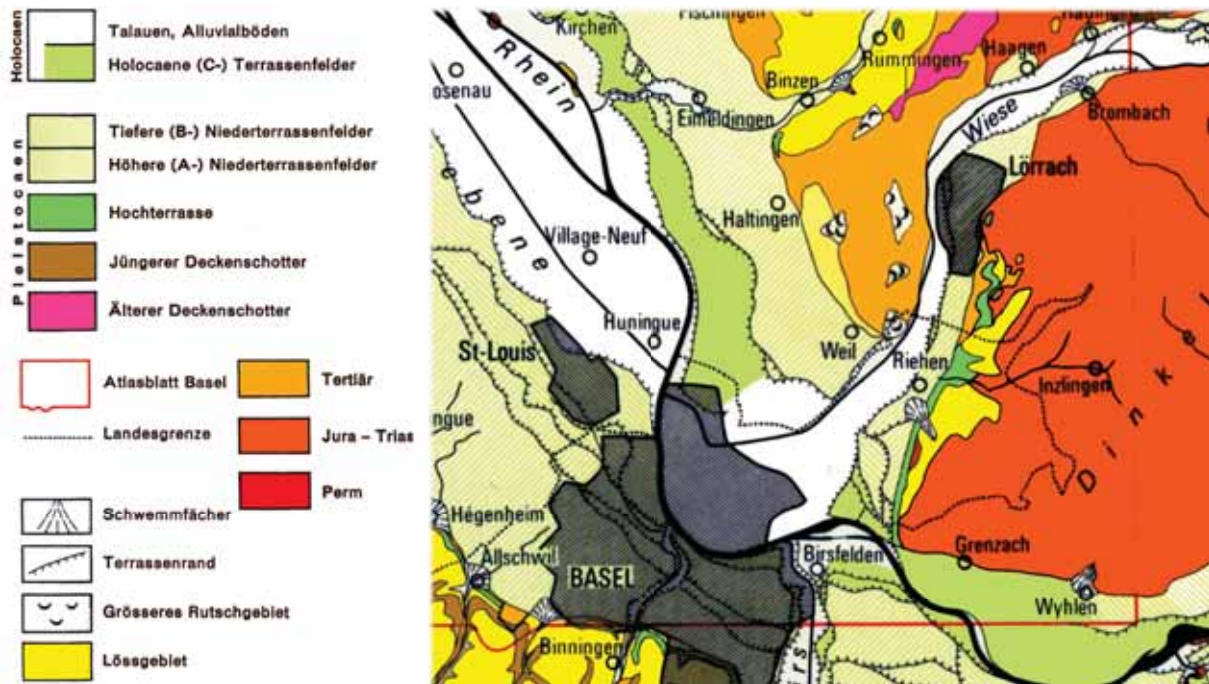


Abbildung 9.2: Quartärgeologische Übersicht der Region (verändert nach: SCHWEIZERISCHE GEOLOGISCHE KOMMISSION, 1971).

der heute in etwa den Siedlungsgebieten der Gemeinden Riehen (CH) und Weil (D).

Die Schotter lassen sich auch aufgrund ihrer Herkunft differenzieren. Innerhalb des Untersuchungsgebietes kommt es zu einer weitgehenden Verzahnung von Rhein- und Wieseschottern. „Die Schotter des Rheins bestehen hauptsächlich aus alpinen Geröllen recht bunter Zusammensetzung, Gerölle aus dem Schwarzwälder Grundgebirge und dem Jura sind beigemengt“ (FISCHER ET AL., 1971, S. 24). Es zeigen sich eine rasch wechselnde Schichtung, Einschaltungen von Sandlinsen und -bändern, teilweise Verkittungen zu Nagelfluh sind vorhanden. Die Wieseschotter bestehen überwiegend aus Grundgebirgs-Geröllen. Buntsandstein ist selten, Sandlagen sind häufig, Konglomerierung fehlt.

In der Region finden sich Löss und von ihm abzuleitende Lösslehme vor allem im Bereich des Tüllinger Berges und am Westabfall des Dinkelberges. Die Lössvorkommen bedingen auch, dass die pleistozänen Schotter, welche längs der Erosionsränder abgeschwemmt oder solifluidal umgelagert wurden, mit verschwemmten jüngeren Lössen und Lehmen versetzt sind (FISCHER ET AL., 1971, S. 24 f.).

9.1.2.2 Holozän

Die Talauenschotter von Rhein und Wiese sind aus Umlagerung von Niederterrassen-Schottern entstanden und zeigen daher die gleichen Zusammensetzungen. Die Schotter weisen eine stärkere Differenzierung in der Sortierung als die Niederterrassen-Schotter auf (FISCHER ET AL., 1971, S. 28). Die Verbreitung der Schotter ist auch durch den sich ändernden Verlauf des Rheins geprägt. Bis rund 2500 v. Chr. floss der Rhein nördlich von Kleinbasel, und im weiteren Verlauf kam es im Bereich bis ins Kleinbasel zu einer Überlagerung der obersten Rheinschotter durch Wieseschotter. Ab der Höhe von Brunnen 5 und 10 (Abb. 9.4) fächert sich die Schüttung der Wieseschotter auf und verzahnt sich mit den holozänen Rheinschottern (ZECHNER, 1996, S. 9).

Als weitere holozäne Formen sind im Untersuchungsgebiet die in Abb. 9.2 eingezeichneten Rutschgebiete zu nennen. Auf der Flur „Schlipf“ am SW-Ende des Tüllinger Berges kam es im Jahr 1758 zu einem Erdschlipf (kleiner Bergsturz), der den ganzen Hang erfasste und die Wiese aus ihrem Bett drängte. Ausgang nahmen die Schlipfe von den Quellhorizonten an der Basis der Süßwasserkalk-Horizonte (FISCHER ET AL., 1971, S. 27).

9.1.3 Hydrogeologie

Der regionale Grundwasserstrom fließt normal bis spitzwinklig dem Rhein zu. In das regionale Grundwassersystem des Oberrheins fügt sich das lokale Fließsystem des Wiesetales ein. Der Aquifer des Gebietes Langen Erlen weist hydraulische Leitfähigkeiten (k_f) auf, die im Bereich von 3.0×10^{-3} m/s bis 7.5×10^{-3} m/s liegen, und verfügt über effektive Porositäten (n_{eff}) zwischen 0.08 bis 0.15 (HUGGENBERGER und GULDENFELS, 2003a, S. 10). Die Zusammensetzung besteht fast ausschließlich aus Rhein- und Wieseschottern der Niederterrasse und Talaue. Die Wieseschotter breiten sich fächerartig von NW her aus und verzahnen sich mit den Rheinschottern. Die Mächtigkeit des Schotteraquifers beträgt zwischen sieben und zwanzig Metern. Den Stauer bilden die oligozänen Tone und Mergel aus (Mergel der Tüllingerschichten, siltige Tone der Malettaschichten, Elsässermolasse und Cyrenemerge: Mergel mit Sandeinlagen). Mit k_f -Werten von 1×10^{-7} bis 1×10^{-8} werden sie als undurchlässig erachtet (HUGGENBERGER und GULDENFELS, 2003b, S. 10). Der tertiäre Grundwasserstauer des Untersuchungsgebietes ist an seiner Oberfläche durch Flusserosion geprägt worden. Rinnen, Schwellen und Kolke sind zu erkennen.

Das Untersuchungsgebiet der Langen Erlen wird im Osten durch den Westrand des Dinkelberges begrenzt. Am Dinkelberg treten einige ergiebige Karstquellen aus. Markierversuche im Jahr 1974 zeigen, dass die Hauptentwässerung des Dinkelberges entlang des südlichen Schichtfallens nach SSW, S oder SSE stattfindet. Die Entwässerung findet meist parallel zu Keupergräben und anderen tektonischen Strukturen statt. Es wird angenommen, dass eine Querung der Gräben, die als allgemein undurchlässige und stauende Barrieren angesehen werden, kaum stattfindet. Nur lokal, in Bereichen tektonischer Zerrüttung, wird vereinzelte Wasserwegsamkeit angenommen. Zum Aquifer der Langen Erlen besteht keine nachgewiesene direkte hydraulische Verbindung (ZECHNER, 1996, S 18).

In den nordöstlichsten Randgebieten Riehens wird ein Einfluss durch höher mineralisiertes, vom Karst beeinflusstes Grundwasser festgestellt. Es wird ein indirekter Übertritt über die Lokalschotter von Inzlingen (Aubach), Bettingen (Bettingerbach) und untergeordnet dem Immenbächli vermutet. Befindet sich die spezifische elektrische Leitfähigkeit in den Langen Erlen im Bereich von 250 bis $< 400 \mu\text{S/cm}$, so liegt im Bereich der lokal vermuteten Wasserzutritte (östlich der Brunnen 6 bis 9) die Leitfähigkeit bei 750 bis $850 \mu\text{S/cm}$ (ZECHNER, 1996, S. 44). Der genaue Zufluss ist nicht bekannt. Über Abschätzung und Grundwassermodellierung ermittelte Werte belaufen sich zwischen 76 l/s (ZECHNER, 1996, S. 22) und 170 l/s (KIEFER und STUDDER, 1989, In: ZECHNER (1996)).

Im Bereich der Rheintalflexur taucht der Obere-Muschelkalk-Aquifer steil ab. Hier wird der Übertritt aufgrund der an der Flexur hangenden Formationen des Lias, Doggers und auch tertiärer Mergel als unmöglich angesehen (ZECHNER, 1996, S. 17 f.).

Der Tüllinger Berg, der rechts der Wiese das Untersuchungsgebiet nach NE bis N abgrenzt, bildet einen Schichtwasserhorizont aus, der in etwa 400 m ü. M. einen kranzförmigen Quellhorizont aufweist. Die Tüllinger Süßwasserschichten bilden den Speicher und Mergel den Stauer (FISCHER ET AL., 1971, S. 40). Der Zufluss vom Tüllinger Berg in Form von Hang- und Schichtwasser ist unbekannt und wird von ZECHNER (1996) als klein (25 l/s) eingeschätzt. KIEFER und STUDER (1989, In: ZECHNER (1996)) schätzen den Zustrom auf ungefähr 100 l/s, HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003b) bestimmen in Ihrer Modellierung einen Zufluss von 1,6 l/s. Bis auf die lokalen Zuflüsse werden sowohl der Dinkelberg mit geschätzten k_f -Werten um 1×10^{-5} als auch der Tüllinger Berg als vergleichsweise undurchlässig angesehen.

9.1.4 Hydrologie

Das WSG Lange Erlen liegt im Einfluss mehrerer Oberflächengewässer, die in Abb. 9.4 eingezeichnet sind. Die Wiese durchzieht das WSG Lange Erlen und bildet in weiten Teilen dessen nördliche Begrenzung. Sie entspringt aus mehreren Quellen am Feldberg auf ca. 1200 m Höhe. Wenige hundert Meter unterhalb des WSG befindet sich der Pegel Wiese - Basel (LH 2199). Das EG wird am Pegel mit 458 km² angegeben; die mittlere EG-Höhe beträgt 370 m ü. M. (BAFU, 2007).

Der natürliche Lauf der Wiese ist stark verändert. Im 13. Jahrhundert begannen die wasserbaulichen Veränderungen. Ab 1834 wurde die Wiese begradigt und sukzessive in ein hart verbautes Gewässerbett verlegt. Ende des 19. Jahrhunderts wurde die Wiese mit dem heute existierenden Doppeltrapezprofil versehen. Um eine verstärkte Sohlerosion abzumindern, wurden Querswellen angelegt. In den Jahren 1999 und 2000 wurden unter der Leitung des Tiefbauamtes des Kantons Basel-Stadt rund 600 m des Wieselaufs im Bereich der Langen Erlen revitalisiert (KANTON BASEL-STADT, 2007b). Nur 1,5 Flusskilometer unterhalb des WSG Lange Erlen mündet die Wiese bei Kleinhüningen in den Rhein. Die Wiese steht in engem hydraulischem Kontakt mit dem unterliegenden Schotteraquifer. ZECHNER (1996) ermittelt innerhalb einer Grundwassermodellierung 200 l/s für den Abschnitt des WSG Lange Erlen. HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003b) ermitteln für eine mittlere Hochwassersituation eine Infiltration von 700 l/s.

9.1.4.1 Oberflächengewässer

Mehrere kleinere Fließgewässer bzw. Kanäle befinden sich im WSG Lange Erlen. Rechts der Wiese (Höhe Brunnen 2b) wird ein Kanal ausgeleitet, der den Otterbach speist. Der Otterbach wurde mehrfach umgelegt und ist teilweise verdolt. Er fließt knapp zwei Kilometer unterhalb der Ausleitung wieder der Wiese zu (KANTON BASEL-STADT, 2007b).

Aubach, Immenbächli und Bettingerbach entwässern den westlichen Teil des Dinkelbergs und münden in den Riehenteich, einen ursprünglichen Seitenarm der Wiese, der seit dem 13. Jahrhundert kanalisiert ist. Vor der Querung der Staatsgrenze heißt der Riehenteich noch Mühlen-teich. Im WSG Lange Erlen teilt sich der Riehenteich wiederum in Alten und Neuen Riehen-teich. Immenbächli und Bettingerbach fließen - verdolt und unterirdisch - bereits im Riehener

Tabelle 9.1: Hydrologische Kennwerte der Wiese am Pegel Basel (LH 2199) und des Rheins bei Rheinhalle (LH 2899) (Datengrundlage: BAFU, 2007).

Station	Rhein - Rheinhalle	Wiese - Basel
Nr.	LH 2899	LH 2199
Koordinaten	613400 / 267650	611800 / 269700
Bezugshöhe (m ü. M.)	240	240
Mittlere EG-Höhe (m. ü. M.)	1025	370
Aeo (km²)	35897	458
Periode	1891-2005	1933-2005
MQ (m³/s)	1051	11,40
NQJahr (m³/s)	606 (1921)	5,26 (1949)
HQJahr (m³/s)	1439 (1910)	19,70 (1939)

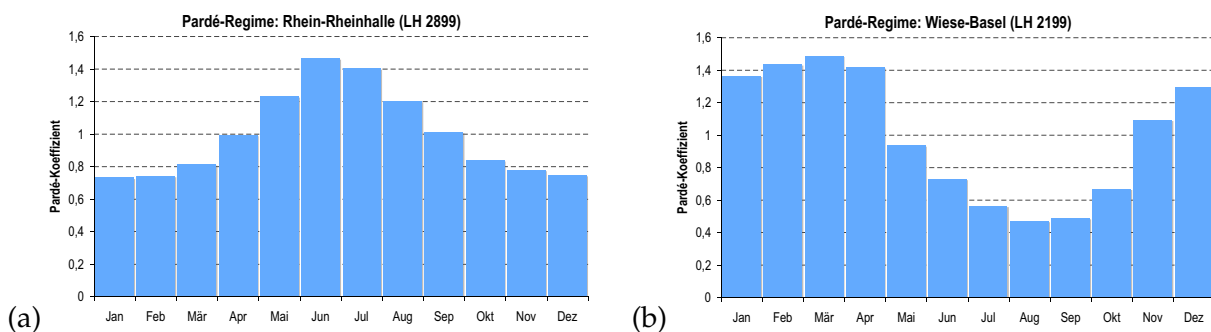


Abbildung 9.3: Pardé-Regime des (a) Rheins am Pegel Rheinhalle (LH 2899) und der (b) Wiese am Pegel Basel (LH2199) (Datengrundlage: BAFU, 2007).

Ortsbereich zusammen. Der Aubach ist ebenfalls verdolt und fließt erst kurz vor der Einmündung in den Riehenteich wieder oberirdisch. Er verfügt seit 2006 über eine 320 m lange Hochwasserentlastung, die das Wasser im Hochwasserfall direkt der Wiese zuführt.

Der Alte Riehenteich mündet wieder im Neuen Riehenteich. Er fließt dem 1923 in Betrieb genommenen Kleinkraftwerk, welches sich im WSG befindet, zu. Nach der Passage des Kraftwerkes fließt er unterirdisch und mündet unterhalb des Tierparks Lange Erlen wieder in der Wiese. Ufer und Gewässerbett sind auf weiten Strecken mit Beton befestigt (KANTON BASELSTADT, 2007b). Die Ufereinfassungen des Neuen Riehenteiches befinden sich in schlechtem Zustand und die Betonsohle erweist sich als sanierungsbedürftig. Zur Zeit der Abgabe dieser Diplomarbeit begannen durch die IWB Arbeiten am Neuen Riehenteich, um das Gewässerbett zu sanieren und im Zuge dieser Maßnahmen naturnäher zu gestalten (IWB, 2007a).

Der regionale Grundwasserabstrom fließt dem Rhein zu. Der Rhein mit dem Basler Rheinknie weist an dieser Stelle ein oberirdisches Einzugsgebiet (A_{EO}) von ca. 36000 km² auf. Das Regime des Rheins am Pegel Rheinhalle ist nivo-pluvial (Abb. 9.3) mit dem Juni als abflusstärksten Monat. Am Wasserkraftwerk Birsfelden, kurz oberhalb des Pegels Rheinhalle, wird der Rhein möglichst konstant auf 254,25 m ü. M. gestaut (KRAFTWERK BIRSFELDEN AG, 2007).

Tab. 9.1 gibt einen Überblick über die hydrologischen Kennwerte und Abb. 9.3 zeigt die Regime von Wiese und Rhein.

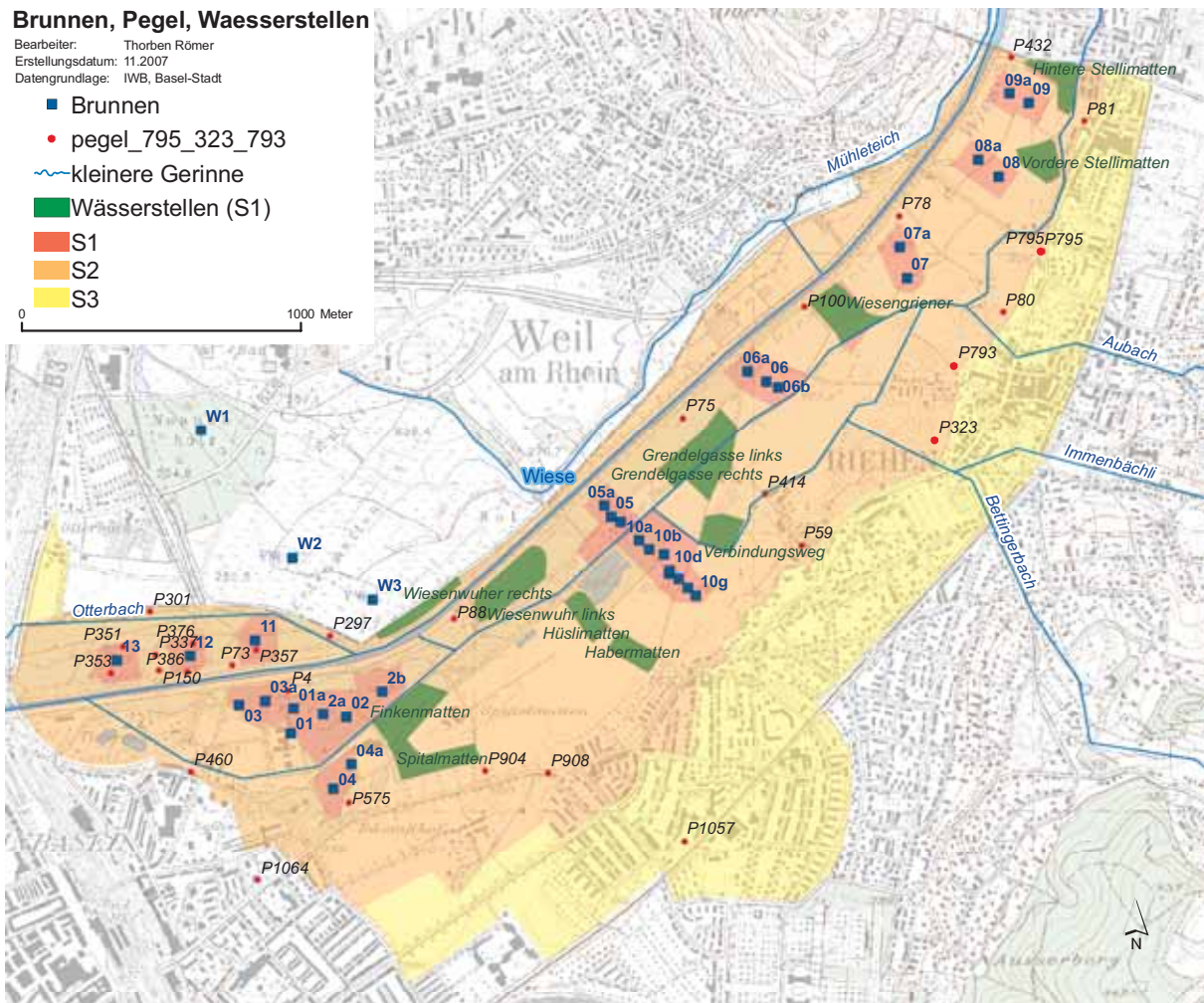


Abbildung 9.4: Lange Erlen: Brunnen, Pegel, Wässermatten - Übersicht

9.1.4.2 Grundwasserneubildung und künstliche Grundwasseranreicherung

Seit weit über hundert Jahren wird in den Langen Erlen künstliche Grundwasseranreicherung zur Sicherstellung der Trinkwasserversorgung von Basel betrieben. Die natürliche Grundwasserneubildung sowie infiltrierende Verhältnisse der Wiese reichen nicht aus, um eine nachhaltige Grundwasserbewirtschaftung der Langen Erlen zur Wasserversorgung von Basel zu gewährleisten. ZECHNER (1996) leitet die natürliche Grundwasserneubildung aus Lysimetermessungen am Observatorium Bingen ab. Je nach Landnutzung und Überbauungsgrad wird eine direkte Grundwasserneubildung von 10 bis 30 % der mittleren, 756 mm/a betragenden Niederschlagsmenge angenommen (Tab. B.4).

Mit der Bevölkerungszunahme Ende des 19. Jahrhunderts wurde 1878-1882 das erste Grundwasser-Pumpwerk in den Langen Erlen errichtet. Zunächst diente das Pumpwerk zur Versorgung von Kleinbasel. Eine schrittweise Erweiterung folgte. Der Zusammenhang zwischen Wiesenbewässerung aus landwirtschaftlichen Zielen und der daraus resultierenden Anreicherung des Grundwassers ist zunächst zufällig erkannt worden, führte jedoch zu einem empirisch betriebenen System von zeitbegrenzter Überflutung. Das Wasser, welches der Wässerung diente, wurde anfänglich aus dem Riehenteich, der hauptsächlich aus der Wiese gespeist wird, bezogen. Seit 1964 wird die Wässerung mit Rheinwasser betrieben (BITTERLI-BRUNNER, 1988, S. 59

ff.). Die Wasserentnahme aus dem Rhein geschieht im aufgestauten Bereich vor dem Kraftwerk Birsfelden. Die Rohwasserentnahme findet nur bei Trübungswerten von < 15 FNU statt (IWB, 2007b). Führt der Rhein Hochwasser, so ist wird auf Grund der Trübungswerte die künstliche Grundwasseranreicherung ausgesetzt.

Das aus dem Rhein entnommene Rohwasser durchläuft zunächst einen Schnellsandfilter zur Vorbehandlung und wird daraufhin an den in Abb. 9.4 ausgewiesenen Wasserstellen ausgebracht. Für die 25 aktiv betriebenen Wasserfelder ergibt sich für das Kalenderjahr 2006 eine Grundwasseranreicherung von knapp 13,5 Mio m³. Die modale Infiltrationsmenge beträgt hierbei 700 l/s (60480 m³/d). Das Volumen der Gesamtwässerung bewegt sich zwischen 400 und 900 l/s. Tab. 9.2 fasst für die einzelnen Wässermatten die Betriebsdaten von 2006 zusammen.

Der Betrieb der Wasserstellen wird größtenteils im Dreifeldersystem durchgeführt. Abwech-

Tabelle 9.2: Übersicht der Wässerungen im Kalenderjahr 2006 nach Wässermatten (Datengrundlage: IWB).

Wässermatte	Feld	Min		Max		Modus	
		(l/s)	(m ³ /d)	(l/s)	(m ³ /d)	(l/s)	(m ³ /d)
Finkenmatten	1	80	6912	180	15552	130	11232
Finkenmatten	2	80	6912	150	12960	100	8640
Grendelgasse L.	1	100	8640	120	10368	120	10368
Grendelgasse L.	2	100	8640	120	10368	100	8640
Grendelgasse L.	3	100	8640	120	10368	120	10368
Grendelgasse R.	1	120	10368	200	17280	120	10368
Grendelgasse R.	2	100	8640	200	17280	120	10368
Grendelgasse R.	3	100	8640	200	17280	120	10368
Habermatten	1	90	7776	160	13824	100	8640
Hintere Stellmatten	1	30	2592	40	3456	32	2772
Hintere Stellmatten	2	30	2592	40	3456	30	2592
Hintere Stellmatten	3	30	2592	40	3456	30	2592
Hüslmatten	1	90	7776	150	12960	100	8640
Spittelmatten	1	80	6912	170	14688	80	6912
Spittelmatten	2	80	6912	160	13824	130	11232
Verbindungsweg	1	60	5184	60	5184	60	5184
Verbindungsweg	2	50	4320	60	5184	60	5184
Verbindungsweg	3	50	4320	70	6048	60	5184
Vordere Stellmatten	1	40	3456	50	4320	40	3456
Vordere Stellmatten	2	40	3456	50	4320	40	3456
Vordere Stellmatten	3	40	3456	50	4320	40	3456
Wiesengriener	1	100	8640	100	8640	100	8640
Wiesengriener	2	100	8640	120	10368	100	8640
Wiesengriener	3	100	8640	100	8640	100	8640
Wiesenwuh L.	1	80	6912	250	21600	130	11232

selnd wird jeweils nur eines der drei Felder für einen Zeitraum von ca. 10 Tagen bewässert und anschließend das Feld gewechselt; somit ergeben sich zwischen den Wässerungen Pausen von ca. 20 Tagen. Die Infiltrationsgeschwindigkeit beträgt ungefähr 1-2 m/d. Bevor der freie Grundwasserspiegel erreicht wird, kommt es zunächst zur Passage einer Humus- und einer Auelehm-schicht von je 20-30 cm sowie einer ca. 2,5 m mächtigen Kies-Sandschicht (RÜETSCHI, 2004, S. 19). Der auf Erfahrungswerten beruhende Betriebszyklus hat sich als vorteilhaft erwiesen. Aufgrund der recht kurzen Wässerungsperioden und den daran anschließenden Wässerpausen kommt es zu keiner - die Infiltrationskapazität mindernden - Ausbildung eines Biofilms. Der Bewuchs der Wasserstellen, der sich vorwiegend aus Hybridpappeln, Eschen, Erlen und Weiden zusammensetzt, beugt durch die Abschattung ebenfalls einer Biofilmbildung vor. Die Aktivität durch Bodenlebewesen bleibt erhalten. Biogene Makroporen weiten sich auf die gesamte Bodenmächtigkeit aus. Der Betrieb der künstlichen Grundwasseranreicherung hat sich somit als nachhaltig erwiesen (RÜETSCHI, 2004, S. 323).

9.1.4.3 Entnahmen

Die Entnahmen im Gebiet der Langen Erlen beliefen sich im Kalenderjahr 2006 auf 14,7 Mio m³ und liegen damit etwas über den Werten der Grundwasseranreicherung. Das System der Brunnen und Nebenbrunnen, die meist über Hebersysteme betrieben werden, ist in den Langen Erlen nach und nach gewachsen und passte sich damit an den stetig steigenden Trinkwasserbedarf der Region an (ZECHNER, 1996). Tab. B.2 stellt die Parameter und Daten der Brunnen des WSG Lange Erlen im Überblick zusammen.

9.1.4.4 Konzeptmodell

Die allgemeinen Informationen, die hydrologischen sowie die hydrogeologischen Ausführungen, können nun abschließend in einem Konzeptmodell des Untersuchungsgebietes zusammengefasst werden. Es bestehen mehrere Unsicherheiten, die auch durch bisherige Voruntersuchungen und Modellierungen nicht vollständig geklärt werden konnten. Die Zuflüsse des Dinkelberges in ihrer Menge als auch in der räumlichen Ausdehnung sind unzureichend bekannt, ebenso sind die Zuflüsse vom Tüllinger Berg weitestgehend unklar.

Zentrale Merkmale des betrachteten Systems Lange Erlen sind sowohl die künstliche Grundwasseranreicherung als auch die Fluss-Grundwasser-Interaktion der Wiese. Beide Aspekte sind stark instationär und werden als zentrale Elemente ausgewiesen, die sich auf die zu ermittelnden Altersverteilungen im Gebiet der Langen Erlen auswirken können.

9.2 AEM-Modellierung

Die AEM-Modellierung erfolgte zu weiten Teilen vor dem Hintergrund des in Kap. 5.3 beschriebenen konzeptionellen Ansatzes. Es wurde dabei auf verschiedene Datensätze zurückgegriffen.

9.2.1 Datenquellen

Neben den direkt durch die IWB erhaltenen Daten zu Entnahmemengen und Wässerungen, dienten vor allem die Publikationen der bisher durchgeführten Grundwassermodellierungen (ZECHNER, 1996; HUGGENBERGER und GULDENFELS, 2003b) im Gebiet der Langen Erlen als Datengrundlage. Da die bisherigen FDM-Modelle in ihrer Ausdehnung auf das Gebiet der Langen Erlen begrenzt sind, waren zusätzliche Quellen erforderlich, um die Aquifergeometrie im regionalen Maßstab abzuleiten. Die FISCHER ET AL. (1971) beiliegenden Zusatzkarten sowie Daten des Interreg II Projektes konnten hierfür genutzt werden.

9.2.2 Modellgeometrie

Zunächst wird ein unendlich ausgedehnter Aquifer definiert. Variieren k_f -Werte und die Werte der n_{eff} deutlich, so können Inhomogenitäten genutzt werden, um dies zu berücksichtigen.

Neben mehreren, durch ZECHNER (1996) ausgewerteten, Pumpversuchen wurden Leitfähigkeiten und effektive Porositäten aus der durch HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003b) durchgeführten Grundwassermodellierung übernommen. Die im engeren Gebiet der Langen Erlen variierenden n_{eff} und k_f -Werte können in 14 Zonen aufgeteilt werden. Nach der Vorgehensweise der AEM lassen sich diese Bereiche über Inhomogenitäten abbilden. Im Gebiet der Langen Erlen war eine weitere Aufteilung in Inhomogenitäten notwendig, da es sich um eine kleinräumig stark wechselnde Aquifergeometrie handelt. Bisher wurden noch keine AE in Modellen umgesetzt, die z.B. einen geneigten Aquifer oder sich innerhalb des Aquifers kontinuierlich ändernde Parameter berücksichtigen können (STRACK, 2006). Geneigte Aquifere werden daher mittels mehrerer aneinander grenzender Inhomogenitäten abgebildet (FITTS und STRACK, 1996; BAKKER, 2007a). Je stärker der Aquifer geneigt und je geringer seine Mächtigkeit dabei ist, desto mehr Inhomogenitäten werden notwendig, um den Fluss zufriedenstellend abzubilden.

Mehrere Aquifer-Kombinationen wurden aufgestellt. Der in Modelllauf Nr. 10 eingesetzte

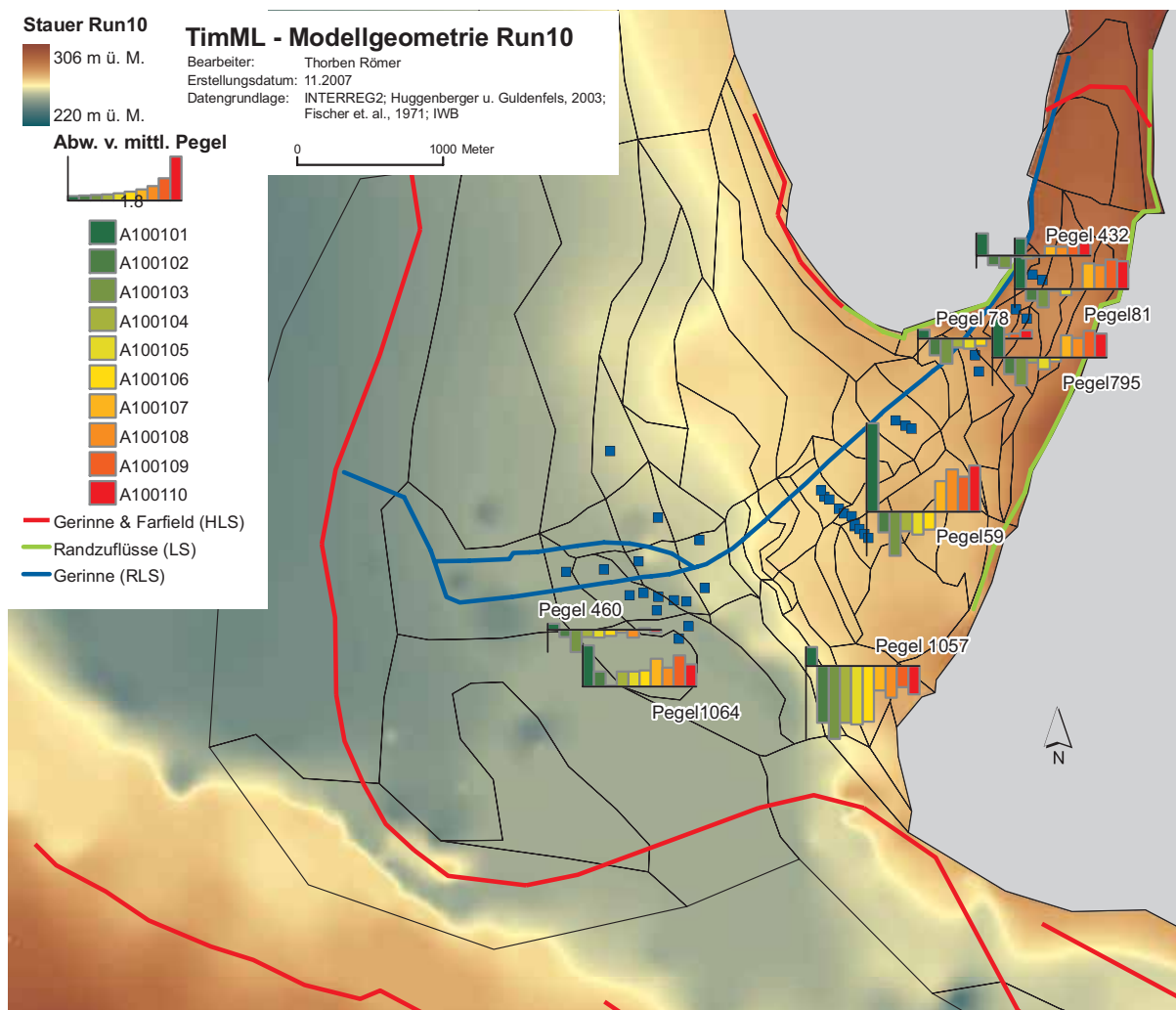


Abbildung 9.5: Verschiedene Parameterkombinationen des Modelllaufes 10 führten zu unterschiedlichen Abweichungen vom mittleren Pegel der Referenzpegel (eingezeichnete Balkendiagramme); Stauergeometrie des Modelllaufes 10; die Inhomogenitäten sind durch schwarze Polygone verzeichnet.

(Abb. 9.5) Aufbau erwies sich am geeignetsten. Punkt- und Isolinieninformationen wurden im GIS in Rasterinformation umgerechnet. Für die definierten Inhomogenitäten wurden in einem anschließenden Arbeitsschritt Gebietsmittel des Stauers und des mittleren Grundwasserspiegels berechnet. Diese Ergebnisse konnten dann direkt in Tim^{ML}-Input-Shapefile Verwendung finden. Im Hinblick auf die Zahl der getesteten Aquifergeometrie-Konstellationen erwies sich diese Vorgehensweise als effektiv und führte zu reproduzierbaren Ergebnissen. Die Ableitung der Aquifergeometrie erwies sich als schwierigster Arbeitsschritt der AEM-Modellierung. Das zunächst durch die als undurchlässig zu betrachtenden Erhebungen Dinkelberg und Tüllinger Berg eingefasste Wiesetal und der an das Gebiet der Langen Erlen anschließende Übergang in die Oberrheinebene lassen sich nur schwer mittels eines AEM-Modells abbilden. Eine große Anzahl an Inhomogenitäten musste eingesetzt werden. Diese in Abb. 9.5 dargestellte massive Diskretisierung ist nicht im eigentlichen Sinne der AEM und führt aufgrund der stark ansteigenden Elementanzahl zu einer merkbar ansteigenden Modelllaufzeit. Aufgrund der Neigung des Aquifers und der geringen Mächtigkeit ist es nicht möglich, das Tim^{ML}-Modell als Mehrschichtmodell aufzusetzen. Aufgrund der Art der in Tim^{ML} implementierten Elemente darf es zu keinen Diskontinuitäten in den Schichten kommen; dies ist in den Langen Erlen nicht realisierbar. Eine weitere Diskretisierung, um zwei oder mehrere Schichten einzusetzen, wäre auch aufgrund der weiteren Erhöhung der Rechenzeit nicht vertretbar gewesen.

Für die Ausweisung einer hydrogeologischen Schichtung innerhalb des Schotteraquiferes ist in den Langen Erlen nicht genügend Information über den Untergrund vorhanden. Eine AEM Mehrschichtmodellierung - auch mit einheitlichen Kennwerten für alle Schichten - kann dennoch sinnvoll sein, da die Abstände zwischen den Brunnen und der Wiese so gering werden können, dass eine eventuelle Verletzung der Dupuit-Forchheimer-Annahme vorliegen kann. BAKKER (2001) verwendet hierfür bis zu zehn Schichten in der Nähe eines Brunnens, um dreidimensionale Aspekte zu berücksichtigen.

9.2.3 Farfield

Die Grundwasserstände im *farfield* wurden, der Methode nach HAITJEMA (1995) folgend, über *head-line-sinks* (HLS) kontrolliert. Für den Rhein wurde Mittelwasser nach BAFU (2007) definiert. Die Wasserstände entlang des Rheinknies konnten aufgrund von Kotten-Informationen an den Rheinbrücken interpoliert werden (RHEINSCHIFFFAHRTSDIREKTION BASEL, 2006). Im oberen Wiesetal und in der Rheinebene wurden HLS als Festpotential auf die mittleren Grundwassergleichen (ermittelt durch FISCHER ET AL. (1971)) gesetzt. Die Grundwasserneubildung wurde nach Tab. B.4 für das gesamte Modellgebiet als *polygon-area-sinks* (PAS) berücksichtigt.

9.2.4 Nearfield

Im *nearfield* wurden die Wasserstellen ebenfalls als PAS in das Modell aufgenommen. Otterbach und Wiese wurden als *resistance-line-sinks* (RLS) definiert. Die Widerstandszeit c wurde aufgrund der durch HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003b) ermittelten vertikalen hydraulischen Leitfähigkeit (k_{fv}) der Wiesesohle von $4,2 \times 10^{-6}$ m/s und einer angenommenen Mächtigkeit von 0,3 m auf 0,827 Tage und in den aufgestellten Szenarien um diesen Wert variiert.

Für den Otterbach wurde ein Widerstand von 2 Tagen angenommen.

Die Zuflüsse des Dinkelberges und des Tüllinger Berges befinden sich ebenfalls im *nearfield* und wurden über *line-sinks* (LS) repräsentiert. Eine konstante Flussrate wurde vorgegeben und innerhalb der einzelnen Modellläufe modifiziert. Die Infiltration erfolgt bei *line-sinks* über die gesamte Mächtigkeit des Aquifers.

Brunnen wurden aufgrund des Einschichtaufbaus, als über die gesamte Aquifermächtigkeit verfiltert repräsentiert. Die Brunnengeometrie wurde aus Brunnenausbauplänen der IWB abgeleitet.

9.2.5 Validierung des Grundwassermodells

Die Vorgehensweise bei der Modellierung folgt der durch HAITJEMA (1995) beschriebenen Methode. Es wird keine "best-fit"-Modellierung durchgeführt, sondern die Modelle werden schrittweise erweitert und jeweils auf Hypothesen getestet (HAITJEMA, 1995, S. 3). Das AEM-Modell wurde nach und nach zunächst für einen Mittelwasser-Zustand aufgebaut und anhand von Messdaten des Pegelmessnetzes validiert. Die Modellgeometrien des Modelllaufes 07 und 10 lieferten akzeptable Ergebnisse und wurden im Folgenden zur Ausweisung der Altersverteilungen als auch zur Ermittlung der potentiellen Fließpfade für die ERGO-Verdachtsflächen genutzt.

9.2.6 Szenarien

Damit innerhalb einer stationären Betrachtung verschiedene Systemzustände und somit mehrere sich ergebende Altersverteilungen an einem Brunnen betrachtet und verglichen werden können, wurden für die einzelnen Modellläufe jeweils Szenarien abgeleitet. Für den Modelllauf 10 wurden die vollständigen Parametertabellen im Anhang B aufgeführt. Die Parameter orientieren sich an den Betriebsdaten der IWB und versuchen so verschiedene Systemzustände abzubilden.

Die Brunnen-Szenarien leiten sich von der praktisch maximalen Entnahmemenge ab. 50 % sowie 75 % dieser maximal beobachteten Entnahme erweisen sich als realistische Entnahmemengen im Normalbetrieb der Trinkwasserproduktion.

Der Randzufluss des Dinkelberges wurde innerhalb der bisher veröffentlichten Bereiche variiert. Der Widerstand des Gerinnebetts wurde aus HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003b) übernommen und mit +/- 10 % variiert. Die vollständige Aufnahme der Parametertabellen aller Modellläufe war aufgrund des Umfangs der Arbeit in der gedruckten Form nicht möglich. Die beigelegte CD-ROM enthält alle Parametertabellen der ausgewerteten Modellläufe 07 und 10 sowie die dazugehörigen Tim^{ML}-Input-Shapefiles und Modellausgaben.

9.3 Modellergebnisse

Bei der Auswertung der Modellergebnisse zeigen sich die besonderen Rahmenbedingungen im WSG Langen Erlen. In den verschiedenen Szenarien kann klar zwischen zwei Fällen unterschieden werden. (a) Szenarien mit aktiver Grundwasseranreicherung und (b) Szenarien ohne.

Die Brunnen in der unmittelbaren Nähe der Wiese stehen im engen Kontakt mit dem Wieseinfiltrat. Brunnen im östlichen Untersuchungsgebiet erhalten Komponenten aus dem Zufluss des Dinkelberges. Die ermittelten In und Exfiltrationen der Wiese für die einzelnen Modellläufe ordnen sich in Ergebnisse vorheriger Studien im Projektgebiet ein (Tab. 9.4). Tab. 9.3 zeigt für die einzelnen Szenarien des Modelllaufes 10 die Ergebnisse sowohl für die betrachteten Gerinne Wiese als auch Otterbach. Die Tabelle enthält zudem die Flussraten der Szenarien, die für Tüllinger Berg und den Dinkelberg angenommen wurden. Tracerversuche durch HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003a) haben für die Brunnengruppe 3 eine minimale Fließzeit des Tracers von 23,5 Stunden und eine mittlere Fließzeit von zwei Tagen im Falle eines mittleren Hochwassers der Wiese gezeigt. Für alle Modellläufe ohne Grundwasseranreicherung ergeben sich für die direkt an der Wiese liegenden Brunnengruppe 3 Partikel Tracking Ergebnisse, die zu 100 % Fließzeiten unter zehn Tagen bis maximal < 50 Tage betragen. Die Ausweitung einer Altersverteilung erwies sich in diesen Fällen als nicht praktikabel. Auch aufgrund der unter Umständen verletzten Dupuit-Forchheimer Annahme sind die vorliegenden Modellläufe nur bedingt für Brunnen einzusetzen, die direkt an die Wiese angrenzen.

Tabelle 9.3: Aufstellung der Gesamtinfiltration bzw. Exfiltration der *line-sinks* im nearfield.

In-Ex-filtration der LS-Elemente im <i>nearfield</i>				Modelllauf									
Element:	Parameter	Einheit	Länge (km)	100101	100102	100103	100104	100105	100106	100107	100108	100109	100110
Tüllinger Berg	Fluss	l/s	1577	1	1	1	2	1	2	2	2	2	2
Dinkelberg	Fluss	l/s	3788	100	100	100	139	100	139	139	139	139	139
Wiese	strength	m ³ /(d*m)		-7	7	12	10	10	10	1	2	2	2
	Fluss	l/s	7443	-607	642	1066	838	868	838	97	147	146	196
Otterbach	strength	m ³ /(d*m)		2	3	3	3	3	3	3	3	3	3
	Fluss	l/s	1839	48	56	67	55	55	59	54	57	53	57

Tabelle 9.4: Spezifische Infiltrationen verschiedener alpiner und voralpiner Flüsse (nach: HUGGENBERGER und GULDENFELS, 2003b, S. 17).

Fluss	Breite	Q [m ³ d ⁻¹ m ⁻¹]	Q' [m ³ d ⁻¹ m ⁻²]	Datum
Poschiavino - Permunt	10	4-7 ; 20-40	0,4-0,7 ; 2-4	1989 ; 1990
Limmat - Zürich	30	9-10	0,3	-
Limmat - Hardhof	30	30	1	-
Limmat - Dietikon	30	4	0,1	-
Glatt - Glattfelden	18	1-2	0,05-0,1	1979
Sissle - Eiken	12	1-2	0,08-0,2	1976
Töss - Linsental	20	1	0,05	1988
Rhein - Lustenau	65	200	3	2000
Thur - Grüneck-Feldi	50	15	0,3	-
Wiese - Lange Erlen	25	14	0,6	2003

9.3.1 Altersverteilungen

Die Ermittlung der Altersverteilungen fand in den Langen Erlen nur eingeschränkt statt. Dies lässt sich an den in Tab. 9.5 ausgewiesenen Altersteilungen verdeutlichen. Keiner der betrachteten Brunnen wies Partikellaufzeiten von weit größer einem Jahr auf. Szenarien mit aktiver künstlicher Grundwasseranreicherung führen zu Ergebnissen in denen 90-100 % aus jüngsten Komponenten der Wässerstellen stammen. Partikellaufzeiten > 50 Tage traten kaum auf. Szenarien mit inaktiver Grundwasseranreicherung weisen ebenfalls kaum Partikellaufzeiten > 50 Tagen auf. Nur sehr wenige Partikel haben Laufzeiten > 250 Tagen (siehe auch: Abb. 9.6). Szenarien ohne künstliche Grundwasseranreicherung führen im Fall der Brunnengruppe da-

Ergebnisse der Partikel-Simulationen

(keine Berücksichtigung der Bodenpassage)

ohne Anreicherung						mit Anreicherung					
		Tage						Tage			
		0-10	10+50	50+365	365			0-10	10+50	50+365	365
Brunnen	10a	0%	100%	0%	0%		10a	77%	23%	0%	0%
	10b	0%	77%	33%	0%		10b	100%	0%	0%	0%
	10c	0%	0%	100%	0%		10c	100%	0%	0%	0%
	10d	0%	0%	100%	0%	100.00% Dinkelberg	10d	97%	3%	0%	0%
	10e	0%	0%	100%	0%	87.00% Dinkelberg	10e	80%	17%	3%	0%
	10f	0%	0%	100%	0%	100.00% Dinkelberg	10f	37%	63%	0%	0%

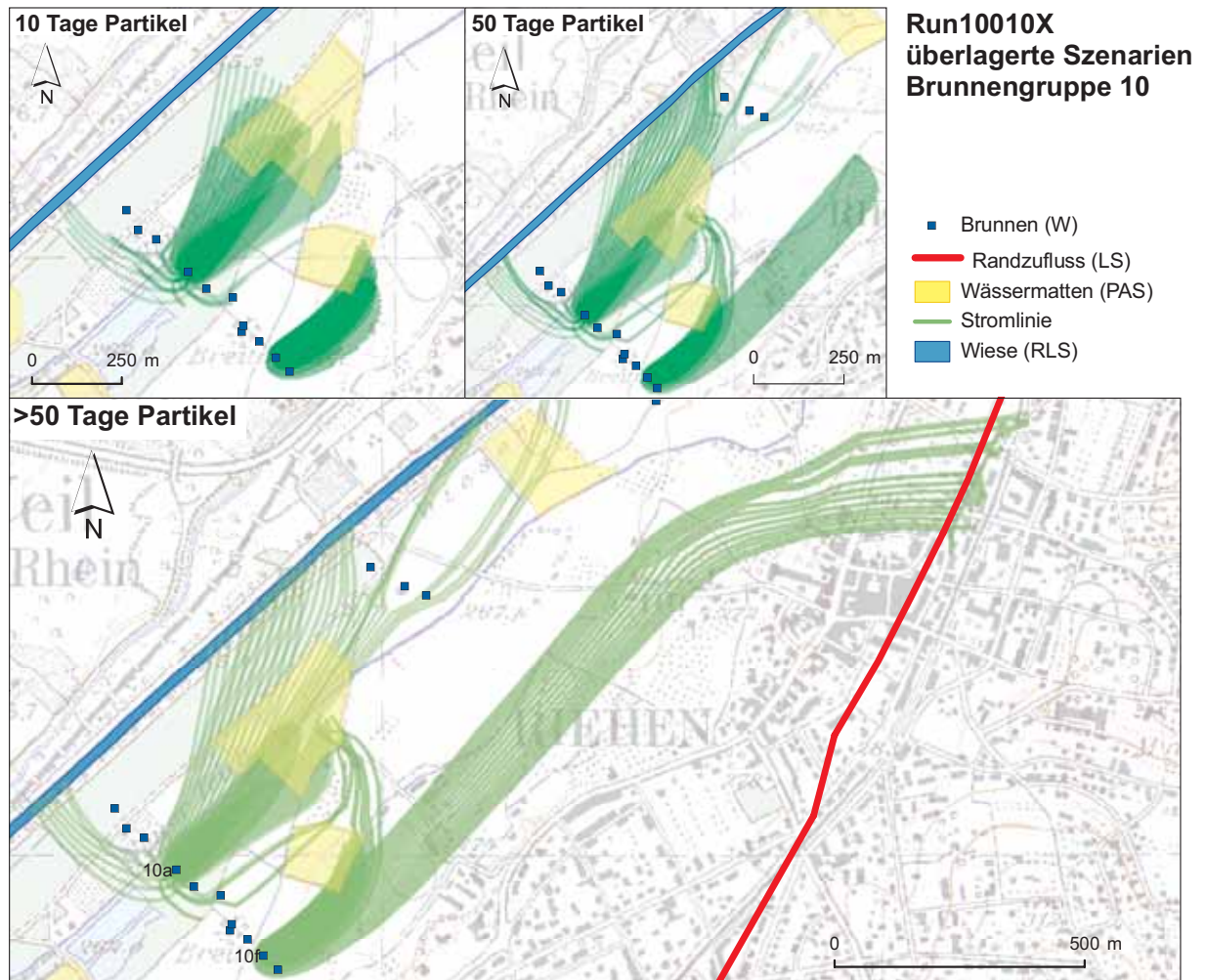


Abbildung 9.6: Szenarien am Brunnen 10a und 10f überlagernd dargestellt für Partikellaufzeiten von 10, 50 und > 50 Tagen.

darstellen könnten. Anzumerken ist hierbei, dass die dispersiven Prozesse durch AEM nicht berücksichtigt werden können.

9.4 Fazit

Das Modellgebiet Langen Erlen befindet sich an der äußersten Südostbegrenzung der Oberrheinebene. Der Schotteraquifer wird zunächst von Tüllinger Berg und Dinkelberg im Nordosten der Region eingerahmt und öffnet sich dann fächerartig gegen Richtung Oberrheinebene. Die künstlichen Grundwasseranreicherungen mit rund 13-14 Mio m³ im Jahr stellen den größten Anteil des geförderten Grundwassers dar. Die Entnahmen liegen mit 14-15 Mio m³ wenig darüber. Die Infiltrationsbedingungen der Wiese wurden für verschiedene Szenarien ermittelt. Weitgehend unbekannt sind die Mengen der Zuflüsse über die Lokalschotter des Dinkelberges als auch der Quellhorizonte am Hang des Tüllinger Berges. Die Anwendung der AEM auf das Projektgebiet der Langen Erlen erwies sich als komplex. Der Aufbau des Modells wurde durch die komplizierte Stauergeometrie des Gebiets bestimmt und führte zu einer weitreichenden Diskretisierung durch Inhomogenitäten. Modellergebnisse aus Voruntersuchungen (ZECHNER (1996), HUGGENBERGER und GULDENFELS (2003b)) sowie Grundwasserpegelstände der Regi-

Run100107 - Anreicherung aktiv - Brunnengruppe 10

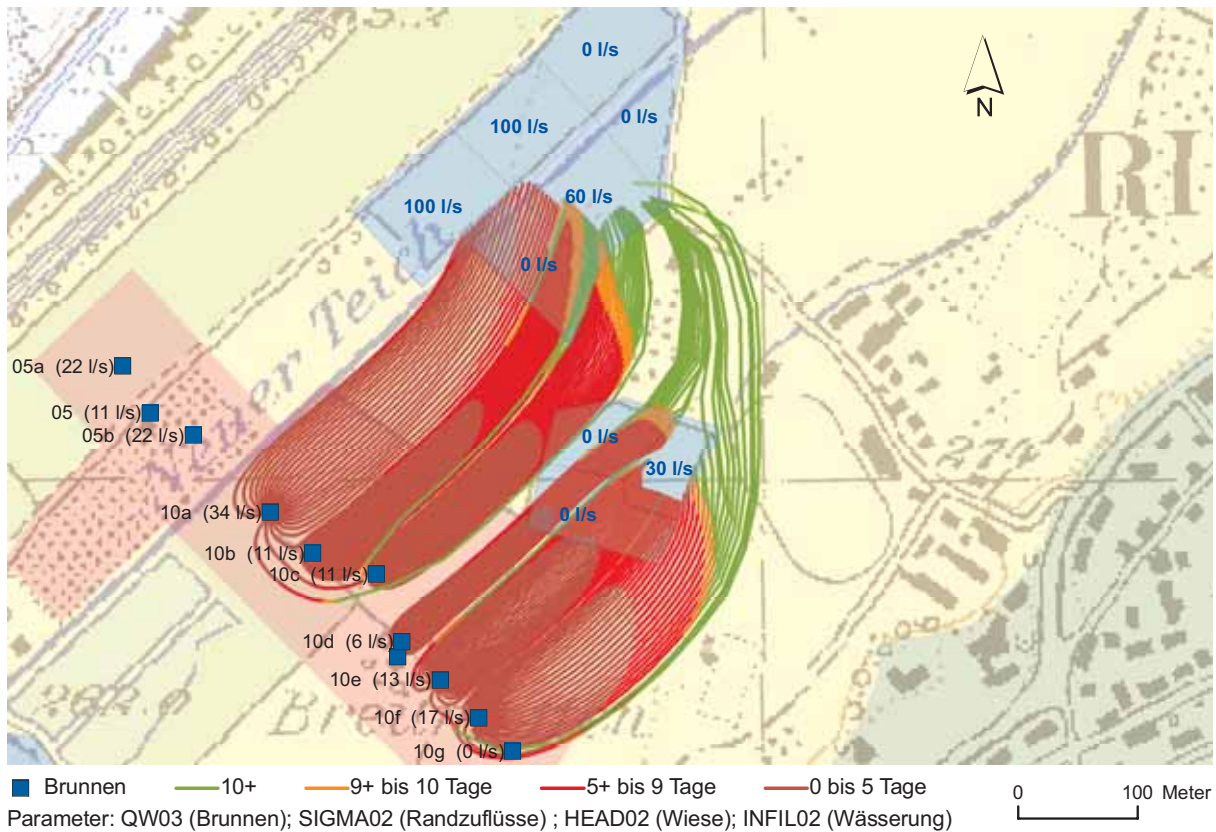


Abbildung 9.7: Brunnengruppe 10, Modelllauf 10 (Anreicherung aktiv).

on (KANTON BASEL-STADT (2007a) konnten genutzt werden, um plausible Modellergebnisse zu erzielen. Die Ermittlung der Altersverteilungen ergab, dass in allen eingesetzten Szenarien vorwiegend junge und jüngste Komponenten vorliegen. Die Infiltration der Wiese und die künstliche Grundwasseranreicherung erwiesen sich, neben dem Zufluss des Dinkelbergs, als Hauptherkunftsräume. Partikel die aus der oberstromigen Wiesetalregion stammten konnten im Kontext einer Altersstruktur nicht interpretiert werden, da der weitere Verlauf dieser Partikel ungewiss ist.

10 Diskussion und Ausblick

Die Anwendung auf das Gebiet der Langen Erlen hat ergeben, dass bisher verwendete Alterskategorien in diesem Projektgebiet in weiten Teilen nicht einsetzbar waren. Vor allem jüngste Komponenten dominieren die Partikel Trackings. Die mittleren Alter der seitlichen Zuflüsse des Dinkelberges sind unbekannt. Lediglich der Anteil der Dinkelbergkomponente konnte ausgewiesen werden. Im Hinblick auf die Interpretation ermittelten Altersverteilungen erweist sich dies problematisch. Weitere Untersuchungen und eventuelle Kompartimentmodell-Betrachtungen werden notwendig, um die reale Altersverteilung an den Brunnen auszuweisen. In den hier durchgeführten Untersuchungen musste daher davon ausgegangen werden, dass es sich bei den Zuflüssen um Komponenten handelt, denen das Alter 0 zugeordnet wird. Es gilt an dieser Stelle anzumerken, dass alle hier präsentierten Ergebnisse im nächsten ERGO Projektabschnitt der Validierung durch Multi-Tracer-Analysen bedürfen. Neben der Nutzung der natürlichen Tracer muss die Interpretation schon durchgeführter Versuche mit künstlichen Tracern abgewogen werden. Partikellaufzeiten von 2-10 Tagen sollten sich über natürliche Tracer nicht verifizieren lassen.

10.1 Grenzen der AEM-Modellierung

Im Modellgebiet der Langen Erlen zeigen sich die Grenzen der AEM. Lösungen, welche mittels einer AEM Modellierung erzielt werden, können nur in Bereichen des Modellgebiets als interpretierbar angesehen werden, in denen auch genügend analytische Elementen (AE) definiert wurden, um die Wirklichkeit zu repräsentieren. Diese Aussage darf nicht dazu führen, Bereiche mit hoher AE-Dichte mit einem besonders „genauen“ Modellergebnis gleichzusetzen. Sowohl im Prozess der Modellierung als auch in den Ergebnissen zeigen sich klar die Grenzen und Möglichkeiten der AEM-Modellierung. Im Fall einer einfachen Hydrogeologie, mit beispielsweise einem mäßig geneigten Lockergesteinsaquifer und einer überschaubaren Anzahl an hydrogeologischen Singularitäten, kann die AEM uneingeschränkt empfohlen werden. Mit der in dieser Arbeit entwickelten Schnittstelle zu geographischen Informationssystemen lassen sich innerhalb weniger Stunden bis Tage Input-Dateien generieren, die schnell plausible Ergebnisse liefern können. Sobald die Lösung für einen Modelllauf gefunden wurde, kann diese jederzeit wieder aufgerufen werden. Ein erneuter Modelllauf zu einem späteren Zeitpunkt wird hinfällig. Falls ein komplizierter Modellaufbau erhöhte Rechenzeiten zur Ermittlung der Lösung beansprucht hat, kann dies von enormem Vorteil sein.

Die Anpassung der Aquifergeometrie und der Parametersätze erfordert in der jetzt vorliegenden Tim^{ML}-Version keine erweiterten Programmierkenntnisse mehr. Die Nutzung einer vertrauten GIS-Umgebung führt eindeutig zu einer verringerten Bearbeitungszeit.

Die Vorzüge der AEM werden in einigen Aspekten abgemildert. Die AEM kann bei komplexen

hydrogeologischen Fragestellungen nicht in allen Punkten anderen Methoden der Grundwassermodellierung als überlegen angesehen werden. Komplexe Aquifergeometrien, hierbei besonders Neigungen der Basis, erfordern eine zunehmende Diskretisierung des Modellgebiets, die nicht im ursprünglichen Sinne der AEM liegt. Modellgeometrien mit einer großen Anzahl an Inhomogenitäten führen zu einer sich schnell erhöhenden Laufzeit.

Bei der Nutzung der AEM muss auch immer beachtet werden, dass Einsatz und Interpretation die gleiche hydrogeologische Sachkenntnis wie bei anderen Methoden der Grundwassermodellierung erfordert (HAITJEMA, 1995, S. 3).

10.2 Hinweise zu weiteren Arbeiten

Vor allem aufgrund der begrenzten Bearbeitungszeit und dem damit verbunden Umfang dieser Arbeit konnten verschiedene Aspekte, deren zusätzliche Beachtung jedoch wünschenswert ist, nicht berücksichtigt bzw. implementiert werden. Einige Aspekte werden in diesem Kapitel daher diskutiert, und es werden Hinweise zur Umsetzung in fortführenden Arbeiten gegeben.

10.2.1 Implementierung einer automatisierten Schutzzonenausweisung

Die in dieser Arbeit durchgeführte Ausweisung von Bereichen gleicher Fließzeit erfolgte nach den durch BAKKER und STRACK (1996) ausgewiesenen vier Teilschritten: (1) Eine gewisse Anzahl an Stromlinien bzw. Partikel wird gleichmäßig um den Brunnen herum verteilt gestartet. (2) Die Partikel werden mittels negativer Zeitschritte entgegen der Strömungsrichtung bewegt. (3) Zeiten gleicher Fließzeit der Partikel werden auf den Stromlinien ausgewiesen. (4) Die Punkte gleicher Fließzeit werden verbunden, um so das Einzugsgebiet des Brunnens für bestimmte Fließzeiten abzuschätzen.

Wird das Einzugsgebiet eines Brunnens für den Zeitpunkt (t) bestimmt, so muss möglichst auch der *untere Kulminationspunkt* (auch *Stagnationspunkt*) (S) berücksichtigt werden. Wird die *Trennstromlinie*, auch bezeichnet als *Kulminationslinie*, eines Brunnens mittels der vorhergehend beschriebenen Methode ermittelt, so ist es nur mit einer hohen Anzahl an Stromlinien bzw. Partikel möglich, Punkt S des Brunneneinzugsgebietes zu bestimmen (BAKKER und STRACK, 1996). Abb. 10.1 zeigt die Einzugsgebiete zweier Brunnen. Die Abbildung verdeutlicht, dass die Genauigkeit der Einzugsgebietsausweisung von der Partikelanzahl abhängt; zudem wird deutlich, dass S nicht korrekt erfasst wird. Die ermittelte Einzugsgebietsfläche wäre somit fehlerhaft. Abhilfe kann nur ein effektives Auffinden des S schaffen. Ist S ermittelt, so kann das Einzugsgebiet des Brunnens theoretisch mittels zweier Partikel, welche den Verlauf der beiden Trennstromlinien nachzeichnen, erfolgen (KINZELBACH und RAUSCH, 1995, S. 203 ff.). Die konkrete Implementierung eines Ansatzes, der effektiv Stagnationspunkte auffindet und innerhalb der automatisierten Schutzzonenausweisung berücksichtigt, wird in BAKKER und STRACK (1996) ausführlich beschrieben. Die Umsetzung kann auch im Rahmen der hier angewandten Methode eine Verbesserung der Modellierungsergebnisse liefern.

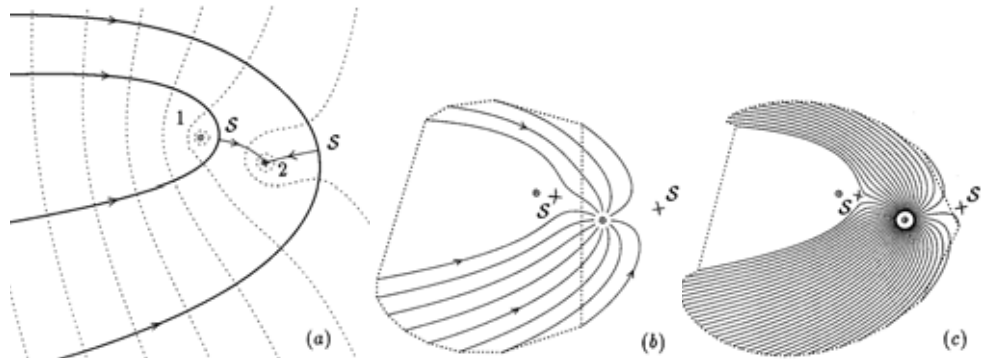


Abbildung 10.1: (a) Konturlinien der Standrohrspiegelhöhen (gepunktet), Stromlinien (durchgezogen) und Stagnationspunkte (S). Einzugsgebiet des Brunnens (gepunktet) zur Zeit (t), ermittelt mit (b) 12 Stromlinien (durchgezogen) und (c) 48 Stromlinien (nach: BAKKER und STRACK, 1996).

10.2.2 Implementierung von *flux inspection lines*

Flux inspection lines, welche innerhalb des Partikel Trackings Punkte gleicher Fließzeit verbinden und den Fluss normal zu ihrer Ausrichtung wiedergeben, ermöglichen es, Aspekte des Wasserhaushaltes besser betrachten zu können.

Im Kontext der komplexen Aquifergeometrie war es nicht möglich, *flux inspection lines* in Tim^{ML} zu implementieren und im Sinne des Projektes ERGO zu nutzen. *Flux inspection lines* können aber weiterhin als nützlich und hochwirksam in Ihrer Anwendung in simpleren hydrogeologischen Rahmenbedingungen gesehen werden. Eine Implementierung und ein Einsatz innerhalb des Projektes ERGO kann als wünschenswert angesehen werden.

10.3 Abschließende Bemerkungen

In der vorliegenden Diplomarbeit konnte die im Projekt ERGO angewandte Methode der Risikoabschätzung für Trinkwasserversorgungen über die Berücksichtigung der hydrologischen Dynamik eingehend diskutiert, für die praktische Anwendung weiterführend implementiert und größtenteils automatisiert werden. Im Hinblick auf das Gesamtprojekt hat sich die Wahl des AEM-Grundwassermodells Tim^{ML} als vorteilhaft erwiesen. Die Vorteile, die durch die einfach zugängliche Programmstruktur und die freie Verfügbarkeit der Software bestehen, überwiegen im Vergleich zu weiteren existierenden AEM-Modellen. Tim^{ML} wurde für den weiteren Einsatz im Projekt ERGO angepasst, erweitert und angewandt. Auf weitere Entwicklungsmöglichkeiten konnte dabei hingewiesen werden.

Die Anwendung im Pilotgebiet Lange Erlen hat es ermöglicht, die Grenzen des Einsatzes der AEM-Modellierung im Zuge des Projektes ERGO aufzuweisen. Die Fehlerquellen und die Unsicherheiten, die durch die vereinfachte Betrachtung einer komplexen hydrogeologischen Situation wie der in den Langen Erlen entstehen, fanden Berücksichtigung. Somit konnte auch eine Bewertung der getroffenen Aussagen vorgenommen werden.

Abschließend lässt sich festhalten, dass die hydrologische Dynamik als Parameter der Risikoabschätzung nur in Kombination aller im Projekt ERGO angewandten Methoden zu guten Ergebnissen führen kann. Die Grundwassermodellierung mittels AEM-Modellen ist hierbei ein entscheidender Baustein.

Literaturverzeichnis

- ADOLPH, G., KÜLLS, C., WILLSCHEID, A. (2007): Determination and validation of age structures as an improved measure of hydrological dynamics. Geophysical Research Abstracts, Vol. 9 (08013), sRef-ID: 1607-7962/gra/EGU2007-A-08013.
- ALLER, L., BENNET TRUMAN AND LEHR, J.H., PETTY, R.J. (1987): DRASTIC: A Standardized System for Evaluation Ground Water Pollution Potential using Hydrogeologic Settings. Tech. ber., U.S. EPA - United States Environmental Protection Agency, Washington, D.C., EPA/600/2-87/035.
- APPELO, C.A.J., POSTMA, D. (2005): Geochemistry, groundwater and pollution. Balkema, Leiden, Niederlande, 2. Aufl., 649 S.
- BAFU (Hrsg.) (2007): Hydrologisches Jahrbuch der Schweiz 2005. Umwelt-Wissen, Nr. 0713, Bundesamt für Umwelt, Bern, 502 S.
- BAKKER, M. (2001): An analytic, approximate method for modeling steady, three-dimensional flow to partially penetrating wells. Water Resources Research, Vol. 37 (5), S. 1301–1308.
- BAKKER, M. (2006a): An analytic element approach for modeling polygonal inhomogeneities in multi-aquifer systems. Advances in Water Resources, Vol. 29 (10), S. 1546–1555.
- BAKKER, M. (2006b): Analytic Element Modeling of Embedded Multiaquifer Domains. Ground Water, Vol. 44 (1), S. 81–85.
- BAKKER, M. (2007a): Schriftliche Kommunikation.
- BAKKER, M. (2007b): Tim^{ML} - A Multiaquifer Analytic Element Model - Version 3.0. Water Resources Section, Civil Engineering and Geosciences, Delft University of Technology, Delft, NL, URL: <http://bakkerhydro.org/timml/> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007).
- BAKKER, M., KELSON, V., ZAADNOORDIJK, W. (2005): Python tutorial for analytic element developers. URL: <http://bakkerhydro.org/timml/Python4aem.pdf> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007).
- BAKKER, M., STRACK, O.D.L. (1996): Capture zone delineation in two-dimensional groundwater flow models. Water Resources Research, Vol. 32 (5), S. 1309–1315.
- BAKKER, M., STRACK, O.D.L. (2003): Analytic elements for multiaquifer flow. Journal of Hydrology, Vol. 271 (1-4), S. 119–129.
- BAUER, S., FULDA, C., SCHAFER, W. (2001): A multi-tracer study in a shallow aquifer using age dating tracers ³H, ⁸⁵Kr, CFC-113 and SF₆ – indication for retarded transport of CFC-113. Journal of Hydrology, Vol. 248 (1-4), S. 14–34.
- BITTERLI-BRUNNER, P. (1988): Geologischer Führer der Region Basel, Nr. 19 IN Veröffentlichungen aus dem Naturhistorischen Museum Basel. Birkhäuser Verlag, Basel, 2. Aufl., 232 S.
- BROERS, H.P. (2004): The spatial distribution of groundwater age for different geohydrological situations in the Netherlands: implications for groundwater quality monitoring at the regional scale. Journal of Hydrology, Vol. 299 (1-2), S. 84–106.

- BUWAL (2004): Wegleitung Grundwasserschutz, Vollzug Umwelt. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft (BUWAL), Bern, CH, 141 S.
- BUWAL (2005): Praxishilfe zur Bemessung des Zuströmbereichs Z_u , Vollzug Umwelt. Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft (BUWAL), Bern, CH, 35 S.
- CAMPANA, M.E., HARRINGTON, G.A., TEZCAN, L. (2001): Compartmental model approaches to groundwater flow simulation, Kap. 3. IN: YURTSEVER und MOOK (2001), S. 36–73.
- CASTRO, M.C., GOBLET, P. (2005): Calculation of ground water ages - A comparative analysis. *Ground Water*, Vol. 43 (3), S. 368–380.
- CLARK, I.D., FRITZ, P. (1997): *Environmental Isotopes in Hydrogeology*. Lewis Publishers, Boca Raton, New York, 1. Aufl., 328 S.
- CORCHO ALVARADO, J.A., PURTSCHERT, R., BARBECOT, F., CHABAULT, C., RUEEDI, J., SCHNEIDER, V., AESCHBACH-HERTIG, W., KIPFER, R., LOOSLI, H.H. (2007): Constraining the age distribution of highly mixed groundwater using ^{39}Ar : A multiple environmental tracer ($^3\text{H}/^3\text{He}$, ^{85}Kr , ^{39}Ar , and ^{14}C) study in the semiconfined Fontainebleau Sands Aquifer (France). *Water Resources Research*, Vol. 43 (3), W03427.
- CORCHO ALVARADO, J.A., PURTSCHERT, R., HINSBY, K., TROLDORG, L., HOFER, M., KIPFER, R., AESCHBACH-HERTIG, W., ARNO-SYNAL, H. (2005): ^{36}Cl in modern groundwater dated by a multi-tracer approach ($^3\text{H}/^3\text{He}$, SF_6 , CFC-12 and ^{85}Kr): a case study in quaternary sand aquifers in the Odense Pilot River Basin, Denmark. *Applied Geochemistry*, Vol. 20 (3), S. 599–609.
- CORNATON, F. (2006): Methodologies for the simulation of travel time distributions and practical applications. URL: <http://www.wasy.de/deutsch/dialog/veranstaltungen/fefflow2006/download.html> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007).
- CORNATON, F., PERROCHET, P. (2006): Groundwater age, life expectancy and transit time distributions in advective-dispersive systems; 2. Reservoir theory for sub-drainage basins. *Advances in Water Resources*, Vol. 29 (9), S. 1292–1305.
- CRAIG, J.R. (2005): *Reactive Contaminant Transport Modeling using Analytic Element Flow Solutions*. Dissertation, State University of New York at Buffalo; Department of Civil, Structural, and Environmental Engineering.
- CRAIG, J.R. (2007): Guest Lecture - EARTH661: The Analytic Element Method. URL: http://www.civil.uwaterloo.ca/jrcraig/pdf/EARTH661_AEMLecture.pdf (letzter Abruf: 15. Nov. 2007).
- CRAIG, J.R., JANKOVIC, I., BARNES, R. (2006): The Nested Superblock Approach for Regional-Scale Analytic Element Models. *Ground Water*, Vol. 44 (1), S. 76–80.
- DE LANGE, W.J. (2006): Development of an Analytic Element Ground Water Model of the Netherlands. *Ground Water*, Vol. 44 (1), S. 111–115.
- DIN 4049 (1979): *Hydrologie*. Beuth Verlag, Berlin Köln.
- DUPUIT, J.E.J. (1863): *Etudes théoriques et pratiques sur le mouvement des eaux dans les canaux découverts et à travers les terrains perméables*. Dunod, Paris, 2. Aufl., 304 S.
- DVGW (2006): Technische Regel - Arbeitsblatt W 101 - Richtlinien für Trinkwasserschutzgebiete; Teil 1: Schutzgebiete für Grundwasser. Tech. ber., DVGW Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e. V.

- FETTER, C.W. (2001): Applied Hydrogeology. Prentice Hall, 4. Aufl., 598 S.
- FISCHER, H., L., H., O., W. (1971): 1047 Basel - Erläuterungen, Geologischer Atlas der Schweiz - 1:25000. Schweizerische Geologische Kommission, 55 S., inklusive. 2 Tafelbeilagen.
- FITTS, C.R. (2006): Exact Solution for Two-Dimensional Flow to a Well in an Anisotropic Domain. Ground Water, Vol. 44 (1), S. 99–101.
- FITTS, C.R., STRACK, O.D.L. (1996): Analytic solutions for unconfined groundwater flow over a stepped base. Journal Of Hydrology, Vol. 177 (1-2), S. 65–76.
- FOCAZIO, M.J., REILLY, T.E., RUPERT, M.G., HELSEL, D.R. (2002): Assessing Ground-Water Vulnerability to Contamination: Providing Scientifically Defensible Information for Decision Makers, Nr. 1224 IN Circulars. USGS - United States Geological Service, 33 S.
- FORCHHEIMER, P. (1886): Über die Ergiebigkeit von Brunnen-Anlagen und Sickerschlitten. Zeitschrift des Architekten- und Ingenieur-Vereins zu Hannover, Vol. 32, S. 539–563.
- GEYH, M. (2001): Environmental isotopes in the hydrological cycle: principles and applications - Groundwater, saturated and unsaturated zone, Nr. 39 - Vol. 4 IN IHP-V - Technical Documents in Hydrology. UNESCO, Paris, 196 S.
- GLA (1991): Hydrogeologische Kriterien für die Abgrenzung von Wasserschutzgebieten in Baden-Württemberg. Geologisches Landesamt Baden-Württemberg - GLA (Hrsg.), 32 S.
- GOODE, D.J. (1996): Direct simulation of groundwater age. Water Resources Research, Vol. 32 (2), S. 289–296.
- HAITJEMA, H.M. (1985): Modeling Three-Dimensional Flow in Confined Aquifers by Superposition of Both Two- and Three-Dimensional Analytic Functions. Water Resources Research, Vol. 21 (10), S. 1557–1560.
- HAITJEMA, H.M. (1995): Analytic Element Modeling of Groundwater Flow. Academic Press Inc., U.S., 394 S.
- HEATH, R.C. (1983): Basic ground-water hydrology, Nr. 2220 IN Water Supply Paper (WSP). USGS - United States Geological Service, 84 S.
- HINKLE, S.R., SNYDER, D.T. (1997): Comparison of Chlorofluorocarbon Age Dating with Particle-Tracking Results of a Regional Ground-Water Flow Model of the Portland Basin, Oregon and Washington. Tech. ber., USGS.
- HINSBY, K. (2001): Freshwater, our most important resource. Nyt fra GEUS, (1), S. 2–6.
- HINSBY, K. (2006): Groundwater Resources in Buried Valleys - A Challenge for Geosciences, Kap. Environmental tracers, groundwater age and vulnerability, Leibnitz Institut for Applied Geosciences (GGA-Institut). S. 141–148.
- HÖLTING, B., COLDEWEY, W.G. (2005): Hydrogeologie. Spektrum-Akademischer Vlg, 6. Aufl., 326 S.
- HUGGENBERGER, P., GULDENFELS, L. (2003a): Austauschprozesse Fluss-Grundwasser, Markierungsversuch und Begleitende Feldexperimente (März 2002), Bericht und Auswertung. Tech. ber., Baudepartement, Tiefbauamt Basel-Stadt.
- HUGGENBERGER, P., GULDENFELS, L. (2003b): Lange Erlen Grundwassermodell 2002. Tech. ber., Baudepartement, Tiefbauamt Basel-Stadt.

- HUNT, R.J. (2006): Ground Water Modeling Applications Using the Analytic Element Method. Ground Water, Vol. 44 (1), S. 5–15.
- IHF, Entwicklung einer Methode zur Priorisierung und Bewertung von Verdachtsflächen im regionalen Maßstab.
- IWB (2007a): “Neuer Teich” in Riehen wird revitalisiert. IWB-Medienmitteilung; URL: http://www.iwb.ch/media/Medien/Dokumente/2007/071018_neuerteich.pdf (letzter Abruf: 23.11.2007).
- IWB (2007b): persönliche Kommunikation.
- IZBICKI, J.A., STAMOS, C.L., NISHIKAWA, T., MARTIN, P. (2004): Comparison of ground-water flow model particle-tracking results and isotopic data in the Mojave River ground-water basin, southern California, USA. Journal of Hydrology, Vol. 292 (1-4), S. 30–47.
- KANTON BASEL-STADT (2007a): Hydrographisches Jahrbuch 2006 - Grundwasserstände. Baudepartement des Kantons Basel-Stadt, Amt für Umwelt und Energie, 74 S., URL: <http://www.aue.bs.ch/pegel-alle-2006.pdf> (letzter Abruf: 17.11.2007).
- KANTON BASEL-STADT (2007b): Oberflächengewässer. Baudepartement des Kantons Basel-Stadt, Amt für Umwelt und Energie, URL: <http://www.aue.bs.ch/fachbereiche/gewaesser.htm> (letzter Abruf: 17.11.2007).
- KINZELBACH, W., MARBURGER, M., CHIANG, W.H. (1992): Determination of groundwater catchment areas in two and three spatial dimensions. Journal of Hydrology, Vol. 134 (1-4), S. 221–246.
- KINZELBACH, W., RAUSCH, R. (1995): Grundwassermodellierung. Gebrüder Borntraeger, Berlin Stuttgart, 1. Aufl., 283 S.
- KIRSCH, R., HINSBY, K. (2006): Groundwater Resources in Buried Valleys - A Challenge for Geosciences, Kap. Groundwater vulnerability, Leibnitz Institut for Applied Geosciences (GGA-Institut). S. 149–156.
- KRAEMER, S. (2005): schriftliche Kommunikation.
- KRAEMER, S.R. (2007): Analytic Element Ground Water Modeling as a Research Program (1980 to 2006). Ground Water, Vol. 45 (4), S. 402–408.
- KRAFTWERK BIRSFELDEN AG (2007): Kraftwerk Birsfelden AG - die Technik. URL: <http://www.kw-birsfelden.ch/d/023b.html> (letzter Abruf: 17.11.2007).
- MAŁOSZEWSKI, P., STICHLER, W., ZUBER, A. (2004): Interpretation of environmental tracers in groundwater systems with stagnant water zones. Isotopes in Environmental and Health Studies, Vol. 40 (1), S. 21–33.
- MAŁOSZEWSKI, P., ZUBER, A. (1982): Determining the turnover time of groundwater systems with the aid of environmental tracers - 1. Models and their applicability. Journal of Hydrology, Vol. 57, S. 207–231.
- MAŁOSZEWSKI, P., ZUBER, A. (1991): Influence of matrix diffusion and exchange reactions on radiocarbon ages in fissured carbonate aquifers. Water Resources Research, Vol. 27 (8), S. 1937–1945.
- MANNING, A.H., KIP SOLOMON, D., THIRO, S.A. (2005): $^3\text{H}/^3\text{He}$ age data in assessing the susceptibility of wells to contamination. Ground Water, Vol. 43 (3), S. 353–367.

- MODICA, E., REILLY, T.E., POLLOCK, D.W. (1997): Patterns and Age Distributinos of Ground-Water Flow to Streams. *Ground Water*, Vol. 35 (3), S. 523–537.
- MORGAN, L. (1999): Pesticides and groundwater in the State of Washington. *Environmental Management and Health*, Vol. 10 (1), S. 7–17.
- NATIONAL RESEARCH COUNCIL (Hrsg.) (1993): Ground water vulnerability assessment - Contamination Potential Under Conditions of Uncertainty. National Academy Press, Washington, D.C., 210 S.
- NOLAN, B., RUDDY, B., HITT, K., HELSEL, D. (1997): Risk of Nitrate in Groundwaters of the United States - A National Perspective. *Environmental Science & Technology*, Vol. 31 (8), S. 2229–2236.
- OLIPHANT, T.E. (2006): Guide to NumPy. Trelgol Publishing, 1. Aufl., 346 S., URL: <http://www.tramy.us> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007).
- OZYURT, N.N., BAYARI, C.S. (2003): LUMPED: a Visual Basic code of lumped-parameter models for mean residence time analyses of groundwater systems. *Computer & Geosciences*, Vol. 29 (1), S. 79–90.
- PLUMMER, L.N., BUSENBERG, E., MCCONNELL, J.B., DENKARD, S., SCHLOSSER, P., MICHEL, R.L. (1998): Flow of river water into a karstic limestone aquifer - 1. Tracing the young fraction in groundwater mixtures in the upper Floridan Aquifer near Valdosta, Georgia. *Applied Geochemistry*, Vol. 13 (8), S. 995–1015.
- PLUMMER, L.N., MICHEL, R.L., THURMAN, E.M., GLYNN, P. (1993): Regional Ground Water Quality, Kap. 11 - Environmental Tracers for Age Dating Young Ground Water, Wiley, New York. 1. Aufl., S. 255–296.
- POLLOCK, D.W. (1989): Documentation of Computer Programs to compute and display Path-lines using Results from the U.S. Geological Survey Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model. Tech. ber., USGS - United States Geological Service.
- PYTHON SOFTWARE FOUNDATION (2007): Python Programming Language - Official Website. URL: <http://www.python.org> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007).
- REILLY, T.E., PLUMMER, L.N., PHILLIPS, P.J., BUSENBERG, E. (1994): The use of simulation and multiple environmental tracers to quantify groundwater flow in a shallow aquifer. *Water Resources Research*, Vol. 30 (2), S. 421–434.
- RÜETSCHI, D. (2004): Basler Trinkwassergewinnung in den Langen Erlen: biologische Reinigungsleistungen in den bewaldeten Wasserstellen. Dissertation, Philosophisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Universität Basel, 448 S.
- RHEINSCHIFFFAHRTSDIREKTION BASEL (2006): Wasserstrassenkarte. Zelle 149, Dateiname: 4C5RH149.000; URL: <http://www.portofbasel.ch/index.php?sprache=d&nav=15> (letzter Abruf: 23.11.2007).
- SCHWEIZERISCHE GEOLOGISCHE KOMMISSION (Hrsg.) (1971): Blatt 1047 Basel, Geologischer Atlas der Schweiz 1:25000.
- SEILER, K.P. (2001): Environmental isotopes in the hydrological cycle: principles and applications - Mans' impact on groundwater systems, Nr. 39 - Vol. V IN IHP-V - Technical Documents in Hydrology. UNESCO, Paris, 109 S.

- SNYDER, D.T., WILKINSON, J.M., ORZOL, L.L. (1998): Use of a Ground-Water Flow Model with Particle Tracking to Evaluate Ground-Water Vulnerability, Clark County, Washington. Tech. ber., USGS - United States Geological Service.
- STRACK, O. (2006): The Development of New Analytic Elements for Transient Flow and Multiaquifer Flow. *Ground Water*, Vol. 44 (1), S. 91–98.
- STRACK, O., BARNES, R., VERRUIJT, A. (2006): Vertically Integrated Flows, Discharge Potential, and the Dupuit-Forchheimer Approximation. *Ground Water*, Vol. 44 (1), S. 72–75.
- STRACK, O.D.L. (1981a): Flow in Aquifers with clay lamina - I. The comprehensive potential. *Water Resources Research*, Vol. 17 (4), S. 985–992.
- STRACK, O.D.L. (1981b): Flow in Aquifers with clay lamina - II. Exact solution. *Water Resources Research*, Vol. 17 (4), S. 993–1004.
- STRACK, O.D.L. (1984): Three-Dimensional Streamlines in Dupuit-Forchheimer Models. *Water Resources Research*, Vol. 20 (7), S. 812–820.
- STRACK, O.D.L. (1989): *Groundwater Mechanics*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 732 S.
- STRACK, O.D.L. (1999): Principles of the analytic element method. *Journal of Hydrology*, Vol. 226 (3-4), S. 128–138.
- STRACK, O.D.L., HAITJEMA, H.M. (1981): Modeling Double Aquifer Flow Using a Comprehensive Potential and Distributed Singularities - 2. Solution for Inhomogeneous Permeabilities. *Water Resources Research*, Vol. 17 (5), S. 1551–1560.
- US EPA (2007): WhAEM2000 - Exposure Assessment Models - US EPA. URL: <http://www.epa.gov/ceampubl/gwater/whaem/index.htm> (letzter Abruf: 15. Nov. 2007).
- VARNI, M., CARRERA, J. (1998): Simulation of groundwater age distributions. *Water Resources Research*, Vol. 34, S. 3271–3282.
- VASSOLO, S., KINZELBACH, W., SCHAFER, W. (1998): Determination of a well head protection zone by stochastic inverse modelling. *Journal of Hydrology*, Vol. 206 (3-4), S. 268–280.
- VwV-WSG (1994): VwV-WSG - Verwaltungsvorschrift des Umweltministeriums über die Festsetzung von Wasserschutzgebieten. GABl., S. 881.
- WALKER, G.R., COOK, P.G. (1991): The importance of considering diffusion when using carbon-14 to estimate groundwater recharge to an unconfined aquifer. *Journal of Hydrology*, Vol. 128 (1-4), S. 41–48.
- WILLSCHIED, A. (2007): Hydrodynamische Gefährdungsabschätzung als Methode in der Altlastenuntersuchung. Diplomarbeit, Institut für Hydrologie, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg.
- YURTSEVER, Y., MOOK, W.G. (Hrsg.) (2001): Environmental isotopes in the hydrological cycle: principles and applications - Modelling, Nr. 39 - Vol. 4 IN IHP-V - Technical Documents in Hydrology. UNESCO, Paris, 127 S.
- ZECHNER, E. (1996): Hydrogeologische Untersuchungen und Tracertransport-Simulationen zur Validierung eines Grundwassermodells der Langen Erlen (Basel-Stadt). Dissertation, Philosophisch-Naturwissenschaftliche Fakultät der Universität Basel, 156 S.
- ZUBER, A., MAŁOSZEWSKI, P. (2001): Lumped parameter models. IN: YURTSEVER und MOOK (2001), Kap. 2, S. 5–35.

A Modellergebnisse

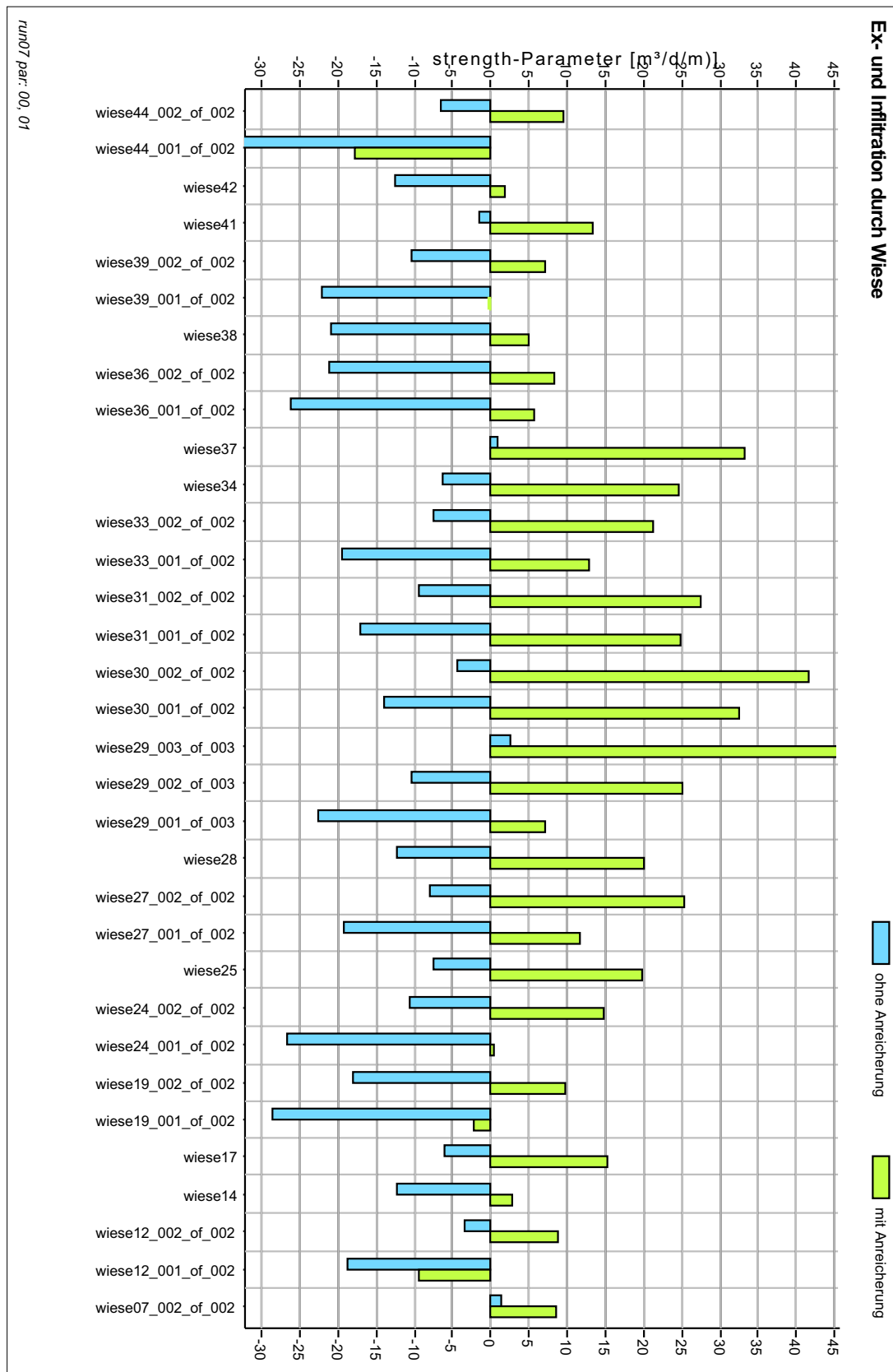


Abbildung A.1: Übersicht der In- und Exfiltrationen der Wiese für Modellauf 07; negative Strength Parameter entsprechen infiltrierenden Verhältnissen in den Aquifer.

Anreicherung nicht - Brunnengruppe 3

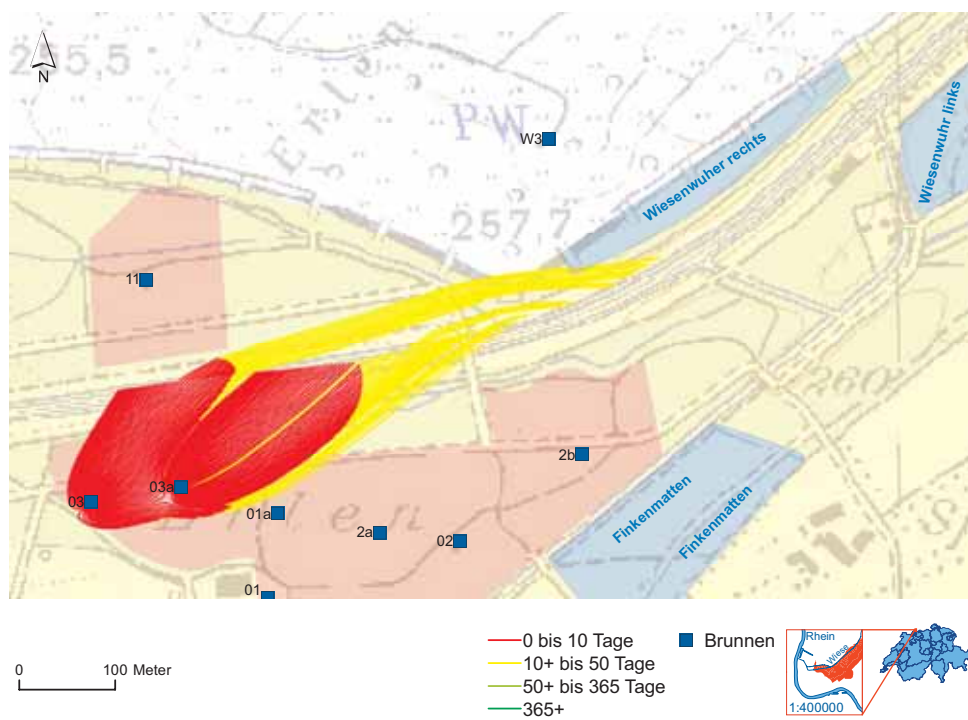


Abbildung A.2: Modellauf 07 (ohne Grundwasseranreicherung) Brunnen 3 und 3a.

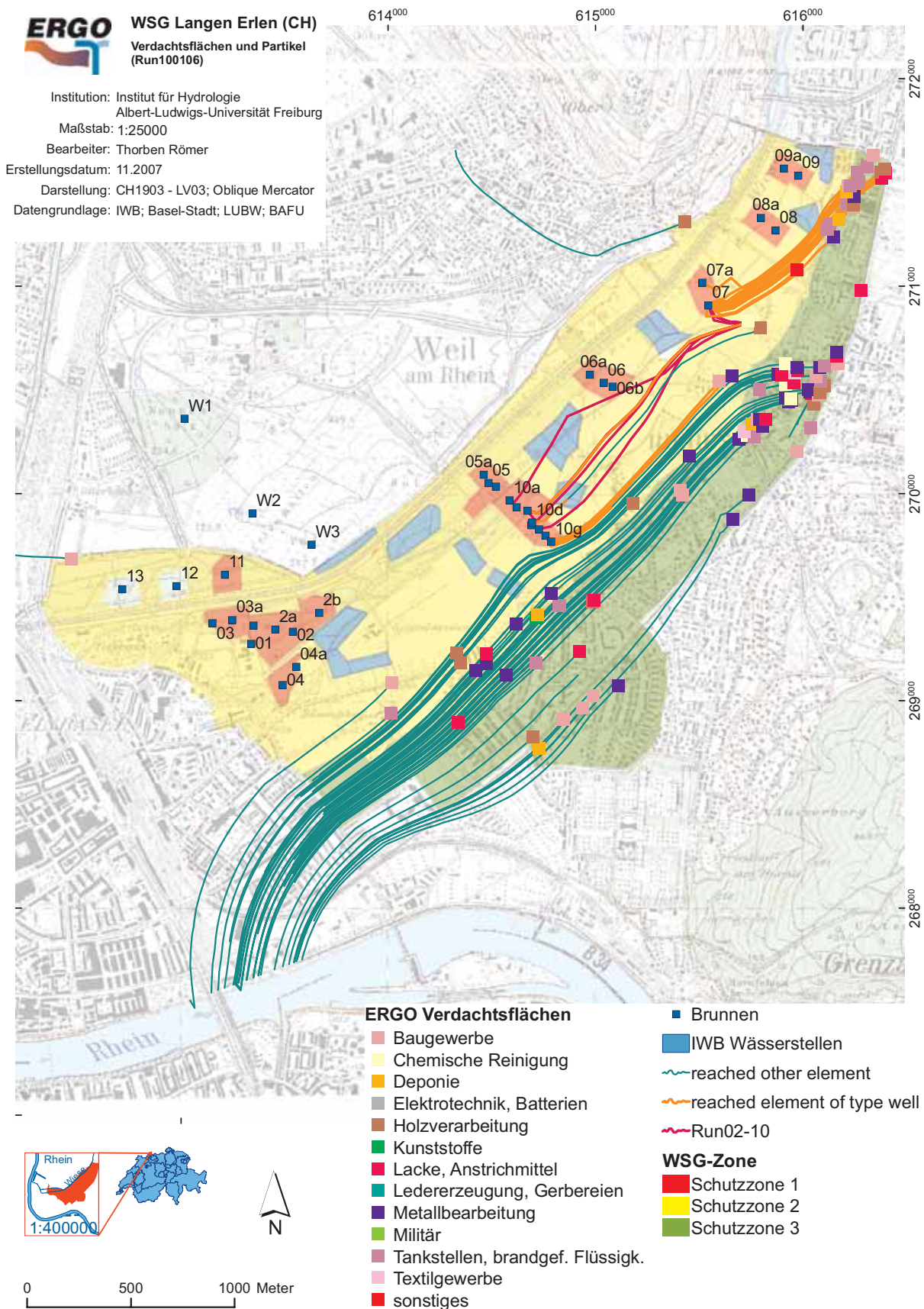


Abbildung A.3: Übersicht der Ergo Verdachtsflächen in den Schutzzonen von Lange Erlen.

B Modellierungsparameter

Hinweis: alle Tabllen der Modellierungsparameter konnten aufgrund des großen Umfanges nicht komplett in den Anhang aufgenommen werden. Weitere Tabllen finden sich auf der beiliegenden CD-ROM. Die Feldnamen entsprechen den dBASE-Feldnahmen der Tim^{ML}-Input-Shapefiles.

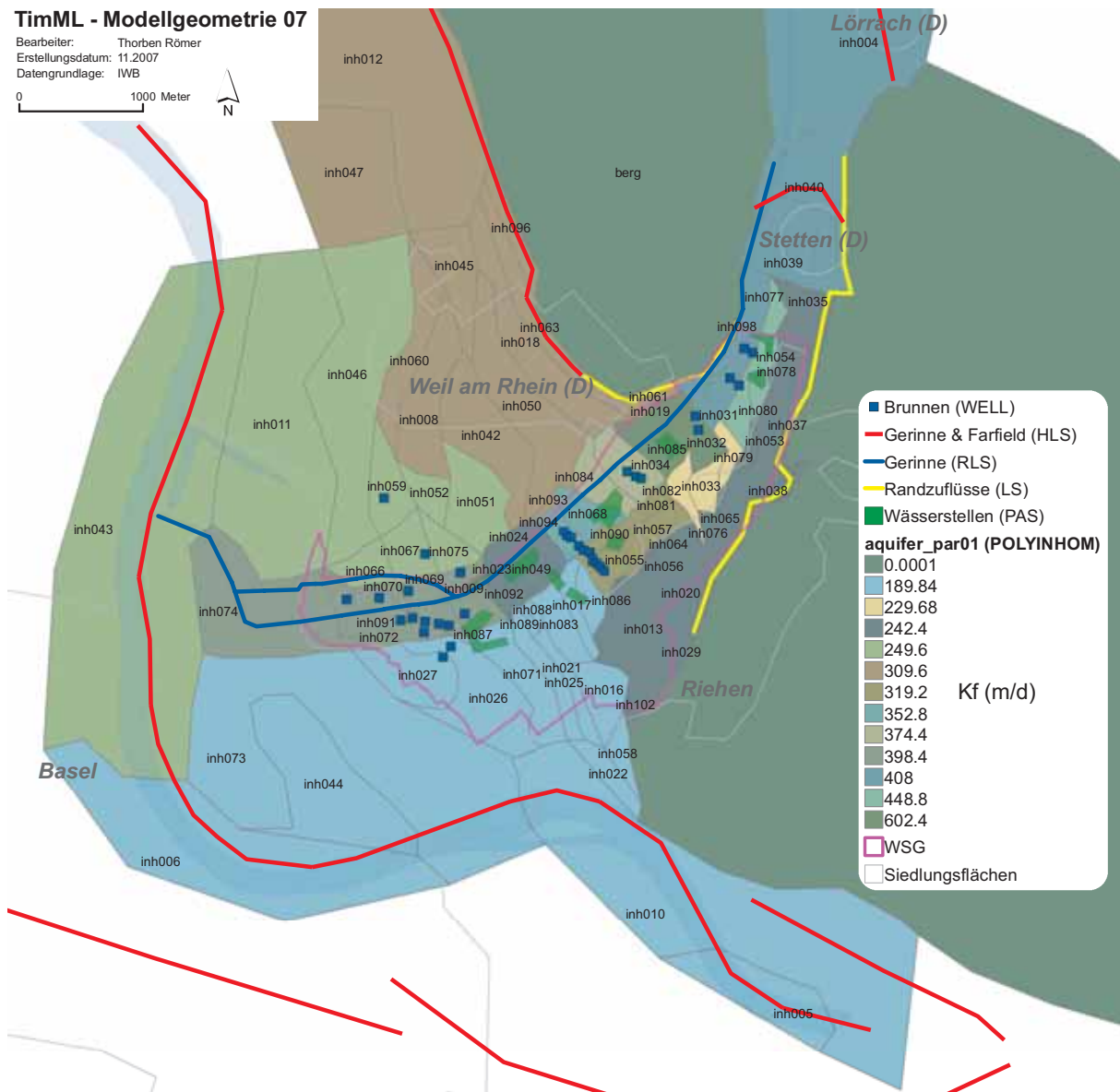


Abbildung B.1: Modellgeometrie Run07.

Tabelle B.1: Übersicht der Tim^{ML}-Modellläufe.

Parameter	Modelllauf	Anzahl der Elemente	Polygon Inhomogenität	Brunnenszenario	Randzuflüsse	Wiese und Otterbach	Farfield & Rhein	Wässerung	Grundwasser- neubildung
Elementtyp:									
Dateiprefix:									
	Run 100101	988	100101	W well_alle..	LS ls_randzufluesse..	RLS rls_gerinne..	HLS hls_farfield	PAS pas_waesserung..	PAS pas_gwn
	Run 100102	962	100101	01	01	01	01	01	01
	Run 100103	962	100101	02	01	01	01	00	01
	Run 100104	962	100101	03	02	03	01	00	01
	Run 100105	962	100101	03	01	03	01	00	01
	Run 100106	962	100101	03	02	04	01	00	01
	Run 100107	988	100101	03	02	02	01	02	01
	Run 100108	988	100101	03	02	02	01	03	01
	Run 100109	988	100101	03	02	04	01	02	01
	Run 100110	988	100101	03	03	04	01	02	01

PI : Polygon Inhomogeneity

W : Well

LS : Line Sink

RLS : Resistance Line Sink

HLS : Head Line Sink

PAS : Polygon Area Sink

Übersicht der Modellläufe

Inhalt: Modellläufe aufgeschlüsselt nach Inputdatei und zugehörigen Parameterkombinationen; Parameter sind in Parameter-Tabellen verzeichnet;

Notiz: der Inputdateiname setzt sich aus dem Dateiprefix und der zugehörigen kursiv gedruckten Kennnummer zusammen

Tabelle B.2: Brunnenparameter.

Inhalt: **Brunnenparameter**

Daten-

grundlage:

Notiz:

Brunnenpläne IWB; Förderdaten IWB (Zeitraum: 01.01.2006 bis 31.12.2006); eigene Abschätzungen; Zechner, 1996

k.A. - keine Angabe verfügbar

Parameter	Brunnen-Nr.	Rechtswert	Hochwert	Förderrate mittlere	Förderrate 75%	Förderrate 50%	Auftellungs- faktor	Ø Filterrohr	Ø Saugrohr	Verfüllung von	Verfüllung bis	Endteufe	Gelände- oberkante	Abstich	Anmerkung
Einheit:	(-)	(m)	(m)	(l/s)	(l/s)	(l/s)	(%)	(mm)	(mm)	(m ü. M.)	(m ü. M.)	(m ü. M.)	(m ü. M.)	(-)	(-)
Feldname:	LABEL X	Y	QW01	QW02	QW03	QW04	QW05	QW06	QW07	QW08	QW09	QW10	QW11	QW12	QW13
01	613338	269274	22	1927	41	3564	28	2376	50	25	236.00	245.60	256.70	256.92	Filterstrecke + offener Brunnenkranz bei 245.6
01a	613348	269362	22	1927	41	3564	28	2376	50	25	241.42	252.88	261.37	253.43	-
02	613539	269333	13	1093	17	1426	11	950	20	30	242.92	244.83	258.28	259.30	Filterstrecke + offener Brunnenkranz bei 244.23
2a	613455	269342	25	2186	33	2851	22	1901	40	25	240.07	239.59	256.72	254.66	-
2b	613666	269424	25	2186	33	2851	22	1901	40	25	246.10	254.46	258.51	255.42	-
03	613153	269374	10	892	38	3267	25	2178	50	30	239.10	245.04	255.47	257.80	Filterstrecke + offener Brunnenkranz bei 245.04
03a	613247	269389	10	892	38	3267	25	2178	50	25	239.66	253.10	258.02	253.54	-
04	613490	269077	24	2069	38	3285	25	2190	50	25	240.59	245.63	258.02	259.01	Filterstrecke + offener Brunnenkranz bei 245.63
04a	613556	269163	24	2069	38	3285	25	2190	50	25	239.30	253.32	257.24	254.32	-
05	614484	270051	8	703	17	1426	11	950	20	25	253.95	253.95	261.51	261.51	Sammelbrunnen; offene Glocke bei 253.95
05a	614461	270090	16	1407	33	2851	22	1901	40	15	251.56	259.96	262.64	260.40	-
05b	614520	270032	16	1407	33	2851	22	1901	40	15	251.57	259.93	263.33	260.53	-
06	615041	270535	15	1302	31	2694	21	1796	33	30	253.93	258.01	267.03	265.14	Filterstrecke + offener Brunnenkranz auf 257.7
06a	614972	270572	15	1302	31	2694	21	1796	33	15	253.32	266.18	266.93	263.81	-
06b	615083	270516	15	1302	31	2694	21	1796	33	15	253.24	266.84	267.59	263.84	-
07	615544	270906	46	3994	64	5499	42	3666	50	30	257.85	262.41	269.74	268.17	Filterstrecke + offener Brunnenkranz
07a	615517	271018	46	3994	64	5499	42	3666	50	25	258.00	262.52	269.57	266.90	-
08	615870	271269	15	1288	27	2322	18	1548	50	15	262.40	265.52	271.94	270.32	Filterstrecke + offener Brunnenkranz bei 261.93
08a	615798	271330	15	1288	27	2322	18	1548	50	25	260.40	262.52	271.18	269.14	-
09	615979	271533	0	0	0	0	0	0	50	0	261.22	262.52	271.32	271.92	offener Brunnenkranz; kein gesonderter Brunnenplan
09a	615910	271568	0	0	0	0	0	0	50	0	261.35	262.52	272.47	270.33	kein gesonderter Brunnenplan
10	614691	269847	0	0	0	0	0	0	00	0	-	-	264.74	262.48	Sammelbrunnen, nicht verfüllt
10a	614585	269968	19	1643	50	4348	34	2899	36	25	251.08	260.79	263.04	261.31	-
10b	614620	269934	6	548	17	1449	11	966	12	25	252.02	261.25	263.55	261.37	-
10c	614673	269916	6	548	17	1449	11	966	12	25	252.56	261.26	263.55	261.42	-
10d	614695	269860	4	310	10	821	6	548	07	25	253.35	261.54	263.35	264.65	-
10e	614727	269828	7	639	20	1691	13	1127	14	25	253.56	261.31	263.56	261.46	-
10f	614759	269796	10	821	25	2174	17	1449	18	25	253.76	261.26	263.76	261.41	-
10g	614787	269768	0	0	0	0	0	0	00	25	253.65	261.21	263.65	261.36	-
11	613211	269607	11	935	67	5778	45	3852	100	0	-	-	256.53	254.10	Sammlier; Zentrum Horizontalfilterbrunnen
12	612978	269552	13	1117	62	5328	41	3552	100	0	-	-	255.10	252.68	Sammlier; Zentrum Horizontalfilterbrunnen
13	612716	269537	0	0	0	0	0	0	100	0	-	-	254.76	251.85	Sammlier; Zentrum Horizontalfilterbrunnen
W1	613018	270362	19	1613	19	1613	19	1613	100	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	Abschätzung der Kennwerte und Entnahmen
W2	613346	269904	19	1613	19	1613	19	1613	100	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	Abschätzung der Kennwerte und Entnahmen
W3	613632	269754	19	1613	19	1613	19	1613	100	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	k.A.	Abschätzung der Kennwerte und Entnahmen

Tabelle B.3: Übersicht der Inhomogenitäten (aquifer100101).**Inhalt:** Übersicht der Inhomogenitäten (aquifer100101)**Daten-****grundlage:** Huggenberger und Guldenfels, 2003; Zechner, 1996, INTERREG II; Fischer et al. 1971**Notiz:** CODE gibt die Zonierung nach Huggenberger und Guldenfels (2003) wieder;

„unterer Wert“ gibt den Wert minus Standardabw. an; „oberer Wert“ gibt den Wert plus Standardabw. an

Parameter	Schutzzone	Bezeichnung der Polygon Inhomogenität	Anzahl der Schichten	Lage des Stauers		Obere Aquiferbegrenzung		k_r		k_r oberer Wert	k_r unterer Wert	n_{eff}	n_{eff} unterer Wert	n_{eff} oberer Wert
Einheit:	(-)	(-)	(-)	(l/s)	(m/d)	(m/s)	(m/d)	(m/d)	(m/d)	(m/d)	(m/d)	(-)	(-)	(-)
Feldname:	CODE	LABEL	NAQ	ZB	ZT	K01	K02	K03	N01	N02	N03			
	0	PI_01	1	239	246	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_02	1	235	244	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_03	1	242	247	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_04	1	248	256	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_05	1	246	253	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_06	1	244	250	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_07	1	240	250	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_08	1	243	252	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	0	PI_09	1	244	255	2.89E-03	249.60	252.00	247.20	0.101	0.102	0.101		
	1	PI_10	1	245	255	4.61E-03	398.40	403.20	393.60	0.102	0.103	0.101		
	1	PI_11	1	242	253	4.61E-03	398.40	403.20	393.60	0.102	0.103	0.101		
	1	PI_12	1	240	252	4.61E-03	398.40	403.20	393.60	0.102	0.103	0.101		
	1	PI_13	1	240	250	4.61E-03	398.40	403.20	393.60	0.102	0.103	0.101		
	1	PI_14	1	238	247	4.61E-03	398.40	403.20	393.60	0.102	0.103	0.101		
	1	PI_15	1	240	251	4.61E-03	398.40	403.20	393.60	0.102	0.103	0.101		
	10	PI_16	1	257	265	2.66E-03	229.68	231.84	227.28	0.124	0.125	0.123		
	10	PI_17	1	259	266	2.66E-03	229.68	231.84	227.28	0.124	0.125	0.123		
	10	PI_18	1	255	264	2.66E-03	229.68	231.84	227.28	0.124	0.125	0.123		
	11	PI_19	1	277	282	4.72E-03	408.00	412.80	405.60	0.086	0.087	0.085		
	11	PI_20	1	261	267	4.72E-03	408.00	412.80	405.60	0.086	0.087	0.085		
	11	PI_21	1	267	273	4.72E-03	408.00	412.80	405.60	0.086	0.087	0.085		
	11	PI_22	1	269	275	4.72E-03	408.00	412.80	405.60	0.086	0.087	0.085		
	11	PI_23	1	263	269	4.72E-03	408.00	412.80	405.60	0.086	0.087	0.085		
	11	PI_24	1	266	269	4.72E-03	408.00	412.80	405.60	0.086	0.087	0.085		
	12	PI_25	1	261	269	5.19E-03	448.80	456.00	444.00	0.074	0.074	0.073		
	12	PI_26	1	260	267	5.19E-03	448.80	456.00	444.00	0.074	0.074	0.073		
	13	PI_27	1	252	261	4.08E-03	352.80	355.20	348.00	0.059	0.060	0.059		
	13	PI_28	1	251	259	4.08E-03	352.80	355.20	348.00	0.059	0.060	0.059		
	3	PI_29	1	249	258	2.81E-03	242.40	244.80	239.76	0.117	0.121	0.113		
	3	PI_30	1	250	258	2.81E-03	242.40	244.80	239.76	0.117	0.121	0.113		
	3	PI_31	1	250	259	2.81E-03	242.40	244.80	239.76	0.117	0.121	0.113		
	3	PI_32	1	246	257	2.81E-03	242.40	244.80	239.76	0.117	0.121	0.113		
	4	PI_33	1	242	254	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_34	1	244	248	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_35	1	246	254	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_36	1	253	258	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_37	1	251	259	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_38	1	247	257	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_39	1	251	255	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_40	1	250	257	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_41	1	240	253	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_42	1	240	252	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_43	1	239	247	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_44	1	252	257	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		
	4	PI_45	1	243	256	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124		

(…)

(...)

	(-)	(-)	(-)	(l/s)	(m/d)	(m/s)	(m/d)	(m/d)	(m/d)	(-)	(-)	(-)
	CODE	LABEL	NAQ	ZB	ZT		K01	K02	K03	N01	N02	N03
	4	PI_46	1	239	248	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124
	4	PI_47	1	251	258	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124
	4	PI_48	1	252	259	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124
	4	PI_49	1	241	254	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124
	4	PI_50	1	250	258	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124
	4	PI_51	1	249	257	2.20E-03	189.84	191.28	188.40	0.126	0.127	0.124
	5	PI_52	1	246	250	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_53	1	247	248	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_54	1	252	256	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_55	1	249	255	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_56	1	247	250	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_57	1	243	246	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_58	1	250	256	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_59	1	245	249	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_60	1	257	265	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_61	1	253	259	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_62	1	251	259	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	5	PI_63	1	252	260	3.58E-03	309.60	312.00	304.80	0.090	0.093	0.088
	6	PI_64	1	253	263	4.33E-03	374.40	376.80	369.60	0.087	0.089	0.086
	6	PI_65	1	252	262	4.33E-03	374.40	376.80	369.60	0.087	0.089	0.086
	7	PI_66	1	253	260	3.69E-03	319.20	324.00	314.40	0.085	0.086	0.084
	7	PI_67	1	254	263	3.69E-03	319.20	324.00	314.40	0.085	0.086	0.084
	7	PI_68	1	254	263	3.69E-03	319.20	324.00	314.40	0.085	0.086	0.084
	7	PI_69	1	253	261	3.69E-03	319.20	324.00	314.40	0.085	0.086	0.084
	8	PI_70	1	254	260	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_71	1	254	262	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_72	1	259	261	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_73	1	267	271	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_74	1	263	268	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_75	1	253	262	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_76	1	254	264	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_77	1	259	265	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_78	1	256	264	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_79	1	261	269	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	8	PI_80	1	255	259	2.81E-03	242.40	247.20	239.52	0.096	0.097	0.095
	9	PI_81	1	255	265	6.97E-03	602.40	621.60	583.20	0.109	0.110	0.108
	9	PI_82	1	257	265	6.97E-03	602.40	621.60	583.20	0.109	0.110	0.108
	9	PI_83	1	254	264	6.97E-03	602.40	621.60	583.20	0.109	0.110	0.108
k. A.	Dinkelberg	1	235	265	1.16E-09	0.00	0.00	0.00	0.001	0.001	0.001	
k. A.	Tuellinger Berg	1	235	265	1.16E-09	0.00	0.00	0.00	0.001	0.001	0.001	

Tabelle B.4: Übersicht Grundwasserneubildung.

Inhalt: Übersicht der Grundwasserneubildung (GWN)

Daten-
grundlage: Zechner, 1996

Parameter	Grundwasser- neubildung	Beschreibung	Grundwasser- neubildung
Einheit:	(mm/a)		(m/d)
Feldname:			INFIL01
277		unüberbautes Wiesegebiet der Langen Erlen und der angrenzenden Gemeinde Weil am Rhein, Grundwasserneubildungsrate 30 %	0.0007589
151		unüberbautes Waldgebiet der Langen Erlen und der angrenzenden Gemeinde Weil am Rhein, Grundwasserneubildungsrate 20 %	0.0004137
151		teilweise überbautes Gebiet der Gemeinde Riehen, Grundwasserneubildungsrate 20 %	0.0004137
76		stärker überbautes Siedlungsgebiet von Kleinbasel, Grundwasserneubildungsrate 10 %	0.0002082

Tabelle B.5: Übersicht Wässerungen.

Parameter	Schutzzone	Bezeichnung der Wässermatte	Nr. Wässermatte	Infiltrationskapazität		Infiltrierte Menge 01		Infiltrierte Menge 02		Infiltrierte Menge 03		Fläche
Einheit:	(-)	(-)	(-)	WKAPA	(m/d)	(l/s)	(m/d)	(l/s)	(m/d)	(l/s)	(m/d)	(m ²)
Feldname:	ZONE	BEZEICHN	MATTENNR	INKAPA	INFILO1	INFILO2	INFILO3	FLAECHE				
	1 Finkenmatten		01	120	0.54	0	0.00	60	0.27	0	0.00	19050
	1 Finkenmatten		02	80	0.80	0	0.00	40	0.40	0	0.00	8684
	1 Grendelgasse links		01	120	2.17	0	0.00	0	0.00	60	1.09	4773
	1 Grendelgasse links		02	120	1.34	0	0.00	60	0.67	60	0.67	7730
	1 Grendelgasse links		03	120	1.65	0	0.00	0	0.00	0	0.00	6285
	1 Grendelgasse rechts		01	200	1.91	0	0.00	0	0.00	100	0.95	9062
	1 Grendelgasse rechts		02	200	2.39	116	1.38	100	1.19	100	1.19	7244
	1 Grendelgasse rechts		03	200	1.87	0	0.00	100	0.93	0	0.00	9260
	1 Habermatten		00	100	0.70	0	0.00	0	0.00	0	0.00	12423
	1 Hintere Stellmatten		01	50	1.09	0	0.00	0	0.00	0	0.00	3966
	1 Hintere Stellmatten		02	50	0.64	0	0.00	25	0.32	25	0.32	6772
	1 Hintere Stellmatten		03	50	0.90	0	0.00	0	0.00	25	0.45	4782
	1 Hüsimatten		00	100	0.67	0	0.00	50	0.33	50	0.33	12954
	1 Spitalmatten		01	80	0.57	145	1.03	40	0.28	0	0.00	12193
	1 Spitalmatten		02	80	0.63	0	0.00	40	0.31	40	0.31	11040
	1 Verbindungsweg		01	60	1.28	0	0.00	30	0.64	30	0.64	4059
	1 Verbindungsweg		02	60	1.01	0	0.00	0	0.00	30	0.51	5124
	1 Verbindungsweg		03	60	0.86	0	0.00	0	0.00	0	0.00	6056
	1 Vordere Stellmatten		01	50	0.69	0	0.00	25	0.34	25	0.34	6291
	1 Vordere Stellmatten		02	50	1.04	0	0.00	25	0.52	0	0.00	4146
	1 Vordere Stellmatten		03	50	0.88	46	0.81	25	0.44	0	0.00	4933
	1 Wiesengriener		01	150	1.53	87	0.89	75	0.77	0	0.00	8469
	1 Wiesengriener		02	150	1.49	0	0.00	0	0.00	75	0.75	8692
	1 Wiesengriener		03	150	1.55	0	0.00	0	0.00	75	0.78	8360
	1 Wiesenwuh links		00	150	0.39	162	0.43	75	0.20	0	0.00	32852
	1 Wiesenwuh rechts		00	100	0.70	0	0.00	0	0.00	0	0.00	12361

Übersicht Wässerungen

Inhalt:

Daten-

grundlage: Zechner, 1996; eigene Berechnungen

Notiz:

C Quellcode

Tabelle C.1: Übersicht der in für Tim^{ML} neu entwickelten Module und Programmteile.

Inhalt: **Übersicht der entwickelten Python-Module**
 Notiz: DBF – dBase

Dateiname	Funktion	Quellcode im Anhang	Quellcode auf CD-ROM
TimShp.py	Liest Shapefiles und zugehörige DBF-Tablen und aus generiert Input für TimML; Berechnet Informationen für alle Punkte in einem Punkt-Shape und speichert diese in bestimmtem DBF-Feld	X	X
Particles1.py	Enthält verschiedene Partikel Tracking Routinen: - Greift auf „trace_tim.py“ und „trace_TShape_default_values.py“ zurück und erlaubt Zeitintervall-Partikel Tracking von Brunnen und beliebigen Punkten im Aquifer (definiert über Punkt-Shapefiles im TimML-Shapefile-Format) - Partikelwände stehen zur Verfügung		X
Particles2.py	Partikel Tracking für spezifiziertes TimML-Modell wird ausgeführt und Polyline-Shapefiles werden generiert		X
csvTim.py	Partikel Tracking Pfade können in csv Tabellen exportiert werden, Fließpfade enthalten verschiedene Informationen zu jedem Zeitschritt		X
mlascii.py	ASCII-Raster beliebiger Ausdehnung und Zellgröße der Heads können berechnet werden		X
TimPlotting.py	Grundwassergleichen-Plot oder Geschwindigkeit-Vektorfeld-Plots können erstellt werden Elemente werden nach Elementtyp differenziert behandelt		X
trace_TShape_default_values.py	Enthält default-Werte, die gesetzt werden, falls in der Partikel-Tracking Routine die Felder nicht gesondert über den Benutzer oder Datenfelder der Shapefile übergeben werden		X
trace_tim.py	Enthält trace-Routinen auf die in Particles1.py zurückgegriffen wird	X	
timCalcInfilExfil.py	Liest für berechnetes TimML-Modell Infiltration bzw. Exfiltrationsmengen der im Modell enthaltenen LineSinks, ResLineSinks, HeadLineSinks, LineSinkDitches aus und speichert die Information in einer DBF-Datei		X
timCalcHeads.py	Heads für alle Punkt-Shape-Koordinaten eines Shapefiles werden berechnet und in ein DBF-Feld geschrieben		X
timBatchRun.py	Mehrere TimML-Modelle werden nacheinander gerechnet und in *.tml-Outputdateien gesichert		X
Module innerhalb der TimML-Toolbox für ArcGis Desktop			
addConstant.py	DBF-Felder des Elements „Constant“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt		X
addWellFields.py	DBF-Felder des Elements „Well“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt; DBF-Felder für Partikel Tracking Routine sind optional		X
addHLSfields.py	DBF-Felder des Elements „HeadLineSink“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt		X
addRLSfields.py	DBF-Felder des Elements „ResistanceLineSink“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt		X
addLinesinkFields.py	DBF-Felder des Elements „LineSink“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt		X
addLLSDitchFields.py	DBF-Felder des Elements „LineSinkDitch“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt		X
addPASfields.py	DBF-Felder des Elements „PolyAreaSink“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt		X
addIhomFields.py	DBF-Felder der Elemente „PolygonInhomogeneity / CircleInhomogeneity / AquiferSystemInhomogeneity“ werden an die DBF der spezifizierten Punk-Shapefile angehängt		X
readHeads.py	Head-Informationen werden für jeden Punkt des spezifizierten Punk-Shapefiles ausgelesen und in ein DBF-Feld geschrieben		X
runTimML.py	TimML kann direkt mit ausgewählten Shapefiles gestartet werden; ein Modelllauf-Skript wird erstellt und an beliebigem Ort abgespeichert		X

C.1 TShape.py

```
#!/usr/bin/python
# -*- coding: latin-1 -*-
'''
TimSHP.py - contains classes that allow ESRI-shapefile treatment
withing TimML
This file is part of the ERGO extention of the TimML library
and is distributed under the GNU LPGL. See the TimML.py file
for more details.
(c) Thorben Roemer, 2007
'''

import shapelib, dbflib
from TimML import *
import numpy
import os
import trace_TShape_default_values as defaultValues
import TimModelBuilder as TMb

def makeaMove(x1,y1,x2,y2,direction="left",stepSize=1e-004):
    '''makeaMove(x1,y1,x2,y2,direction="left",stepSize=1e-004):
    returns x- and y-Coordinates of a point either left (default) or right of
    the center of a line that extends from x1,y1 to x2,y2
    ---
    x1, y1      : the line starts here
    x2, y2      : the line stops here
    direction   : the direction of the move is "left" by default
                  any other entry here will lead to a step to the right
    stepSize    : 1e-004 (default) step will be performed (only positive values!)
    ---
    returns:
        - x-coordinate left or right of the center of the given line
        - y-coordinate left or right of the center of the given line
    ---'''
    if direction=="left":
        littleStep=stepSize
    else:
        littleStep=(stepSize*-1)
    #testing where the start and stop points are located
    #before making a stepSize sized move:
    if x1 < x2:
        if y1 > y2:
            xTestCoordinate=x1+(x2-x1)*0.5+littleStep
            yTestCoordinate=y2+(y1-y2)*0.5+littleStep
            return xTestCoordinate, yTestCoordinate
        else:
            xTestCoordinate=x1+(x2-x1)*0.5-littleStep
            yTestCoordinate=y1+(y2-y1)*0.5+littleStep
            return xTestCoordinate, yTestCoordinate
    else:
        if y1 < y2:
            xTestCoordinate=x2+(x1-x2)*0.5-littleStep
            yTestCoordinate=y1+(y2-y1)*0.5-littleStep
            return xTestCoordinate, yTestCoordinate
        else:
            xTestCoordinate=x2+(x1-x2)*0.5+littleStep
            yTestCoordinate=y2+(y1-y2)*0.5-littleStep
            return xTestCoordinate, yTestCoordinate

def leftright(left,right,PolyInhomDict,ml):
    '''leftright(left,right,PolyInhomDict,ml):
    looks up the Aquiferdata on the left and right side of an inhomogeneity side
    ---
    left        : inhomogeneity-object as returned by ".findAquiferData"
    right       : inhomogeneity-object or aquifer-object as returned by
                  ".findAquiferData"
    PolyInhomDict : dictionary containing the polygon-inhomogeneities
    ml          : parent Model
    ---
    returns:
        - the key of the inhomogeneity of object "left"
        - the key/name of the aquifer or inhomogeneity of object "right"'''
```

```

'''
links=left
rechts=right
ret_leftKey=""
ret_rightKey=""
for key, value in PolyInhomDict.items():
    if value==links:
        ret_leftKey = key
    elif links==ml.aq:
        ret_leftKey = ml.__module__
i=0
for key, value in PolyInhomDict.items():
    if value == rechts:
        ret_rightKey = key
        i=1
    elif rechts==ml.aq:
        if i==1:
            continue
        else:
            ret_rightKey = ml.__module__
            i=1
return ret_leftKey, ret_rightKey

class TShape:
    '''TimShape will convert information contained within
    ESRI-shapefiles (*.shp, *.dbf...) into TimML elements.
    ---
    filename : path and filename (without extension) of the shapefile
              objects
    modelParent: parent TimML model that elements will be appended to
    shpType : define the type of elements that are contained in your shape
              the following elements are supported so far:
              ELEMENT - ARGUMENT-shpType
              'well' > 'w'
              'HeadLineSink' > 'hls'
              'ResLineSink' > 'rls'
              'LineSinkDitch' > 'lsd'
              'LineSink' > 'ls'
              'CircAreaSink' > 'cas'
              'PolyAreaSink' > 'pas'
              Multiaquifer polygonal inhomogenities:
              'PoligonInhom' > 'polyinhom'
              Aquifer system inhomogenities:
              'PolygonInhom' > 'aqpolyinhom'

    '''
    def __init__(self, filename, modelParent, shpType):
        self.shpType=shpType #the type of shape as defined in shpType
        self.num_shapes=[] #total number of elements that are included
                           #within the shp-file
        self.elements=[] #range of length 'num_shapes' that will be used for iteration
        self.element_type=[] #type of shapefile as defined by ESRI-shapefile-code
        self.filename=filename #filename and path without extension (shapefile)
        self.modelParent=modelParent # parent model that shapes will be applied to
        self.ml=modelParent #TimML model that the elements will be appended to
        self.PolyInhomDict={} #
        self.__shapeData__() #shapeData is called
        self.xylist=[] #spatial coordinates of shapes are stored here
        self.potTraceElement=[] #

    def __shapeData__(self):
        '''shapeData():
        reads information from shapefile and writes the type of the shape and the
        number of shapes that are included within the shapefile to the variables
        self.num_shapes, self.element_type and self.elements
        '''
        filename=self.filename
        assert os.access(filename + ".shp",os.F_OK)==1, \
            "The shapefile: %s does not exist" %filename
        self.shp=shapelib.ShapeFile(filename) #shape-file is opened
        shp=self.shp
        num_shapes, element_type, min, max = shp.info() #read info from shapefile
        self.num_shapes=num_shapes #number of shapes contained within the shapefile
        self.element_type=element_type

```

```

self.elements=range(self.num_shapes)

def addElements(self):
    """addElements():
    Information contained by TShape-Shapefile-instance will be used to add analytic
    elements to TimML-Model; depending on the element type the treatment will
    be chosen automatically
    """
    elements=range(self.num_shapes) #actually the same as self.elements
    itemNumber=0
    #depending on the TimML-element-type the correct function will be called:
    methodDict={'cas': ["Cas(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'hls': ["Hls(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'lsd': ["Lsd(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'ls': ["Ls(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'pas': ["Pas(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'rls': ["Rls(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'w': ["nWell(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'constant': ["ModelConst(self,element).add(itemNumber)",True],\
        'polyinhom': ["PolygonInhomShp(self,element).add()",False],\
        'aqpolyinhom': ["PolygonInhomShp(self,element).add()",False]}
    for element in elements: #for every shape within the shp-file
        tempEval=methodDict[self.shpType][0]
        try:
            if methodDict[self.shpType][1]:
                #TimML-Element will be added to the model:
                self.elements, newItemNumber= eval(tempEval)
                itemNumber=newItemNumber
            else:
                self.PolyInhomDict = eval(tempEval)
        except:
            print "Error: %s is not defined as an element type." %self.shpType
            print "so far defined element types: %s" % methodDict.keys()
    #sides for the polyinhom and aqpolyinhoms will be created:
    if self.shpType=='polyinhom':
        self.makeInhomSides(self.PolyInhomDict)
    if self.shpType=='aqpolyinhom':
        self.makeAquiferSystemInhomogeneity(self.PolyInhomDict)

def findHeads(self,fieldName,whichLayer):
    """findHeads(fieldName,whichLayer):
    heads (in layer 'whichLayer') for every point are read from a point-shapefile
    and written to the dbf-field as given by 'fieldName'
    ---
    fieldName : dbf-fieldName of the shapfile's data-table that heads will
                be written to
    whichLayer: the layer of the TimML-model from which heads will be read
    """
    elements=range(self.num_shapes)
    for element in elements: #each shape within the shapefile will be treated
        shpObject=self.shp.read_object(element)
        #what kind of elements are included within the shape file?
        if numpy.shape(shpObject.vertices())==(1,2):
            pass #no treatment necessary, every element is a point
        else:
            print "Error while reading points from %s. File seems to be no point-shape-file"\
                %self.filename
            ElementCoordinates=shpObject.vertices()[0]
            x=ElementCoordinates[0] #x-coordinate is read
            y=ElementCoordinates[1] #y-coordinate is read
            #calculate head for every point:
            tempHead=self.modelParent.head(layer=whichLayer, x=x,y=y)
            dbf_write=dbflib.open(self.filename, "r+b") #prepare dbf-file for writing
            #head is written to file:
            dbf_write.write_record(element, {fieldName: tempHead})

            dbf_write.close() #close dbf-file after writing

def makeInhomSides(self,PolyInhomDict,order=6):
    """makeInhomSides(PolyInhomDict,order=6):
    creates inhomogeneity sides for all entries contained in "PolygonInhomDict"
    ---

```

```

PolyInhomDict : PolyInhomDict as created by TimSHP.TShape.addElements
oder          : order of the line elements that are put along the
                polylines. Default is 6 and maximum order is 8
---'''
self.alreadyCreated=[] #PolygonInhom sides that are shared
                        #with other inhomogeneities only have to be
                        #created once - all created inhom-sides are stored
                        #here
self.PolyInhomDict=PolyInhomDict
#will be performed for every PolygonInhomogeneity stored in the PolyInhomDict:
for item in self.PolyInhomDict:
    ItemNow=self.PolyInhomDict[item]
    #reads out start- and stop-points of every line segment:
    x1=range(len(ItemNow.xylist))
    x2=range(len(ItemNow.xylist))
    y1=range(len(ItemNow.xylist))
    y2=range(len(ItemNow.xylist))
    i=0
    for point in ItemNow.xylist:
        x1[i]=point[0]
        y1[i]=point[1]
        i+=1
    #-1 here as the stop-point of the line segment is the start-point
    #of the following item:
    i=-1
    for point in ItemNow.xylist:
        x2[i]=point[0]
        y2[i]=point[1]
        i+=1
    #the start-point is also the stop-point of the last line segment:
    x2[-1]=ItemNow.xylist[0][0]
    y2[-1]=ItemNow.xylist[0][1]
    xy1=zip(x1,y1)
    xy2=zip(x2,y2)
    #an inhomogeneity-side will be created for each line segment
    #of the inhomogeneity-polygon:
    for cor_start, cor_end in zip(xy1, xy2):
        #start and stop-coordinates:
        x1=cor_start[0]
        y1=cor_start[1]
        x2=cor_end[0]
        y2=cor_end[1]
        coords=[(cor_start[0],cor_start[1]),(cor_end[0],cor_end[1])]
        xylist=[(cor_start[0],cor_start[1]),(cor_end[0],cor_end[1])]
        #performs a small step to the left of the line's center:
        xTestLeft,yTestLeft=makeaMove(x1,y1,x2,y2,"left")
        #performs a small step to the right of the line's center:
        xTestRight,yTestRight=makeaMove(x1,y1,x2,y2,"right")
        #returns the aquifer system on the left side of the line's center:
        links= self.modelParent.aq.findAquiferData(xTestLeft,yTestLeft)
        #returns the aquifer system on the right side of the line's center:
        rechts= self.modelParent.aq.findAquiferData(xTestRight,yTestRight)
        a,b= leftright(links,rechts,self.PolyInhomDict,self.ml) #does nothing?
        aqleft=links #aquifer system on the left side
        aqright=rechts #aquifer system on the right side
        #has to be set false as every side of each inhomogeneity will be treated
        #seperately:
        closed=False
        #it has to be checked whether the side that is a shared boundary
        #has already been created:
        xylist_check=xylist
        xylist_check.sort()
        checkCreated=xylist_check in self.alreadyCreated
        if checkCreated==1:
            #print "inhomogeneity side has already been created"
            pass #no action has to be performed
        else:
            #the new inhomogeneity side is added to the 'alreadyCreated'-list:
            self.alreadyCreated.append(xylist_check)
            #inhomogeneity side will be created:
            MakeInhomSide(self.modelParent,coords,aqleft,aqright,order,closed)

def makeAquiferSystemInhomogeneity(self,PolyInhomDict):
    '''makeAquiferSystemInhomogeneity(PolyInhomDict):

```

```

        creates inhomogeneity sides for all entries contained in "PolygonInhomDict"
        ---
        PolyInhomDict    : PolyInhomDict as created by TimSHP.TShape.addElements
        ---'''
        self.PolyInhomDict=PolyInhomDict
        #will be performed for every PolygonInhomogeneity stored in the PolyInhomDict:
        for item in self.PolyInhomDict:
            ItemNow=self.PolyInhomDict[item]

            x1=ItemNow.xylist[0][0]
            y1=ItemNow.xylist[0][1]

            x2=ItemNow.xylist[1][0]
            y2=ItemNow.xylist[1][1]
            i=0
            #performs a small step to the left of the line's center:
            xTestLeft,yTestLeft=makeaMove(x1,y1,x2,y2,"left")
            xTestRight,yTestRight=makeaMove(x1,y1,x2,y2,"right")
            #returns the aquifer system on the left side of the line's center:
            links= self.modelParent.aq.findAquiferData(xTestLeft,yTestLeft)
            #returns the aquifer system on the right side of the line's center:
            rechts= self.modelParent.aq.findAquiferData(xTestRight,yTestRight)
            a,b= leftright(links,rechts, self.PolyInhomDict, self.ml) #does nothing?
            aqin=links #aquifer system on the left side
            aqout=rechts #aquifer system on the right side
            xylist=ItemNow.xylist
            AquiferSystemInhomogeneity(self.modelParent,xylist,aqin,aqout)

class ShpElements:
    '''ShpElements:
    the basic shape-element that TimML-shape-elements will be derived from
    ---
    info : TShape.self
    shpObject : number of the current shape that will be treated
    ---
    '''
    def __init__(self,info,shpObject):
        self.filename=info.filename #filename of current shapefile
        self.elements=info.elements #range of length 'num_shapes' (used for iteration)
        self.shpType=info.shpType #shp-type as defined by ESRI-shapfile code
        self.shp=info.shp #shapefile-instance
        self.ml=info.ml #parent TimML-model
        self.shpObject=shpObject #shape-number that will be treated
        self.modelParent=info.modelParent #parent TimML-model
        self.dbf = dbflib.DBFFile(self.filename) #dbf-file-instance
        #fieldDict will contain name and lenght of the dbf-File fields:
        self.fieldDict={}
        for i in range(self.dbf.field_count()):
            self.fieldDict[self.dbf.field_info(i)[1]]=self.dbf.field_info(i)[2]
        #dbf-record will be read from dbf for currend shape:
        self.shpObject_dbf=self.dbf.read_record(shpObject)
        try:
            self.element_label=self.shpObject_dbf["LABEL"] #each element should have a label
        except:
            print "%s does not contain a 'LABEL' field" % self.filename
        #the current shape is be read:
        self.element=self.shp.read_object(shpObject)
        self.PolyInhomDict=info.PolyInhomDict
        self.xylist=info.xylist

    def __shapeCheck__(self):
        '''__ShapeCheck__():
        will check how many line-segments are included within every shape
        If one element contains multiple line-segments all line-segments will
        receive the same parameter-values as defined in the shpapefile's datatable
        ---
        returns:
        - boolean value: True if only a single line-segment is found
                        False if more than one line-segment ist found
        - the total number of line-segments that was found
        '''
        CheckElement=self.element
        CheckSingleElement=False

```

```

NumberLineSegments=0
ShapeInfo=numpy.shape(CheckElement.vertices()[0])
assert ShapeInfo[1] == 2, "The given Shapfile is no 'Polyline'-shapefile"
if ShapeInfo[0] == 2: #just one line-segment
    CheckSingleElement=True
    NumberLineSegments=1
elif ShapeInfo[0] > 2: #multiple line-segments
    CheckSingleElement=False
    NumberLineSegments=ShapeInfo[0]-1
return CheckSingleElement, NumberLineSegments

def __fillParam__(self,paramList):
    '''__fillParam__(paramList):
    all within 'paramList' defined parameters will be read from dbf-file
    ---
    paramList : list of field-names (dbf-field-names / parameter-field-names)
    ---
    returns:
        - dictionary that contains parameter-values that where read from
          shapefile's datatable
    ---
    '''
    param={}
    for fieldName in paramList:
        try:
            if fieldName<>"LABEL":
                #param is filled from dbf:
                param[fieldName]=eval(str(self.shpObject_dbf[fieldName]))
            else:
                #param is filled from dbf:
                param[fieldName]=str(self.shpObject_dbf[fieldName])
        except:
            print "Error while attempting to read the field '%s' from %s"\
                % (fieldName,self.filename)
    return param

def __prepareXYLIST__(self):
    '''__prepareXYLIST__():
    reads coordinates for all points of a polygon-shape and prepares the
    coordinates for the use within TimML
    ---
    returns:
        - string that contains the list of coordinates
        - list that contains the coordinates
    ---
    '''
    #extract the coordinates of all points of the polygon:
    verticesPI=self.element.vertices()[0]
    verticesPI=array(verticesPI) #convert to array to perform array operations
    #reverse the order of coordinates as TimML requires counterclockwise coordinates:
    verticesPI=verticesPI[::-1,:]
    #chop off the last coordinate as TimML does not need the start coordinate twice:
    verticesPI=verticesPI[:-1,:]
    xylist=verticesPI #verticesPI is now a list of coordinates ready for use in TimML
    xylistSTR=str(xylist.tolist())
    xylist=xylist.tolist()
    return xylist, xylistSTR

def __setXY1XY2__(self,LineSegmentNumber,preparePlotting=True):
    '''__SetXY1XY2__(Element,LineSegmentNumber,preparePlotting=True):
    start and stop xy-coordinates of a line-segment will be returned and
    added to self.xylist for later plotting-routines
    ---
    LineSegmentNumber: current iteration number of the line-segment to be treated
    preparePlotting : if True (default) the line will be added to the
                      self.xylist that will be used for later plotting
    ---
    returns:
        - the start x-coordinate
        - the start y-coordinate
        - the stop x-coordinate
        - the stop y-coordinate
    ---
    '''
    Element=self.element
    #extract the coordinates of all points of the polygon:

```

```

ElementVertices=Element.vertices()[0]
x1=ElementVertices[LineSegmentNumber][0]
x2=ElementVertices[LineSegmentNumber+1][0]
y1=ElementVertices[LineSegmentNumber][1]
y2=ElementVertices[LineSegmentNumber+1][1]
if preparePlotting:
    self.xylist.append([(x1,y1),(x2,y2)])
return x1, y1, x2, y2

def __setXY__(self,preparePlotting=True):
    '''__SetXY__(Element, preparePlotting=True):
    xy-coordinates of a shape-point will be returned and
    added to self.xylist for later plotting-routines
    ---
    preparePlotting : if True (default) the point will be added to the
                      self.xylist that will be used for later plotting
    ---
    returns:
        - the start x-coordinate
        - the start y-coordinate
    ---'''
    Element=self.element
    ElementCoordinates=Element.vertices()[0]
    x=ElementCoordinates[0] #x coordinate is read set
    y=ElementCoordinates[1] #y coordinate is read set
    if preparePlotting:
        self.xylist.append(ElementCoordinates)
    return x, y

def __listCheckItem__(self,paramItem):
    '''__listCheckItem(paramItem,singleEntry):
    checks if the parameter is in type: "list" and converts it if not;
    needed as many parameters have to be entered as lists within TimML
    ---
    paramItem : a parameter that will be checked
    ---
    returns:
        - parameter-list
    ---'''
    if type(paramItem) == list:
        pass
    else:
        try:
            paramItem = list(paramItem)
        except:
            paramItem = [paramItem]
    return paramItem

class Cas(ShpElements):
    def add(self,itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'CircAreaSink' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : if shp-file contains multiple CircleAreaSinks 'itemNumber'
                     will count up (newItemNumber)
        ---
        returns:
            self.elements, newItemNumber
        '''
        circle=self.element
        #custom variables here:
        minimumX=circle.extents()[0][0]
        minimumY=circle.extents()[0][1]
        maximumX=circle.extents()[1][0]
        Rp=abs(abs(maximumX)-abs(minimumX))*0.5 #the radius of the circle is calculated
        xp=minimumX+Rp #x-coordinate of circle-center
        yp=minimumY+Rp #y-coordinate of circle-center
        #custom reading from dbf-file here:
        paramList=["INFIL","LAYER","LABEL"] #all fields that are required for HeadLineSinks
        param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled
        self.dbf_write=dbflib.open(self.filename, "r+b") #prepare dbf-file for writing
        #center coordinates and radius is written to shp-file
        try:
            self.dbf_write.write_record(self.shpObject, {'XP': xp, 'YP': yp, 'RP': Rp})

```

```

except:
    print "CircleAreaSink shp-file: %s has no 'XP' and/or 'YP' and/or 'RP' field(s)"\
        %self.filename
    self.dbf_write.close() #close dbf-file after writing
    param["LAYER"]=self.__listCheckItem__(param["LAYER"])
    self.elements[itemNumber]=CircAreaSink(self.modelParent,xp,yp,Rp,param["INFIL"],\
        param["LAYER"],param["LABEL"])
    newItemNumber=itemNumber+1
    return self.elements, newItemNumber

class Ls(ShpElements):
    def add(self,itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'LineSink' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : if shp-file contains multiple LineSinks 'itemNumber'
                     will count up by one for every LineSink-segment
        ---
        returns:
            newItemNumber
        '''
        #ls - LineSink here:
        #try:
        #LineSink
        LS=self.element
        SingleElement, NumberLineSegments = self.__shapeCheck__()
        #all fields that are required for HeadLineSinks:
        paramList=["SIGMA","LAYERS","LABEL"]
        param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled
        param["LAYERS"]=self.__listCheckItem__(param["LAYERS"])
        if SingleElement:
            x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(0,True)
            self.elements[itemNumber]=LineSink(self.modelParent, x1, y1, x2, y2, \
                param["SIGMA"], param["LAYERS"], label=param["LABEL"])
            newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber
        else:
            for i in range(NumberLineSegments):
                x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(i,True)

                Label=param["LABEL"] + "_%03d_of_%03d" %(i+1, NumberLineSegments)
                self.elements[itemNumber]=LineSink(self.modelParent, x1, y1, x2, y2,\
                    param["SIGMA"], param["LAYERS"], label=Label)
                newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber

class Hls(ShpElements):
    def add(self,itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'HeadLineSink' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : if shp-file contains multiple HeadLineSinks 'itemNumber'
                     will count up by one for every HeadLineSink-segment
        ---
        returns:
            self.elements, newItemNumber
        '''
        paramList=["HEAD","LAYERS","LABEL"] #all fields that are required for HeadLineSinks
        param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled

        #shape of the HeadLineSink has to be checked for later treatment:
        SingleElement, NumberLineSegments = self.__shapeCheck__()
        param["LAYERS"]=self.__listCheckItem__(param["LAYERS"])
        if SingleElement:
            x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(0,True)
            self.elements[itemNumber]=HeadLineSink(self.modelParent, x1, y1, x2, y2,\
                param["HEAD"], param["LAYERS"], label=param["LABEL"])
            newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber
        #if Element contains more than the two end-vertices the same param-values
        #will be applied to all line-segments:
        else:
            for i in range(NumberLineSegments):

```

```

        x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(i,True)
        Label=param["LABEL"] + "_%03d_of_%03d" %(i+1, NumberLineSegments)
        self.elements[itemNumber]=HeadLineSink(self.modelParent, x1, y1, x2, y2,\
            param["HEAD"], param["LAYERS"], label=Label)
        newItemNumber=itemNumber+1
    return self.elements, newItemNumber

class Rls(ShpElements):
    def add(self,itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'ResLineSink' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : if shp-file contains multiple ResLineSinks 'itemNumber'
                     will count up by one for every ResLineSink-segment
        ---
        returns:
            self.elements, newItemNumber
        '''
        #all fields that are required for ResLineSinks:
        paramList=["HEAD","LAYERS","RES","WIDTH","LABEL"]
        param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled

        #shape of the ResLineSink has to be checked for later treatment:
        SingleElement, NumberLineSegments = self.__shapeCheck__()
        param["LAYERS"]=self.__listCheckItem__(param["LAYERS"])
        if SingleElement:
            x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(0,True)
            self.elements[itemNumber]=ResLineSink(self.modelParent, x1, y1, x2, y2,\
                param["HEAD"],param["RES"], param["WIDTH"],list(param["LAYERS"]),\
                label=param["LABEL"])
            newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber
        #if Element contains more than the two end-vertices the same param-values
        #will be applied to all line-segments:
        else:
            for i in range(NumberLineSegments):
                x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(i,True)
                Label=param["LABEL"] + "_%03d_of_%03d" %(i+1, NumberLineSegments)
                self.elements[itemNumber]=ResLineSink(self.modelParent,\
                    x1, y1, x2, y2, param["HEAD"],param["RES"],param["WIDTH"],\
                    param["LAYERS"], label=Label)
                newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber

class nWell(ShpElements):
    def add(self,itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'HeadLineSink' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : if shp-file contains multiple Wells 'itemNumber'
                     will count up by one for every Well
        ---
        returns:
            self.elements, newItemNumber
        '''
        aWell=self.element
        #what kind of elements are included within the shape file?
        if numpy.shape(aWell.vertices())== (1,2):
            pass #no treatment necessary, every element is a point
        else:
            print "Error while reading points from %s. File seems to be no point-shape-file"\
                %self.filename

        #custom variables here:
        xw,yw=self.__setXY__(True) #xy-coordinates are set
        paramList=["QW","RW","LAYERS","LABEL"] #all fields that are required for Wells
        param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled
        param["LAYERS"]=self.__listCheckItem__(param["LAYERS"])

        self.elements[itemNumber]=Well(self.modelParent, xw, yw,\
            param["QW"], param["RW"], param["LAYERS"], param["LABEL"])
        newItemNumber=itemNumber+1
    return self.elements, newItemNumber

```

```

class PolygonInhomShp(ShpElements):
    def add(self):
        ''' add():
        adds TimML-'PolygonInhom' from shp-file to TimML model
        ---
        returns:
            self.PolyInhomDict
        '''
        #the polygon XY-list will be prepared for TimML:
        xylst, xylstSTR = self.__prepareXYLIST__()
        #each element within the shape-file should have a Naquifers entry
        #telling how many aquifers the inhomogeneity has:
        try:
            Naquifers=eval(str(self.shpObject_dbf["NAQ"]))
        except:
            print "Error while attempting to read the field 'NAQ' from %s" % self.filename
            param={} #dict used for parameters
            paramList=["K","ZB","ZT","N"] #all fields that are required for PolygonInhoms
            # Parameters 'C' and 'NLL' are needed for multi-layer-aquifers
            listCheckItems=[]
            if Naquifers > 1:
                paramList.append("C")
                paramList.append("NLL")
                listCheckItems=["K", "ZB", "ZT", "N", "C", "NLL"]
            param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled
            if Naquifers == 1:
                listCheckItems=["K","ZB","ZT","N"]
                param["C"]=[]
                param["NLL"]=[]
            #parameters that have to be entered as lists are checked here:
            for item in listCheckItems:
                param[item] = self.__listCheckItem__(param[item])
            temp=PolygonInhom(self.modelParent, Naquifers, param["K"], param["ZB"],\
                param["ZT"], param["C"], xylst, param["N"], param["NLL"])
            self.PolyInhomDict[self.element_label]=temp
            return self.PolyInhomDict

class ModelConst(ShpElements):
    def add(self, itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'HeadLineSink' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : just a dummy as every model can just contain one constant
        ---
        returns:
            self.elements, newItemNumber
        '''
        aConst=self.element
        #what kind of elements are included within the shape file?
        if numpy.shape(aConst.vertices())== (1,2):
            pass #no treatment necessary, every element is a seperate point.
        else:
            print "Error while reading points from %s. File seems to be no point-shape-file"\
                %self.filename
            #custom variables here:
            xr=aConst.vertices()[0][0] #x coordinate of well is read out
            yr=aConst.vertices()[0][1] #y coordinate of well is read out
            paramList=["HEAD","LAYER","LABEL"] #all fields that are required for Constants
            param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled
            param["LAYER"]=self.__listCheckItem__(param["LAYER"])
            self.elements[itemNumber]=Constant(self.modelParent, xr, yr, param["HEAD"], \
                param["LAYER"], param["LABEL"])
            newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber

class Pas(ShpElements):
    def add(self,itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'PolyAreaSink' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : if shp-file contains multiple PolyAreaSinks 'itemNumber'
            will count up
        ---
        returns:

```

```

        self.elements, newItemNumber

'''
#the polygon XY-list will be prepared for TimML:
xylist, xylistSTR = self.__prepareXYLIST__()
#custom reading from dbf-file here:
infil=self.shpObject_dbf["INFIL"] #Infiltration is read from dbf-file
paramList=["INFIL","LABEL"] #all fields that are required for Constants
param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled
self.elements[itemNumber]=PolyAreaSink(self.modelParent,xylist,param["INFIL"],\
    label=param["LABEL"])
newItemNumber=itemNumber+1
return self.elements, newItemNumber

class Lsd(ShpElements):
    def add(self,itemNumber):
        ''' add(itemNumber):
        adds TimML-'LineSinkDitch' from shp-file to TimML model
        ---
        itemNumber : if shp-file contains multiple LineSinkDitches 'itemNumber'
            will count up by one for every LineSinkDicht-segment
        ---
        returns:
            self.elements, newItemNumber
        '''
        #all fields that are required for LineSinkDitches:
        paramList=["Q","LAYERS","RES","WIDTH","LABEL"]
        param = self.__fillParam__(paramList) #param dict will be filled
        LineSD=self.element
        param["XYLIST"]=LineSD.vertices()[0] #coordinates of nodes are passed on to xylist
        self.xylist.append(LineSD.vertices()[0]) #add line to xylist for later plotting
        #shape of the LineSinkDitch has to be checked for later treatment:
        SingleElement, NumberLineSegments = self.__shapeCheck__()
        param["LAYERS"]=self.__listCheckItem__(param["LAYERS"])
        if SingleElement:
            x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(0,True)
            self.elements[itemNumber]=LineSinkDitch(self.modelParent, param["XYLIST"],\
                param["Q"],param["RES"], param["WIDTH"],list(param["LAYERS"]),\
                label=param["LABEL"])
            newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber
        #if Element contains more than the two end-vertices the same param-values
        #will be applied to all line-segments:
        else:
            for i in range(NumberLineSegments):
                x1,y1,x2,y2 = self.__setXY1XY2__(i,True)
                Label=param["LABEL"] + "_%03d_of_%03d" %(i+1, NumberLineSegments)
                self.elements[itemNumber]=LineSinkDitch(self.modelParent,\
                    param["XYLIST"], param["Q"],param["RES"],param["WIDTH"],\
                    param["LAYERS"], label=Label)
                newItemNumber=itemNumber+1
            return self.elements, newItemNumber

class pegelControl(ShpElements):
    def findHead(self,itemNumber,whatLayer):
        ''' addHeads(itemNumber):
        calculates Heads for given layer for every point in given point-shp-file
        and stores results in table-field "TimML"
        '''
        aHead=self.element
        #what kind of elements are included within the shape file?
        if numpy.shape(aHead.vertices())== (1,2):
            pass #no treatment necessary, every element is a point
        else:
            print "Error while reading points from %s. File seems to be no point-shape-file"\
                %self.filename

        #custom variables here:
        x,y=self.__setXY__(True) #xy-coordinates are set

        tempHead=self.modelParent.head(layer=whatLayer, x=x,y=y)
        self.dbf_write=dbfllib.open(self.filename, "r+b") #prepare dbf-file for writing
        #center coordinates and radius is written to shp-file

        self.dbf_write.write_record(self.shpObject, {'TimHead': tempHead})

```

```
#    print "CircleAreaSink shp-file: %s has no 'TimHead' field"\
#          %self.filename
self.dbf_write.close() #close dbf-file after writing
#TShape.py ---END---
```

C.2 trace_tim.py

```
#!/usr/bin/python

'''
trace_tim.py - contains the particle tracking routines as used
in the ERGO-project
This file is part of the ERGO extention of the TimML library
and is distributed under the GNU LPGL. See the TimML.py file
for more details.
(c) Thorben Roemer, 2007
'''

from TimML import *
import pylab as pl
import numpy

class TraceTim:
    '''TraceTim:
    contains different routines of particle tracking
    so far particle-walls and a particle-well have been implemented
    '''
    xrange=[]
    yrange=[]
    zrange=[]
    t=[] #time of particle
    xLength=[] #used for length of tracewall in x-dimension
    yLength=[] #used for length of tracewall in y-dimension
    zLength=[] #used for depth of tracewall or length of well-screening
    xyLength=[] #used for length of tracewall
    xyz=[] #xyz coordinates of particle
    stop=[] #stopreason of particle
    pplayer=[] #layer of particle
    tinyStep=1E-10
    def __init__(self,ml,step,filename,twoD=1,tmax=10000,Nmax=10,tstart=0,labfrac=2.0,\
                  Hfrac=5.0>window=[-1e30,-1e30,1e30,1e30]):
        self.step=step #the stepsize of the particles
        self.ml=ml #model parent
        self.filename=filename
        self.twoD=twoD #not used so far
        self.tmax=tmax #maximum time of tracing
        if self.step<0: #starttime will be set to negative start value:
            self.tstart=-numpy.abs(tstart)
        else:
            self.tstart=tstart
        self.tstart=tstart #starting time of particles
        self.Nmax=Nmax #maximum steps of tracing
        self.labfrac=labfrac #see TimML
        self.Hfrac=Hfrac #see TimML
        self.window=window #particles are traced within the window
        self.xytotal=[]
        self.xyiter=[]
        self.ziter=[]

    def arangeParticles(self,pnum):
        '''arangeParticles(pnum):
        used for even distribution around particles around a point or well
        ---
        pnum : numbers of particles
        ---
        returns:
            an (range)
        ---'''
        an = numpy.arange(0,2*numpy.pi,float(numpy.pi)/float(pnum*0.5))
        return an

    def setPositions(self,setStart,setStop,Steps):
        '''setPositions(setStart,setStop,Steps):
        returns a range of values that are evenly distributed
        between 'setStart' and 'setStop' with a number of 'Steps' steps
        ---
        setStart : start-value
        setStop : stop-value
```

```

Steps      : number of steps inbetween start- and stop-value
---
returns:
    - range of evenly distributed values
---'''
startstop=[setStart,setStop]
startstop.sort()
Length=startstop[1]-startstop[0]
if Length==0:
    startstopRange=numpy.ones(Steps)*startstop[0]
else:
    StepSize=float(Length)/float(Steps)
    startstopRange=numpy.arange(startstop[0]+StepSize*0.5,\
                                startstop[1]+self.tinyStep,StepSize,dtype='f')
return startstopRange

def trace(self, requiredArgs, shpType, trmode,**kwargs):
    '''trace(requiredArgs,shpType,trmode,**kwargs):
    ---
    requiredArgs :
    shpType      :
    trmode       :
    **kwargs     :
    ---
    returns:
        traceline results
    '''
    #all available functions are listed here by shp-type:
    byShpType= {"w": self.traceWell,\
                "particlewall": self.traceWall,\
                #"hls": None,\ #not yet implemented
                #"rls": None,\ #not yet implemented
                }
    self.step=requiredArgs["STEP"] #stepsize
    self.tstart=requiredArgs["TSTART"] #start-time
    self.tmax= requiredArgs["TMAX"] #maximum time
    self.Nmax= requiredArgs["NMAX"] #maximum number of steps
    self.labfrac= requiredArgs["LABFRAC"] #see TimM1
    self.Hfrac= requiredArgs["HFRAC"] #see TimML
    self.window= requiredArgs["WINDOW"] #window in which the particles will be traces
    self.xylist=requiredArgs["XYLIST"]
    temp_retur=None
    #the correct function will be selected according to shp-type:
    temp_retur=byShpType[shpType](requiredArgs,trmode,kwarg)
    return temp_retur

def traceWall(self,requiredArgs,trmode,kwarg):
    '''
    traceWall(requiredArgs):

    returns xyz, t, stop, pylayer, ziter, xytotal, xyiter

    requiredArgs      : Dictionary that has to contain the arguments that are
                        required by the specific trmode (see below)
    trmode            : the tracemode that will be applied for the traceWall
                        'number' or 'distance' allowed so far
    -----

    requiredArgs for trmode: 'number':

    requiredArgs for trmode: 'distance':

    '''
    self.zupper=requiredArgs["ZUPPER"]
    self.zlower=requiredArgs["ZLOWER"]
    xySteps=requiredArgs["XYSTEPS"]
    zSteps=requiredArgs["ZSTEPS"]
    self.xylist.sort() #xylist will be sorted smaller x-value is now first
    ax=0
    ay=0
    aSIN=0
    aCOS=0
    aLength=0

```

```

bLength=0
if self.xylist[0][0]==self.xylist[1][0]:
    self.xLength=0
    ax=0
    aLength=self.xLength
    #first y-coordinate is lower than second y-coordinate
    if self.xylist[0][1]<self.xylist[1][1]:
        #length of y is calculated
        self.yLength=self.xylist[1][1]-self.xylist[0][1]
        ay=1
    #first y-coordinate is higher than second y-coordinate
    elif self.xylist[0][1]>self.xylist[1][1]:
        self.yLength=self.xylist[0][1]-self.xylist[1][1]
        ay=-1
else:
    #first y-coordinate is lower than second y-coordinate
    if self.xylist[0][1]<self.xylist[1][1]:
        self.yLength=self.xylist[1][1]-self.xylist[0][1]
        self.xLength=self.xylist[1][0]-self.xylist[0][0]
        aLength=self.xLength
        bLength=self.yLength
        aAngle=numpy.arctan((float(aLength)/float(bLength))) #angle alpha
        aSIN=numpy.sin(aAngle)
        aCOS=numpy.cos(aAngle)
        ax=aSIN
        ay=aCOS
    #first y-coordinate is higher than second y-coordinate
    elif self.xylist[0][1]>self.xylist[1][1]:
        self.yLength=self.xylist[0][1]-self.xylist[1][1]
        self.xLength=self.xylist[1][0]-self.xylist[0][0]
        aLength=self.yLength
        bLength=self.xLength
        aAngle=numpy.arctan((float(aLength)/float(bLength))) #angle alpha
        aSIN=numpy.sin(aAngle)
        aCOS=numpy.cos(aAngle)
        ax=aCOS
        ay=aSIN*-1
self.zLength=self.zupper-self.zlower #z dimension of the tracelwall
self.xyLength=numpy.sqrt(self.xLength**2+self.yLength**2) #length of the tracewall
assert self.zlower<self.zupper, "ZLOWER has to be smaller than ZUPPER, \
please check your input!"
xyStepSize=float(self.xyLength)/float(xySteps)
zStepSize=float(self.zLength)/float(zSteps)
particlesTotal=zSteps*xySteps
self.zrange=self.setPositions(zupper,zlower,zLength,zSteps)
self.xrange=self.setPositions(self.xylist[0][0],self.xylist[1][0],xySteps)
self.yrange=self.setPositions(self.xylist[0][1],self.xylist[1][1],xySteps)
for i in range(len(self.zrange)):
    for y in range(len(self.xrange)):
        zipXYZ.append((self.zrange[i],self.xrange[y],self.yrange[y]))
xyz=[]
t=[]
stop=[]
pylayer=[]
for i in range(len(zipXYZ)):
    x = zipXYZ[i][1]; y = zipXYZ[i][2]; z = zipXYZ[i][0]
    [xyz,t,stop,pylayer] = traceline(self.ml,x,y,z,step,tmax,maxsteps=Nmax,\
labfrac=self.labfrac,Hfrac=Hfrac>window)
    x = xyz[:,0]
    y = xyz[:,1]
    z = xyz[:,2]
    self.xyz.append(xyz)
    self.t.append(t)
    self.stop.append(stop)
    self.pylayer.append(pylayer)
return self.xyz, self.t, self.stop, self.pylayer

def traceWell(self,requiredArgs, trmode,kwargs):
    '''traceWell(requiredArgs,trmode,kwargs):

    ---
    requiredArgs :
    trmode       :
    kwargs       :

```

```

---
returns:
    - xyz, t, stop, pylayer, ziter, xytotal, xyiter
---'''

ml=self.ml #model parent
step=requiredArgs["STEP"] #stepsize
tmax= requiredArgs["TMAX"] #maximum time
tStart= requiredArgs["TSTART"] #start time
if step<0: #tStart will be set to negative value if timestep is negative
    tStart=-numpy.abs(tStart)
Nmax= requiredArgs["NMAX"] #maximum number of steps
labfrac= requiredArgs["LABFRAC"]
Hfrac= requiredArgs["HFRAC"]
window= requiredArgs["WINDOW"]#window in which the particles will be traced
xylist=requiredArgs["XYLIST"]
self.zupper=requiredArgs["ZUPPER"]
self.zlower=requiredArgs["ZLOWER"]
pnum=requiredArgs["PNUM"]
zParticleHeights=[]
firstZStep=0
rx=xylist[0]
ry=xylist[1]
self.stop=[]
self.xytotal=[]
self.xyiter=[]
self.ziter=[]
self.xyz=[]
self.t=[]
self.pylayer=[]
#in 'tinter'-mode the upper and lower boundary that the particles
#will be started within have to be provided by 'ZUPPER' and 'ZLOWER':
if trmode=="tinter":
    assert self.zupper>self.zlower, "'ZUPPER' appears to be smaller than 'ZLOWER';\
    please modify your input"

    self.zLength=self.zupper-self.zlower
    #number of steps in z-locations that particles shall be started from:
    zSteps=requiredArgs["ZSTEPS"]
    startStop=kwargs["timeIntervals"] #time intervals for particle-tracking
    if zSteps==[]: #all prarticle are started from the same z-location
        zSteps=1
    else:
        assert zSteps > 0 , "zSteps has to be a positive integer value"
    if self.zLength==0:
        if zSteps == 1:
            pass
        else:
            zSteps=1
            print "zupper and zlower have the same value; zSteps will\
            be set to 1"
    particlesPerStep=pnum
    particlesTotal=pnum*zSteps
    an=self.arangeParticles(particlesPerStep)
    zStepSize=float(self.zLength)/float(zSteps)
    zPositions=self.setPositions(self.zupper,self.zlower,zSteps)
    for zPos in zPositions: #for all zSteps particles will be started
        x=rx+numpy.cos(an)
        y=ry+numpy.sin(an)
        z=zPos*numpy.ones(len(an))
        for j in range(len(z)):
            iterSteps=0
            xValue=None
            yValue=None
            zValue=None
            for timeSteps in startStop:
                if iterSteps==0:
                    iterSteps+=1
                    xValue,yValue,zValue=x[j],y[j],z[j]
            tStart=timeSteps[0]
            if step<0:
                tStart=-numpy.abs(tStart) #tStart has to be negative
            tmax=timeSteps[1]
            #if tmax<11: ##make stepsize smaller for first intervals##
            #    step=-5.0
            #else:

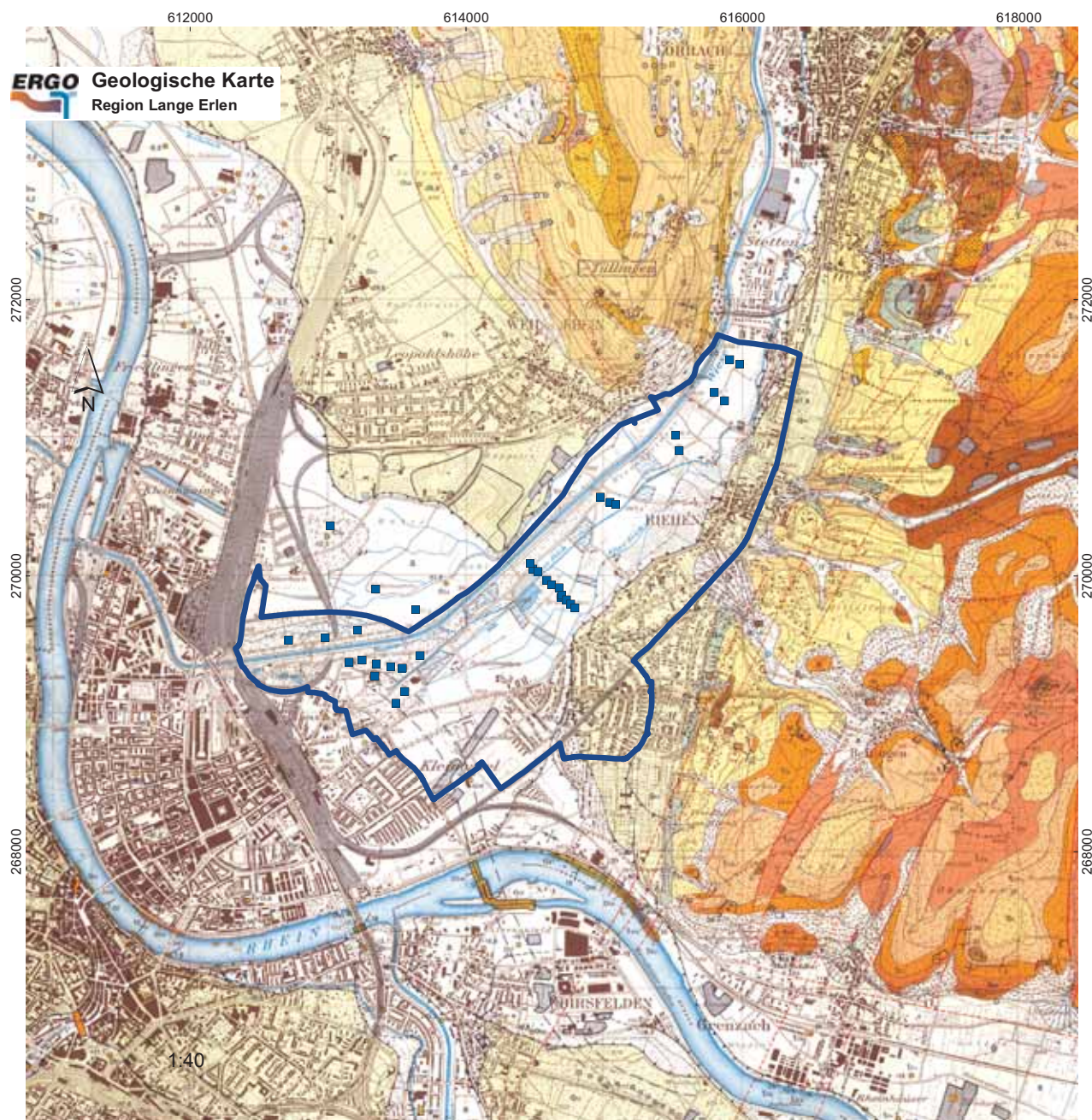
```

```

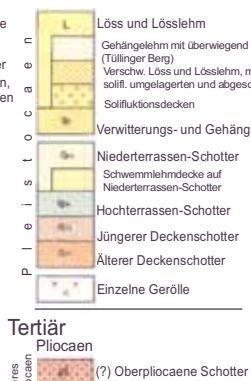
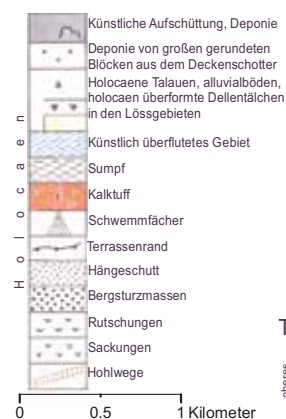
        step=requiredArgs["STEP"]
        [xyz,t,stop,pylayer] = traceline(self.ml,xValue,yValue,zValue,\
            step,tmax,maxsteps=Nmax,tstart=tStart,\
            labfrac=self.labfrac,Hfrac=Hfrac>window=window)
        xValue, yValue,zValue=xyz[-1][0],xyz[-1][1],xyz[-1][2]
        self.xyz.append(xyz)
        self.t.append(t)
        self.stop.append(stop)
        self.pylayer.append(pylayer)
        self.xyiter.append(j+1)
        self.xyttotal.append(len(z))
        self.ziter.append(zPos)
        if stop[0]=='flowed out of top of aquifer system':
            break
        elif stop[0]=='reached element of type linesink':
            break
        elif stop[0]=='reached element of type well':
            break

    xyz=self.xyz
    t=self.t
    stop=self.stop
    pylayer=self.pylayer
    xyiter=self.xyiter
    xyttotal=self.xyttotal
    ziter=self.ziter
    del self.xyttotal
    del self.xyiter
    del self.ziter
    del self.xyz
    del self.t
    del self.stop
    del self.pylayer
    return xyz, t, stop, pylayer, ziter, xyttotal, xyiter
#trace_tim.py ---END---
```


D Geologische Karte



Quartär



Jura



Trias



■ Brunnen
WSG Lange Erlen

Koordinatensystem: CH1903 LV03
Darstellung: Oblique Mercator
Datenquelle: Schweizerische Geol. Kommis. (1971); IWB; INTERREG II

Abbildung D.1: Ausschnitt der Geologischen Karte - Blatt 1047 Basel (verändert nach: SCHWEIZERISCHE GEOLOGISCHE KOMMISSION, 1971).

Ehrenwörtliche Erklärung:

Hiermit erkläre ich, dass die Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel angefertigt wurde.

Freiburg i. Br., 28. November 2007

Thorben Römer

