



GEORES CONSULT
MEUSEL & PARTNER

ModGeo3D

Simulationsmodell für die

- **Zweiphasenströmung Gas-Wasser**
- **Dichteabhängige Flüssigkeits- bzw. Gasströmung**
- **Durchlässigkeitsänderungen mit Druck, Temperatur, Gefrieren der Porenflüssigkeit**
- **Gespannte und ungespannte Grundwasserströmung**
- **Mehrkomponenten-Stofftransport**
- **Gleichgewichtschemie nach *PhreeqC***
- **Double Porosity-Konzept in Stofftransport und Chemie**
- **Wärmetransport**
- **Thermodynamik mit Phasenwechsel**
- **Flüssiggas-Verdampfung/Kondensation (CH₄, CO₂, N₂)**
- **Wärmetransport mit gekoppeltem Erdwärme-Sondenmodell (*ModTherm*)**

Autoren: Dr.-Ing. Frieder Häfner

Prof.i.R. für Geoströmungstechnik an der TU Bergakademie Freiberg

GeoRes Consult, Meusel & Partner

Ziegelgasse 12, 09599 Freiberg

Tel. +49 3731 168 745

Email: frieder.haefner@geores-freiberg.de

email: frieder.haefner@tbt.tu-freiberg.de

Dipl.-Geoök.Linda Meusel, linda.meusel@geores-freiberg.de

Freiberg, September 2015

Gliederung

1	GRUNDGLEICHUNGEN DER EIN- UND MEHRPHASENSTRÖMUNG IN PORÖSEN MEDIEN.....	6
1.1	Das <i>Double Porosity</i> -Konzept.....	7
1.2	Bilanz-Gleichungen in der Wasser- und Gasphase	7
1.3	Druck-Temperatur-abhängige Permeabilität	8
2	GRUNDGLEICHUNGEN DES STOFF- UND WÄRMETRANSPORTES IN PORÖSEN MEDIEN.....	9
3	NUMERISCHE LÖSUNG.....	11
3.1	Zweiphasenströmung Gas-Wasser.....	12
3.2	Zeitschrittsteuerung	12
3.3	Maßnahmen zur Rechenzeitbeschleunigung bei Stoff/Wärmetransport	13
3.4	Aktive Gittergröße bei Stoff- und Wärmetransport	14
4	CHEMISCHE REAKTIONEN/GLEICHGEWICHTSCHEMIE, THERMODYNAMIK.....	14
4.1	Chemische Reaktionen	14
4.2	Tensideinfluß.....	14
4.3	Thermodynamik mit Phasenwechsel	15
5	ORGANISATION DES PROGRAMMES.....	16
5.1	Datei {projekt}.rho	18
5.2	Keywords für Standardrechnungen	19
5.3	Zusätzliche Eingabe und für die Zweiphasenströmung Gas-Wasser	26
5.4	Aufbau einer Datei für RelPerm-Datasets	30

5.5	Zusätzliche Eingaben bei Nutzung der erweiterten Optionen in ModGeo3D	30
5.6	Vorgabe zusätzlicher Randbedingungen	35
5.7	Besonderheiten bei Einphasen-Gasströmung (bzw. Zweiphasenströmung mit Gas-Well, Gas-General Head Boundary or Constant Gas Boundary) oder Wärmequellen (heat well)	41
5.8	Inputdatei für <i>PhreeqC</i>	42
6	PROGRAMMSTART / DATEI BATCH.CON.....	43
6.1	Abarbeitung im Dialog/Batchbetrieb	44
6.2	Zu den Dialog-Abfragen	44
6.3	Ergebnissicherung für Fortsetzungsrechnungen.....	45

Symbolik

A	Fläche, m ²
C	Massenkonzentration, kg Komponente / kg Fluid
c	spezifische Wärmekapazität, J/(kg K)
D _m	molekularer Diffusionskoeffizient, m ² /s
D*	Dispersionsmatrix, m ² /s
g	Erdbeschleunigung, 9.81 m ² /s
h	Spiegelhöhe, m
k	Permeabilität, Durchlässigkeit, m ²
\dot{m}	Massenstromdichte des Fluids, kg/(m ³ s)
\dot{m}_C	Massenstromdichte der Komponente, kg/(m ³ s)
n	Porosität
n _m	mobile Porosität = Porosität des mobilen Fluids
n _{im}	immobile Porosität = Porosität des immobilen Wassers
p	Druck, Pa
p ₀	Bezugsdruck, Pa
p _c	Kapillardruck, Pa
Q	Volumenstrom, m ³ /s
\dot{Q}	Wärmestromdichte, W/m ³
R	Retardationsfaktor
S	Sättigung, auf den mobilen Porenraum bezogen
T	Temperatur, K, °C
t	Zeit, s
V	Volumen, m ³
w	Darcy-Geschwindigkeit, m/s
x	horizontale oder näherungsweise horizontale Koordinate, m (Bildschirm: von unten nach oben)
y	horizontale oder näherungsweise horizontale Koordinate, m (Bildschirm: von links nach rechts)
z	vertikale Koordinate, m (nach oben gerichtet)
z _g	Realgasfaktor = f(p,T,C)
β	Überstromfaktor für Double Porosity Konzept, s ⁻¹
η	dynamische Viskosität, Pa s
κ	isotherme Kompressibilität, Pa ⁻¹
δ	Dispersivität, m
δ _L	longitudinale Dispersivität, m
δ _{T,h}	transversal-horizontale Dispersivität, m
δ _{T,v}	transversal-vertikale Dispersivität, m
λ	Wärmeleitfähigkeit des Systems Gesteinsmatrix+Fluid, W/(m K)
λ _a	Abbaukoeffizient, s ⁻¹
ρ	Dichte, kg/m ³

Indices

F	Formation, Gestein
g	Gas
m	mobil

im	immobil
i	Gitternummer in x (läuft der x-Achse entgegen, Bildschirm: von oben nach unten)
j	Gitternummer in y (läuft mit der y-Achse, Bildschirm: von links nach rechts)
k	Gitternummer in z (läuft der z-Achse entgegen, vertikal von oben nach unten)
r	relativ
t	total
w	Wasser, Flüssigkeit

Das Simulationsmodell *ModGeo3D*

Vorbemerkung

ModGeo3D ist ein Simulationsmodell für

- die Grundwasserströmung, die dichteabhängige Flüssigkeitsströmung und die Zweiphasenströmung Gas-Wasser im Untergrund (Geo-Bereich),
- den reaktiven Mehrkomponententransport von Stoffkomponenten,
- den Wärmetransport und
- chemische Gleichgewichtsreaktionen bei allen Prozessen.

Es nutzt kartesische Koordinaten und erfasst die instationäre Fluidströmung, den instationären Stoff- und Wärmetransport und chemische Gleichgewichtsreaktionen in Form des angekoppelten Programmes **PhreeqC**.

Das Programm baut in seiner Entwicklung auf den Vorläufern für die Simulation der Grundwasserströmung und des Mehrkomponententransportes (**ModCalif**, **ModMST**, **Mod2Phase-thermo**) auf.

ModGeo3D läuft unter Windows und kann im Pre- and Postprocessing unter **Visual Modflow** (Version 2.0) von Waterloo Hydrogeologic und unter **CADSHILL** (IHU Nordhausen) betrieben werden.

Man unterscheidet fluide Phasen (Wasser - wässrige Lösung als benetzende Phase und Gas bzw. Öl als nichtbenetzende Phase) und Komponenten. Für die flüssige Wasserphase wird oft „Wasser“ als Kurzwort verwendet. Komponenten sind Bestandteile der Wasser- oder Gas/Ölphase. Chemisch gleiche Stoffe, die in beiden Phasen auftreten können, werden dennoch als unterschiedliche Komponenten betrachtet, jedoch ist ein Austausch möglich (z.B. durch Lösung/Rücklösung). Die Komponenten werden durch ihre Massenkonzentration (kg Komponente je kg Fluidphase) gekennzeichnet. In der Wasserphase und der Ölphase ist die Konzentration deshalb ausgedrückt in kg Komponente je kg Lösung, in der Gasphase in kg Komponente je kg Gas.

ModGeo3D kann zur Modellierung von Erdwärmesondenfeldern mit der Software **ModGeoTherm** gekoppelt werden. Dazu muss ein Ergebnisfile von **ModGeoTherm** (ews.xx) in den Block **#well**-Brunnen einbezogen werden (s. **#well**).

1 Grundgleichungen der Ein- und Mehrphasenströmung in porösen Medien

Das Programm beruht auf den Bilanzgleichungen der Masse bzw. Energie in jeder Phase. Weiterhin werden als Impulsgleichung das Darcy-Gesetz und die jeweiligen thermodynamischen Zustandsgleichungen für die Dichte berücksichtigt.

Der Porenraum wird durch die *effektive* Porosität n charakterisiert (*effektiv* im Sinne der Beteiligung am Strömungsprozess). Diese Porosität muss nicht übereinstimmen mit der *durchström-baren* Porosität des Stofftransportes.

Das Programm wurde ursprünglich für die Zweiphasenströmung Wasser-Gas entwickelt und erst später auch auf die Zweiphasenströmung Wasser-Öl erweitert. Deshalb ist oft nur die Gasphase erwähnt.

1.1 Das Double Porosity-Konzept

Das Double Porosity-Konzept wird im Programm nur auf den Stofftransport angewendet in der Form, dass die mobile Wasserphase (gemeinsam mit einer eventuellen Gasphase) den Porenraum n_m einnimmt, die immobile Wasserphase aber den Porenraum n_{im} immer vollständig ausfüllt – er ist immer mit Flüssigkeit gesättigt.

Für die **gesättigte Einphasenströmung Wasser** soll $n = n_m + n_{im}$ sein, da das gesamte Wasser an der kompressiblen Speicherung beteiligt ist. Für die **Grundwasserströmung** (Einphasenströmung Wasser mit einer möglichen freien Oberfläche) gilt in sehr guter Näherung die gleiche Annahme, da der kompressible Speicheranteil des Wassers im immobilen Porenraum gegenüber dem Speicheranteil des Porenvolumens bei freier Oberfläche verschwindend klein ist.

Für die **Zweiphasenströmung Gas-Wasser** soll im Standardfall die Porosität $n = n_m$ sein, da die Gassättigung, die nur im mobilen Porenraum definiert ist, die Kompressibilität des Zweiphasenraumes bestimmt. Es ist jedoch auch möglich, andere Vorgaben zu realisieren, da die Porositätswerte für Strömung und Transport getrennt vorgegeben werden.

1.2 Bilanz-Gleichungen in der Wasser- und Gasphase

Für die **Wasserphase** gilt:

$$\operatorname{div} \left\{ \frac{\rho_w k k_{rw}(S_w)}{\eta_w} (\mathbf{grad} p_w + \rho_w g \mathbf{grad} z) \right\} = \frac{\partial}{\partial t} \{ \rho_w S_w n \} - \dot{m}_w,$$

Im Fall der **Einphasenströmung Wasser** gilt stets: $S_w \equiv 1$, $k_{rw} \equiv 1$ und $p_w = p$.

Die zeitliche Ableitung wird in ausdifferenzierter Form wie folgt benutzt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ \rho_w S_w n \} = (\kappa_f \rho_w S_w + \kappa_w n S_w) \frac{\partial p_w}{\partial t} + \rho_w n \frac{\partial S_w}{\partial t} + \sum_j \frac{d\rho_w}{dc_j} \frac{\partial c_j}{\partial t} + \frac{d\rho_w}{dT} \frac{\partial T}{\partial t}$$

($j=1 \dots n_{\text{comp}}$).

Für die **Gasphase** ist:

$$\operatorname{div} \left\{ \frac{\rho_g k k_{rg}(S_w)}{\eta_g} (\mathbf{grad} p_g + \rho_g g \mathbf{grad} z) \right\} = \frac{\partial}{\partial t} \{ \rho_g (1 - S_w) n \} - \dot{m}_g$$

mit ähnlicher Schreibweise der Zeitableitung.

Im Fall der **Einphasenströmung Gas** gilt stets: $S_w \equiv 0$, $k_{rg} \equiv 1$ und $p_g = p$.

Die Sättigungen beider Phasen ist auf den mobilen Porenraum bezogen (der immobile Porenraum soll stets mit Wasser gefüllt sein) ergeben

$$S_w + S_g = 1$$

und der Kapillardruck

$$p_c(S_w) = p_g - p_w .$$

Die Kapillardruckgleichung wird dabei stückweise linearisiert nach:

$$p_c(S_w^{n+1}) = p_c(S_w^n) + \left[\frac{dp_c}{dS_w} \right]^n (S_w^{n+1} - S_w^n) .$$

(n = Zeitstufe).

Die Permeabilität (Durchlässigkeit) k wird für anisotrope Verhältnisse als Matrix berücksichtigt:

$$k = \begin{bmatrix} k_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & k_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & k_{zz} \end{bmatrix}$$

Im gegenwärtigen Ausbaurzustand des Programmes ist $k_{xx}=k_{yy}$

Als unbekannte Größen werden die Drücke für Wasser oder Gas und die Wassersättigung betrachtet. Die relativen Permeabilitäten für Wasser und Gas sowie der Kapillardruck werden tabellarisch als Funktion der Wassersättigung oder nach den bekannten Korrelationen vorgegeben.

1.3 Druck-Temperatur-abhängige Permeabilität

Die Permeabilität/Durchlässigkeit kann durch Porendruckabsenkungen oder durch starke Temperaturabsenkungen (Kältefrac) verändert werden. Dazu gelten folgende Korrelationen.

Für die Druckabhängigkeit gilt :

$$k(p) = k_{input} \times \exp\{-a_p \times (p_{initial} - p)\}$$

a_p = empirischer Faktor nach Labordaten (bar^{-1}).

Für den hydraulischen Frac soll eine quadratische Abhängigkeit gelten:

$$k = k_{initial} \times \text{Maßstabsfaktor} \times \left\{ \frac{p - p_{Frac}}{d\sigma} \right\}^2$$

wobei der Maßstabsfaktor zur möglichen Korrektur der initialen Permeabilität dient (default=1), $d\sigma$ ist ein Bezugswert für die Druckdifferenz, p_{Frac} der Fracdruck des Gesteins (bar).

Für die Temperaturabhängigkeit (Kältefrac) soll vorerst angenommen werden (bis zum Vorliegen belastbarer Laborergebnisse):

$$k = k_{input} + \text{Maßstabsfaktor} \times \frac{\{\beta_T \times \Delta T \times L_B\}^3}{12 \times L_B}, k, k_{input} \text{ in } m^2$$

ΔT – Temperaturabsenkung (K), β_T – linearer Wärmeausdehnungskoeffizient (K^{-1}) und einer Bezugslänge L_B (m). Die Bezugslänge soll aus Labormessungen ermittelt werden, sie hat die physikalische Bedeutung einer Länge mit genau einer durch Temperaturabsenkung hervorgerufener Kluft. Die obige Gleichung wird nur angewendet, wenn die Temperaturabsenkung größer ist als ein Schwellwert.

Die gleichen Abhängigkeiten gelten auch für die vertikale Transmissibilität.

Dichte/Viskosität

Die Dichten und Viskositäten für Flüssigkeit und Gas werden als mehrdimensionale Funktionen $\rho(p,T,C)$ und $\eta(p,T,C)$ berücksichtigt. Die Eckdaten dazu werden im File `{projekt}.rho` eingelesen. Für Gas existiert noch eine verbesserte Berechnungsmöglichkeit nach der Peng-Robinson Zustandsgleichung, jedoch nur dann, wenn alle Gaskomponenten des Jobs auch im Datenfile „ChemischeSpecies.dat“ gefunden werden.

2 Grundgleichungen des Stoff- und Wärmetransportes in porösen Medien

Die Gleichungen des Stofftransportes folgen aus der Bilanzgleichung für die Masse jeder Komponente, für den Wärmetransport aus der Wärmebilanz. Die Bilanzgleichungen des Stoff- und Wärmetransportes werden zunächst unabhängig voneinander betrachtet und gelöst. Für jede Komponente der **mobilen Wasserphase** gilt:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \{ (n_m D_m + \mathbf{D}^*) \rho \mathbf{grad} C - \mathbf{w}_w \rho C \} - n_m \lambda_a \rho C + \beta \rho (C_{im} - C) = \\ = \frac{\partial}{\partial t} \{ n_m S_w \rho C \} - \dot{m}_{cw} . \end{aligned}$$

Die Konzentration der **immobilen Wasserphase** folgt:

$$\beta \rho (C - C_{im}) - n_{im} \lambda_a \rho C_{im} = \frac{\partial}{\partial t} \{ n_{im} \rho C_{im} \} .$$

Für das Einporositätsmodell ist $\beta \equiv 0$ und vorstehende Gleichung entfällt..

Die Konzentrationen in der **Gasphase** berechnen sich nach

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \{ (n_m D_m + \mathbf{D}^*) \rho \mathbf{grad} C - \mathbf{w}_g \rho C \} - n_m \lambda_a \rho C = \\ = \frac{\partial}{\partial t} \{ n_m (1 - S_w) \rho C \} - \dot{m}_{cg} . \end{aligned}$$

Für die Temperaturberechnung gilt:

$$\operatorname{div} \{ (\lambda + (\rho c)_w \mathbf{D}^*) \mathbf{grad} T - \mathbf{w}_w (\rho c)_w T - \mathbf{w}_g (\rho c)_g T \} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} \{(\rho c)_{total} T\} - \dot{Q},$$

dabei ist die Darcy-Geschwindigkeit \mathbf{w} für jede Phase (w,g)

$$\mathbf{w} = - \frac{k k_r(S_w)}{\eta} (\mathbf{grad} p + \rho g \mathbf{grad} z)$$

und die totale Wärmekapazität

$$(\rho c)_{total} = (n_m S_w + n_{im})(\rho c)_w + n_m(1 - S_w)(\rho c)_g + \\ + (1 - n_m - n_{im})(\rho c)_f.$$

Anmerkung: In der obigen Gleichung muss die Zeitableitung auf der rechten Seite der Gleichung gesondert behandelt werden. Die Gleichung rührt aus dem Energieerhaltungssatz her (Enthalpiebilanz) mit

$$E = \int c(p, T) dT, \quad E - \text{spezifische Enthalpie}$$

so dass die partiellen Ableitungen der spezifischen Wärmekapazität c in $(\rho c)_{total}$ zwar nach den Konzentrationen C_i zu berücksichtigen sind, nicht aber nach der Temperatur T .

Molekulare Diffusion bzw. Wärmeleitung werden als skalare Größen betrachtet.

Die Matrix \mathbf{D}^* ist die Dispersionsmatrix für isotrope poröse Medien [Häfner et al., 1992].

$$\mathbf{D}^* = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix}$$

Die einzelnen Komponenten berechnen sich nach dem Dispersivitätsansatz aus

$$D_{xx} = \delta_L \frac{w_x^2}{|\mathbf{w}|} + \delta_{Th} \frac{w_y^2}{|\mathbf{w}|} + \delta_{Tv} \frac{w_z^2}{|\mathbf{w}|}$$

$$D_{yy} = \delta_L \frac{w_y^2}{|\mathbf{w}|} + \delta_{Th} \frac{w_x^2}{|\mathbf{w}|} + \delta_{Tv} \frac{w_z^2}{|\mathbf{w}|}$$

$$D_{zz} = \delta_L \frac{w_z^2}{|\mathbf{w}|} + \delta_{Th} \frac{w_x^2}{|\mathbf{w}|} + \delta_{Th} \frac{w_y^2}{|\mathbf{w}|}$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\delta_L - \delta_{Th}) \frac{|w_x w_y|}{|\mathbf{w}|}$$

$$D_{xz} = (\delta_L - \delta_{Tv}) \frac{|w_x w_z|}{|\mathbf{w}|} \qquad D_{zx} = (\delta_L - \delta_{Th}) \frac{|w_x w_z|}{|\mathbf{w}|}$$

$$D_{yz} = (\delta_L - \delta_{Tv}) \frac{|w_y w_z|}{|w|}$$

$$D_{zy} = (\delta_L - \delta_{Th}) \frac{|w_y w_z|}{|w|}$$

3 Numerische Lösung

Die numerische Lösung der Differenzialgleichungssysteme erfolgt nach der Bilanzmethode (finite Differenzenmethode). Sie weist gegenüber den üblichen Finite Elementverfahren den großen Vorteil der lokalen Massenbilanz- bzw. Wärmebilanztreue auf, da sie in jedem finiten Volumenelement die Erhaltungssätze erfüllt. Das Finite Elementverfahren tut dies in der üblichen Form nur im Sinne des minimalen Residuums, d.h. der bestmöglichen Erfüllung in der Gesamtheit aller Volumenelemente. Bei der Einbeziehung von chemischen Reaktionen erscheint dieser Vorteil als wesentlich.

Der gesamte numerische Algorithmus soll mit folgenden Aussagen skizziert werden.

Gesättigte **Wasser**- oder **Gas**-Strömung:

- Die Variable der Gleichung ist der absolute Flüssigkeits- bzw. Gasdruck,
- Die Strömungsgleichung wird in einem voll-impliziten Differenzengleichungssystem simultan gelöst. Die Druckabhängigkeit der Koeffizienten kann iteriert werden.

Grundwasserströmung mit freier Oberfläche:

- Die Variable der Gleichung ist der absolute Wasserdruck im Zellmittelpunkt. Bei Auftreten einer freien Oberfläche in der Zelle, d.h. wenn die wassergefüllte Mächtigkeit Δh

$$\Delta h = \frac{\Delta z}{2} + \frac{p-p_0}{\rho g} < \Delta z \text{ ist,}$$

dann berechnen sich die Querschnittsflächen der horizontalen Strömung aus

$$A_h = \Delta h \times \Delta x \text{ bzw. } A_h = \Delta h \times \Delta y.$$

Ist $\Delta h \leq 0$, dann ist die Zelle trockengefallen und $A_h = 0$. Da die Querschnittsflächen der vertikalen Strömung

$$A_v = \Delta x \times \Delta y$$

stets größer Null sind, bleibt die Zelle als Strömungselement aktiv, lässt also auch ein „Durchfallen“ von Wasser zu. Auf diese Weise ist keine besondere Behandlung von trockengefallenen Zellen, z.B. das temporäre Passivsetzen der Zelle, erforderlich.

- Der Speicherterm der Gleichung (zeitliche Änderung) wird linear interpoliert nach

$$S = n \times \delta(\Delta h) + S_0 \times \Delta z,$$

wobei die Funktion $\delta(\Delta h)$

$$\delta(\Delta h) = 1 \text{ für } \Delta h \leq 0.95 \times \Delta z$$

$$\delta(\Delta h) = 0 \text{ für } \Delta h > \Delta z$$

$$\delta(\Delta h) = \left(1 - \frac{\Delta h}{\Delta z}\right) \times \frac{1}{1-0.95}, \text{ sonst}$$

ist.

Zyklische Grundwasserneubildung

Die Grundwasserneubildung (recharge) kann halbjahresweise zyklisch berücksichtigt werden, indem im ersten Halbjahr stets das Doppelte des Eingabewertes, im zweiten Halbjahr der Wert Null berücksichtigt wird (gesteuert über INRECH=99 oder -99 in der **{projekt.rch}**).

3.1 Zweiphasenströmung Gas-Wasser

- Die Variablen der Strömungsgleichungen sind der Wasser- oder Gasdruck sowie die Wassersättigung.
- Das Differenzengleichungssystem wird voll-implizit simultan gelöst. Die Abhängigkeit der relativen Permeabilität von der Wassersättigung wird durch die **Flux-Limiter-Methode** realisiert. Falls **UPWIND**-Wichtung gewünscht ist, kann sie im Dialog vereinbart werden.
- Das Gleichungssystem wird entweder nach Picard oder nach Newton-Raphson iterativ gelöst.

Stoff-/Wärmetransportgleichungen für jede Komponente

- Die Konzentrationsgleichung bzw. -gleichungen (bei Dual Porosity) werden derzeit noch einzeln und unabhängig voneinander behandelt. Sie können implizit, explizit und nach dem Crank-Nicholson-Verfahren gelöst werden. Die Interpolation des advektiven Transportes geschieht nach der **Front-Limitationsmethode** und reduziert die numerische Dispersion erheblich, auch bei Gitter-Pecletzahlen weit größer als 20.
- Die Dispersionsmatrix wird voll berücksichtigt in der Art, dass die Hauptdiagonale im Gleichungssystem steht, die Nebendiagonalelemente jedoch auf der rechten Seite des Gleichungssystems iteriert werden.
- Die Temperatur wird vom Lösungsverfahren wie eine Stoffkomponente behandelt. Wenn Wärmetransport simuliert werden soll, muss der Stofftransport von mindestens einer Stoffkomponente auch simuliert werden.

Besonderheit des „Vertical Leakage“

In der Datei **{projekt.bcf}** werden die vertikalen Leakage-Faktoren VCONT vorgegeben. Falls im Dialog der Eingabe festgestellt wird, dass einige oder alle VCONT-Werte ≤ 0 sind, kann die Berechnung der Leakage-Faktoren aus den horizontalen Durchlässigkeiten gewählt werden. Ist VCONT=0, dann wird der Leakage-Faktor als harmonisches Mittel der Durchlässigkeiten in vertikaler Richtung berechnet. Ist VCONT<0, dann wird dieses Mittel noch mit dem Absolutwert von VCONT multipliziert (vertikale Anisotropie der Durchlässigkeit).

3.2 Zeitschrittsteuerung

Die Zeitachse ist, analog **MODFLOW**, in Stressperioden und diese wiederum in Zeitschritte unterteilt. Die Zeitschritte werden vom Programm intern in Teilzeitschritte unterteilt, wenn entweder :

- bei reiner Strömung (ohne Stofftransport) die Lösung nicht konvergiert oder
- beim Stofftransport die **Courantbedingung** dies erfordert.

Die Differenzengleichungssysteme von Strömung, Stoff und Wärme werden im Normalfall zu allen Teilzeitschritten gelöst. In den Inputdaten kann jedoch vereinbart werden, dass die Strömung

- stationär ist (einmalige Lösung der Strömung für sehr große („unendliche“) Zeit),

- nur zu den vorgegebenen Zeitschritten gelöst wird.

Bei der **Zweiphasenströmung Gas-Wasser** gilt:

- Wenn Picard-Iteration als Lösungsverfahren gewählt ist, wird für jede Phase die Courantbedingung eingehalten, d.h. es werden aus der vorgegebenen Courantzahl $Co < 1$ Teilzeitschritte berechnet. Dabei ist die Summe der Teilzeitschritte stets gleich der Zeitschrittlänge.
- Falls Newton-Raphson-Iteration gewählt wurde und die Iteration konvergiert, wird keine Zeitschrittunterteilung vorgenommen.
- Ist in einer Zelle die Gassättigung kleiner als $S_{g,irreduzibel}$, d.h. wenn die Gasphase nicht mehr beweglich ist, dann wird in dieser Zelle nur noch Einphasenströmung Wasser zugelassen (nur bei Picard-Iteration).

Wenn **Stofftransport** simuliert wird, muss die **Courantbedingung** für jede Komponente erfüllt sein, so dass in der Regel eine Zeitschrittunterteilung für Strömung und Transport realisiert wird. Die Größe des Teilzeitschrittes orientiert sich immer am Minimum der zulässigen Teilzeitschrittgröße für Phasen, Komponenten und Temperatur. Die Courantbedingung lautet für den 3D-Fall:

$$Co = \frac{Q \Delta t}{n R V} \leq 1 \quad \text{mit } Q = \max[Q_{in}, |Q_{out}|]$$

wobei Q_{in} die Summe aller in die Zelle eintretenden und Q_{out} die Summe aller austretenden Volumenströme, Δt der zulässige Teilzeitschritt, R der Retardationsfaktor und V das Zellvolumen sind.

3.3 Maßnahmen zur Rechenzeitbeschleunigung bei Stoff/Wärmetransport

Eines der Hauptprobleme der Simulation ist der enorm hohe Rechenzeitbedarf, insbesondere bei Gitternetzen mit mehr als 100 000 Zellen und vielen Stoffkomponenten. Das Programm enthält eine Vielzahl von Möglichkeiten, die entweder ein gröberes Gitternetz oder größere Zeitschritte ermöglichen. In jedem Fall sollte man aber bedenken, dass grundsätzlich die Genauigkeit der numerischen Lösung dabei geringer wird (oftmals ist dieser Genauigkeitsverlust ohne praktische Folgen zu tolerieren). Nachfolgend sollen diese Maßnahmen skizziert werden.

- **Front-Limitationsmethode:** Der Algorithmus vermindert die bei der **Upwind-Methode** stets auftretende Verschmierung von Konzentrations- (Temperatur) Fronten, indem die Konzentration in Strömungsrichtung extrapoliert (nicht interpoliert) wird. Sie entspricht vom mathematischen Inhalt der TVD-Methode.
- **Courant INPUT Suppression:** Hierbei werden Zellen durch Eingabe gekennzeichnet, in denen die Courant-Bedingung unterdrückt (vernachlässigt) wird. In diesen Zellen wird stets die **Upwind-Methode** benutzt.
- **Courant VELOCITY Suppression:** Hierbei werden Zellen bezeichnet, in denen die Courantbedingung dann unterdrückt wird, wenn die Courantzahl einen vorgegebenen Zahlenwert (x_{nkon}) überschreitet. Auch dann wird die Upwind-Methode in dieser Zelle genutzt.

Diese Vorgaben sind dann sinnvoll, wenn der Stofftransport in einem Teilgebiet ohne praktisches Interesse ist.

- **Aktive Gittergröße:** Die Stofftransportgleichungen werden nur in den Zellen gelöst, deren Konzentrationsänderungen im Teilzeitschritt größer werden können als eine Schranke (s. Abschnitt 3.4) .
- **Nur Wärmetransport:** Es können Zellen vorgegeben werden, in denen nur der Wärmetransport simuliert wird, Strömung und Stofftransport werden passiv gesetzt (z.B. bei geothermischen Problemen zur Erfassung des Deckgebirges/Liegenden),
- **Beschränkte Strömungsberechnung:** Im Standardfall werden sowohl Strömung als auch Transport zu allen Teilzeitschritten berechnet. Oftmals ist die Geschwindigkeit der Fluide jedoch wenig veränderlich, z.B. im stationären Zustand oder in seiner Nähe. Dann kann die Strömungsberechnung nur auf die Zeitschritte (nicht aber alle Teilzeitschritte) oder auch nur auf eine einzige Berechnung (stationär) beschränkt werden.

3.4 Aktive Gittergröße bei Stoff- und Wärmetransport

Das zu modellierende Gebiet wird durch die Geologie und die Randbedingungen der Strömung bestimmt. In der Regel ist dieses Gebiet größer als das eigentlich interessierende Modellgebiet, da die Strömungssimulation oftmals die hydraulisch bzw. gasdynamisch wirkenden Randbedingungen (Störungszonen, Auskeilen von Schichten, Vorfluter etc.) erfassen muss.

Der rechenzeitintensive Stofftransport hingegen ist meist nur in kleineren Teilgebieten interessant, z.B. infolge von Schadstoffquellen.

Der Algorithmus prüft in jedem Teilzeitschritt und jeder Zelle, ob die maximal mögliche Konzentrations- bzw. Temperaturänderung (auf die Maximaltemperatur bezogen) größer werden kann als ϵ (10^{-10}). Wenn dies nicht der Fall ist, wird die Zelle temporär passiv gesetzt, wodurch sich das Gleichungssystem entscheidend verkleinern kann.

4 Chemische Reaktionen/Gleichgewichtschemie, Thermodynamik

ModGeo3D kann sowohl chemische Gleichgewichtsreaktionen, Tensidreaktionen und Phasenwechselvorgänge in einer Stoffkomponente simulieren.

4.1 Chemische Reaktionen

Nach jedem vollständigen Zeitschritt kann das Programm **PhreeqC** des U.S.Geological Survey zur Berechnung von chemischen Gleichgewichtsreaktionen aufgerufen werden, das in frei wählbaren Zellen des Modellgebietes die Gleichgewichts-Konzentrationen der Komponenten unter Berücksichtigung von Druck und Temperatur sowohl in der Wasser- als auch in der Gasphase berechnet. Diese Konzentrationsfelder werden dann in den nächsten Transportschritt einbezogen, es erfolgt keine Iteration.

Sollte eine Dual Porosity vorliegen, werden die Reaktionen in allen Teilsystemen (mobiles Wasser, Gas und immobile Wasserphase) getrennt ermittelt.

Hierbei ist zu beachten, dass durch die chemischen Reaktionen die Massenanteile der Einzelkomponenten verändert werden, dadurch verlieren die Massenbilanzkontrollen der Strömungs- und Transportberechnungen ihre Bedeutung.

4.2 Tensideinfluß

Zur Simulation von Flüssigkeit (Wasser) mit einem Tensidgehalt (z.B. für die Sanierung ölkontaminierter Böden) kann als Komponente „Tensid“ gewählt werden (nur für Wasser-Öl-Strömung), wobei sich dann die RelPerm-Eigenschaften je nach Konzentration des Tensides ändern können (s. Kap.5.4).

4.3 Thermodynamik mit Phasenwechsel

In maximal einer Stoffart kann ein Phasenwechsel (Verdampfung oder Kondensation) auftreten. Dazu müssen in der Flüssigphase und in der Gasphase je eine Komponente mit gleichem Namen auftreten (derzeit möglich: CO₂, NH₃, C₂H₆, C₃H₈). Im überkritischen Zustand wird der Stoff als Gas betrachtet.

Falls die Temperatur in einer Zelle die Verdampfungs- / Kondensationstemperatur erreicht und in der Zelle eine verdampfungs- bzw. kondensationsfähige Komponente existiert, wird

- entweder die Temperatur in dieser Zelle solange auf dem Verdampfungs- / Kondensationsniveau durch eine temporäre Randbedingung 1. Art festgehalten, bis die Gesamtmenge an verdampfungsfähigem/kondensationsfähigem Fluid in der Zelle ausgeschöpft ist (wobei die Gesamtwärmeenergie, die zur Verdampfung/Kondensation erforderlich ist, auch vorhanden sein muss) oder
- die Verdampfungsenthalpie der vorhandenen Komponente = Wärmesenke / Kondensationseenthalpie der Komponente = Wärmequelle verarbeitet.

Dabei tritt ein Phasenwechsel mit Sättigungs- und Konzentrationsänderungen auf.

5 Organisation des Programmes

Im Arbeitsverzeichnis, in dem die mittels **VISUAL MODFLOW** oder **CADSHHELL** erzeugten Datenfiles unter dem Namen **{projekt}** und den entsprechenden Extensionen (je nach vorgegebenen Randbedingungen) gespeichert sind, müssen weiterhin vorhanden sein:

ModGeo3D.nam:

- Pfadangabe mit Steuerdatei = Arbeitsverzeichnis **\{projekt}.mcd** für **CADSHHELL** oder **\{modflow}.in** für **VISUAL MODFLOW**
- Pfadangabe für Speicherung Ergebnisfiles = Arbeitsverzeichnis 'Ausgabeverzeichnis'

Beispiel für Aufbau dieser Datei

```
D:\Modcalif\ModGeo3D\Manual\Testbeispiele\B_liquid\modflow.in    ! Pfad+Name der ersten Input-Datei (CADSHHELL: *.mcd,
! oder VISUAL MODFLOW: modflow.in)
D:\Modcalif\Geo3D\Manual\Testbeispiele\B_liquid\ausgabe\ ! Pfad für Surfer/Tecplot/MIN-Output-Files
```

Bemerkungen:

- ACHTUNG: letztes BACKSLASH muss immer vorhanden sein !

Steuerdateien **{projekt}.mcd** bzw. **{modflow}.in** und **{mt3d}.in**

- enthält einen Teil (über grafische Oberflächen angelegte) für die Berechnung erforderlichen Eingabedatenfiles mit entsprechenden Unitnummern (hier im Beispiel **projekt = BI**)

Datei BI.mcd

```
4 BI.LST
1 BI.BPI
11 BI.BCF
12 BI.WEL
28 BI.CH
23 BI.CLB
1001 BI.BTN
1002 BI.ADV
970 BI.RHO
1003 BI.DSP
1005 BI.SS3
1009 BI.RC3
```

Datei modflow.in

```
6 BI.LST
1 BI.BAS
11 BI.BCF
12 BI.WEL
22 BI.OC
-75 BI.FLO
28 BI.CH
23 BI.CLB
-30 BI.HDS
-31 BI.DDN
-50 BI.BGT
-32 BI.HVT
-33 BI.DVT
```

Datei mt3d.in

```
BI.ot
BI.BT3
BI.AD3
BI.DP3
BI.SS3
BI.RC3
BI.FLO
N
```

(die negativen Unitnummern dienen der Ausgabe von Binärfiles für MODFLOW/MT3D (können entfallen))

Dabei gilt:

- Die für die Strömungssimulation erforderlichen Datenfiles sind in der Datei **{projekt}.bas** (bpi) definiert (über die Unitnummern). Die Unitkennzeichnung „bpi“ gilt für **CADSHHELL**, die Kennzeichnung „bas“ für **VISUAL MODFLOW**. Diese Unitnummern (*optional*: + Pfad) + Dateiname müssen sich in der Steuerdatei wieder finden – ist das nicht der Fall, erfolgt am Bildschirm eine Warnung und die Programmabarbeitung wird abgebrochen.

In der Datei sind die zeitabhängigen Randspiegelhöhen von **Modflow** enthalten. Hier können zusätzlich noch Wassersättigungen und Gasdrücke zeitabhängig hinzugefügt werden.

k	i	j	h-anf.	h-ende	Sw-anf.	Sw-ende	Statusänderung in aktiver Zelle
1	2	1	0.	0.	1.	1.	aktiv

Wenn $k < 0$: Gasrand, Spiegelhöhe h == Gasdruck in bar abs.

Falls in einer Zeile das Wort „aktiv“ auftritt, bedeutet es, dass diese Zelle – wenn sie vorher eine Randzelle war, ab dieser Stressperiode eine aktive Zelle mit den angegebenen $h/p_{\text{gas}}/S_w$ – Werten wird.

Blockvorgabe in {projekt}.ch:

Wenn große Bereiche als Randzellen beschrieben werden müssen, ist die Blockvorgabe einfacher. Für jede Stressperiode wird die Anzahl der folgenden Blockzeilen (anstelle der Anzahl der aktuellen Randzellen) vorgegeben, dazu das Wort „**Block**“. Danach folgen die Blockzeilen.

ITMP	Blockvorgabe
2	Block

k1	k2	i1	i2	j1	j2	h-anf.	h-ende	Sw-anf.	Sw-ende	Statusänderung in aktiver Zelle
51	51	1	5	7	9	-3.	-2.5	1.	1.	
1	1	3	7	7	9	1.	0.5	1.	1	

Die Daten h und Sw sowie die Statusänderung gelten für alle Zellen im Bereich von Layer k_1 bis k_2 , Row i_1 bis i_2 und Column j_1 bis j_2 .

Die Gesamtanzahl der Randzellen ist:

$$NCHDS = (k_2 - k_1 + 1) * (i_2 - i_1 + 1) * (j_2 - j_1 + 1), \text{ im Beispiel also } 30.$$

{projekt}.rch

In der Datei steht jeweils vor den GWN-Tabellen in einer Zeile die Werte:

inrech	inirch
18	0

Wenn $\text{inrech}=99$: zyklische recharge (jeweils im 1.Halbjahr: $\text{recharge}=2 \cdot \text{Inputwert}$, im 2.Halbjahr: $\text{recharge}=0$.)

Wenn $\text{inrech}=-99$: Wiederholung mit alten Inputwerten.

5.1 Datei {projekt}.rho

Die Steuerung der Strömungs- und Transportsimulation erfolgt neben den Standarddateien von **VISUAL MODFLOW/CADSHHELL** mittels der Datei **{projekt}.rho**. Das Prinzip beruht auf der Vorgabe von **keywords**, denen thematisch zusammengefasst Steuer- oder zusätzliche **Eingabewerte** folgen.

Des Weiteren gilt:

- Je nach Problemstellung werden unterschiedliche Steuergrößen benötigt. Nicht erforderliche können gelöscht oder die gesamten Blöcke mit „c“ am Zeilenanfang auskommentiert werden.
- Werden Bereiche in Blockform eingegeben, geschieht dies in Form eines Quaders mit
n-lay1 bis n-lay2 (z-Richtung, Vorgabe der Gitterpunkt-Nummern k),
n-row1 bis n-row2 (x-Richtung, Vorgabe der Gitterpunkt-Nummern i),
n-column1 bis n-column2 (y-Richtung, Vorgabe der Gitterpunkt-Nummern j),

Syntax:

{...} : variabler Name = Bezeichnung aller zum Projekt gehörenden Dateien

[...] : optionale Eingabe

5.2 Keywords für Standardrechnungen

(eine Komponente, ohne: Temperatur, Dual porosity, Nachlieferung vom Feststoff, **PhreeqC**)

keyword	Inhalt Eingabeblock	Erforderlich	Beispiel BI
#nam	Namen der Komponenten und Phasenzugehörigkeit	Immer für Transportsimulation mit mehr als einer Komponente	X
#con	Steuergrößen	Immer	X
#ite	Iteration, Lösung GS, Courant-suppression	Immer	X
#eps	Genauigkeiten	Immer	X
#rho	Dichte und Viskosität	immer für Transportsimulation	X
#rhp	Bezugsdrücke	Transportsimulation, optional	
#rht	Bezugstemperaturen	Transportsimulation, Optional	
#pat	wegabhängige Dispersivität	Transportsimulation Optional	
#vel	Courant VELOCITY suppression'	Transportsimulation Optional	
#sup	Courant INPUT suppression	Transportsimulation Optional	
#tce	Zell-Index für « Nur Temperatur simulation/Strömung+Komponententransport =	Optional (zum Passivsetzen von Zel-	

	passiv »	len)	
--	----------	------	--

erforderlich/
darf nicht verändert werden

name (Block: Namen der Transportspecies)

1,	Ca,	l,	1,	0,	0	0.
2,	Fe(2),	l,	2,	0,	0	0.
3,	Fe(3),	l,	3,	0,	0	0.
4,	C,	l,	4,	0,	0	0.
5,	S,	l,	5,	0,	0	0.
NUMMER	NAME	PHASE	LIQUID	GAS	SOLID	DEFAULT-conc.

NUMMER—Laufende Nummer der Komponente (Spezies)

NAME—Chemischer Name der Komponente (wenn **NAME** = nocomp ist, wird diese Komponente nicht berechnet)

PHASE—Komponente in der Phase Liquid (l), Gas (g) oder Solid=Feststoff (s)

LIQUID—Laufende Nummer einer gleichen Komponente in Liquid-Phase

GAS—Laufende Nummer einer gleichen Komponente in Gas-Phase

SOLID—Laufende Nummer einer gleichen Komponente in Solid-Phase

DEFAULT- Default-Konzentration (ppm), z.B. für Simulation ohne Transport

Bemerkungen:

- Soll die Löslichkeit von CO₂ in der Lösung berücksichtigt werden, muss eine Liquid-Phase mit Namen „CO2(s)“, d.h. CO₂-soluted, berücksichtigt werden.
- Ist ein Name „Tensid“ vorgegeben, dann ändern sich die RelPerm-Eigenschaften mit der Konzentration.

control (Block: Control data)

1.Zeile

y,	t,	c,	y,	n
PHREEQ	ANTP	ANTU	TRANS	FLOW

PHREEQ—Rechnen mit Phreeqc (y/n) – bei y wird nach jedem (in der Datei {projekt}.bas (bpi) vorgegebenen Zeitschritt PhreeqC gerechnet

Beachte: Bei Vorgabe von y muss

- der Bereich vorgegeben werden (auch wenn die Berechnung für das gesamte Modellgebiet erfolgt), für den PhreeqC berechnet werden soll → **keyword #phreeq**,
- eine Datei **MUSTER.PHRQ** zur Steuerung der PhreeqC-Rechnung angelegt werden.

ANTP—Möglichkeit zur Steuerung der Strömungsberechnung

- **s**: stationär
- **g**: Druckberechnung für jeden vorgegebenen Zeitschritt
- **t**: Druckberechnung analog zur Konzentration in jedem Teilzeitschritt (festgelegt nach der Courant-Bedingung) – nicht iterativ

- **i**: Druck und Konzentrationsberechnung zu allen Teilzeitschritten, Iteration des gesamten Systems.

Beachte: Für die automatische Permeabilitätsänderung infolge Druck/Temperatur (Kältefrac) und Gefrieren von Wasser muss ANTP als Großbuchstabe geschrieben werden.

ANTU—gespannte / ungespannte Strömung

- **u**: ungespannt, wenn $dh \geq dz$ wird gespannt gerechnet
- **c**: immer gespannt ($dh = dz$) oder Zweiphasenströmung

TRANS—Steuerung, ob nur Strömung oder beides berechnet werden soll

- **y**: Berechnung Strömung **und** Transport
- **n**: Berechnung nur Strömung

FLOW – *nur für Flüssigkeitsströmung*: Im Wechsel zwischen gespannter/ungespannter Strömung und im Zusammenhang mit dem Trockenfallen von Zellen kann es zu Oszillationen kommen, die wie folgt abgefangen werden (Dämpfung):

- **n**: keine Dämpfung (default)
- **m**: 'mittlere' Dämpfung (bei einzelnen trockengefallenen Zellen)
- **s**: 'strenge' Dämpfung (trockengefallene Gebiete)

Dämpfung = Unterschiedliche Wichtung von altem und neuem Ergebnis bei der iterativen Lösung der Druckgleichung

2. Zeile

5,	n,	n,	l,	8,	0.,	0.	20.	30.	1.0
NCOMP	NTEMP	DOUBLE	PHASE	NCOPHREEQ	X0	Y0	TEMP0	TEMPP	Z0gas

NCOMP – Anzahl der Komponenten (≤ 1 : eine Komponente in Wasser)
= Summe aller Komponenten

Beachte: Die Vorgabe von mehr als einer Komponente erfordert die Eingabe weiterer Daten, die im Teil „**Eingaben für Mehrkomponentensimulation**“ ausführlich beschrieben werden.

NTEMP - Temperatur-Simulation

- n**: keine Berechnung der Temperatur in ModGeo3D
- y**: Berechnung Temperatur in ModGeo3D

Beachte: Die Berechnung der Temperatur (Wärmetransport) erfordert die Vorgabe weiterer Daten, die im Teil „**Eingaben für Temperatur**“ ausführlich beschrieben werden.

DOUBLE – Einbeziehung des Double porosity-Effektes

- n**: keine Berücksichtigung
- d**: Berücksichtigung des Double porosity-Effektes

Beachte: Die Einbeziehung des Double porosity-Effektes erfordert die Vorgabe weiterer Daten, die im Teil „**Double porosity**“ ausführlich beschrieben werden.

PHASE—Phasensystem

- l**: Liquid oder Grundwasserströmung
- g**: Gasströmung
- 2**: Zweiphasenströmung Gas-Flüssigkeit (Wasser)
- o**: Zweiphasenströmung Öl-Flüssigkeit (Wasser)

NCOPHREEQ—Anzahl der zusätzlichen Komponenten in PhreeqC

Beachte: Die Vorgabe > 0 erfordert die Eingabe weiterer Daten, die im Teil „Eingaben für Mehrkomponentensimulation“ ausführlich beschrieben werden.

X0 - x-Koordinate für das Modellgebiet (HW) – linke untere Ecke, in Meter

Y0 - y-Koordinate für das Modellgebiet (RW) – linke untere Ecke, in Meter

TEMPO – Default-Temperatur, °C, (wenn nicht vorgegeben: TEMPO=10.)

TEMPP – Basis -Temperatur für Produktion(Injektion von Wärme. °C; (wenn nicht vorgegeben: TEMPP=0.)

DELWP – Temperaturverlust in einem Wärmetauscher, K, (default = 0.)

ZOGAS - mittlerer Realgasfaktor für Gas (wird nur genutzt: ohne Transportsimulation oder Transportsimulation ohne Namen der Gaskomponenten, sonst=1.)

Die Angaben der Koordinaten X0, Y0 dienen ausschließlich zur grafischen Darstellung (Tecplot-files) und werden bei der Rechnung nicht berücksichtigt.

#iteration (Block: Iteration, implicit/explicit, Suppression)

10, 0.5, 0.5, -0.9 50.
ITER CNO CNOAD XNKON MAXNR

ITER- maximale Iterationsanzahl

CNO - Crank-Nicolson Wichtungsfaktor für Dispersion

(= 1-implizit, = 0-explizit, default = 0.5)

CNOAD - Crank Nicolson Wichtungsfaktor für Advection (Vorgaben analog Dispersion)

XNKON - Kontrolle der 'COURANT suppression', |xnkon| = maximale Courantzahl ohne 'velocity suppression'

= 0 - keine 'suppression'

= 0...1 - 'velocity suppression',

= -1....0 - 'velocity' und 'zero-suppression', default = -0.9

= -0.01 – nur 'zero-suppression' (ohne #vel-Vorgabe)

Beachte: velocity suppression benötigt die Vorgabe eines Bereiches unter dem **keyword #vel**

Es gilt:

- wenn |xnkon| <= Courantzahl, dann erfolgt in diesen Zellen UPWIND-Wichtung, aber keine Unterdrückung des Courant-Zeitschrittes (Teilzeitschritt)
- wenn |xnkon| > Courantzahl, dann UPWIND-Wichtung + Unterdrückung des Teilzeitschrittes

MAXNR – Maximale Anzahl von aufeinander folgenden Teilzeitschritten (default = 50.)

#epsilon (Block: Genauigkeit)

1.Zeile

0.5,, 0.05, 0, 0
EPS-P EPS-W WBAS-L WBAS-G

2.Zeile

n, 1.e-4,1.e-4,1.e-8,1.e-4,1.e-4, 0.01
LOGCROSS EPSC EPST

EPS-P - Genauigkeit für die Druck-Iteration (bar)

EPS-W - Genauigkeit für die Massenfluss (Geschwindigkeit)-Iteration (default: 0.05)

Es gilt: Wenn $\text{EPS-W} \leq 0$ oder $\text{EPS-W} > 10$, dann wird der Massenfluss nicht iteriert, bei $\text{EPS-W} = 1 \dots 10$. werden nicht nur der Druck, sondern auch alle örtlichen Druckdifferenzen auf die Genauigkeit EPS-P iteriert.

WBAS-L - Basisbezug für Massenfluss Liquid je Zellrandfläche, (kg/time unit)

WBAS-G - Basisbezug für Massenfluss Gas je Zellrandfläche, (kg/time unit)

Es gilt: Wenn $\text{WBAS-L} < 0$ oder $\text{WBAS-G} < 0$, dann wird als minimale Empfindlichkeitsschwelle der Fehlerberechnung „Massenfluss“ der Absolutbetrag genutzt. Für $\text{WBAS-L} \geq 0$ oder $\text{WBAS-G} \geq 0$ wird bei der ersten Anwendung dieser Wert genutzt, anschließend wird der maximale Massenfluss je Zellrandfläche ermittelt und 1/1000 dieses Wertes als Bezugswert gesetzt.

LOGCROSS - Iteration der 'nondiagonal dispersion'

i: Iteration

n: keine Iteration (default)

EPSC - Genauigkeit der Konzentrationsiteration, ppm=mg/kg (analog der Vorgabe der Startkonzentrationen), für jede Komponente (1...ncomp)

EPST - Genauigkeit der Temperaturiteration (K)

Es gilt: Wenn $\text{EPSC} > 0$, zusätzliche iterative (nonzero)- UPWIND-Wichtung in Zellen mit unzulässiger (z.B. negativer) Konzentration, für $\text{EPSC} < 0$ keine UPWIND Wichtung und Nutzung des Betrages von EPSC als Genauigkeit.

#rho (Block: Variable Dichte/Viskosität)

0., CS0-liquid	0., CS0-gas	100., 100., 100., 100., 100. CS
1000. RHOW	1., RHO-GAS	1000., 1000., 1000., 1000., 1000. RHOS
1.31e-3, ETAW	1.e-5, ETA-GAS	1.31e-3, 1.31e-3, 1.31e-3, 1.31e-3, 1.31e-3 ETAS

CS0-liquid — Minimalkonzentration in der Flüssigkeit, i.a. CS0-liquid =0.

CS0-gas — Minimalkonzentration im Gas, i.a. CS0-gas =0.

CS — Maximalkonzentration (Sättigungskonzentration), ppm, analog Startkonzentrationen, für alle Komponenten (1...ncomp)

RHOW — Dichte der Flüssigkeit (Wasser) bei C = CS0-liquid und TS0, PS0, (kg/m³)

RHO_gas — Dichte des Gases bei C = CS0-gas und TS0, PS0, (kg/m³)

RHOS — Dichte der Komponenten bei C = CS (kg/m³) und TS0, PS0

ETAW — Viskosität der Flüssigkeit (Wasser) bei C =CS0-liquid und TS0, PS0, (Pa s)
ETAW — Viskosität des Gases bei C =CS0-gas und TS0, PS0, (Pa s)
ETAS — Viskosität der Komponenten bei C = CS, TS0, PS0, (Pa s)

#rhp (Block: Druckeinfluss auf Flüssigkeits-Dichte und -Viskosität)

1.0	10.		
PS0	PSMAX		
1000.	1000.	0.	1000.
RHOP	RHOPMAX	RHOPO	RHOPOMAX
1.31e-3,	1.31e-3	0.	1.e-3
ETAP	ETAPMAX	ETAPO	ETAPOMAX

PS0 - minimaler Druck, bar absolut
PSMAX - maximaler Druck, bar absolut
RHOP - Dichte der Flüssigkeit (Wasser) bei PS0, TS0, (kg/m³)
RHOPMAX - Dichte der Flüssigkeit (Wasser) bei PSMAX und TS0, (kg/m³)
RHOPO - Dichte der Ölphase bei PS0, TS0, (kg/m³), nur für **PHASE='o'**
RHOPOMAX - Dichte der Ölphase bei PSMAX und TS0, (kg/m³) , nur für **PHASE='o'**
ETAP - Viskosität der Flüssigkeit (Wasser) bei PS0, TS0, (Pa s)
ETAPMAX - Viskosität der Flüssigkeit (Wasser) bei PSMAX, TS0, (Pa s)
ETAPO - Viskosität der Ölphase bei PS0, TS0, (Pa s), nur für **PHASE='o'**
ETAPOMAX - Viskosität der Ölphase bei PSMAX, TS0, (Pa s), nur für **PHASE='o'**

#rht (Block: Temperatureinfluss auf Flüssigkeits-Dichte und -Viskosität)

10.,	10.		
TS0	TSMAX		
1000.,	1000.	0.,	1000.
RHOT	RHOTMAX	RHOTO	RHOTOMAX
1.31e-3,	1.31e-3	0.,	1.31e-3
ETAT	ETATMAX	ETATO	ETATOMAX

TS0 - minimale Temperatur, °C
TSMAX - maximale Temperatur, °C
RHOT - Dichte der Flüssigkeit (Wasser) bei TS0, PS0, (kg/m³)
RHOTMAX - Dichte der Flüssigkeit (Wasser) bei TSMAX und PS0, (kg/m³)
RHOTO - Dichte der Ölphase bei TS0, PS0, (kg/m³), nur für **PHASE='o'**
RHOTOMAX - Dichte der Ölphase bei TSMAX und PS0, (kg/m³), nur für **PHASE='o'**
ETAT - Viskosität der Ölphase bei TS0, PS0, (Pa s)
ETATMAX - Viskosität der Flüssigkeit (Wasser) bei TSMAX, PS0, (Pa s)
ETATO - Viskosität der Ölphase bei TS0, PS0, (Pa s), nur für **PHASE='o'**
ETATOMAX - Viskosität der Ölphase bei TSMAX, PS0, (Pa s), nur für **PHASE='o'**

#path (Block: Wegabhängige Dispersivität)

1, 0., 0., 0., 0.
KPER xqu yqu zqu cor

KPER - Nummer der Stressperiode, von der an die Werte verändert werden sollen
xqu - x-Koordinate des Startpunktes, (m – Differenz zum Koordinaten-Ursprung)
yqu - y-Koordinate des Startpunktes, (m – Differenz zum Koordinaten-Ursprung)
zqu - z-Koordinate des Startpunktes, m
cor - max. Pfadlänge (m) (cor= 0: keine pfadabhängig Dispersivität)
(Es können mehrere Zeilen vorgegeben werden)

#velocity (Block: Courant VELOCITY suppression)

1, 1, 1, 3, 9
nrow1, nrow2, ncol1, ncol2, nlay1, nlay2

Angabe der Zellen, in denen die Courant-Unterdrückung bei Überschreitung des Stromkriteriums wirken soll. (Es können mehrere Zeilen vorgegeben werden), → wird nur wirksam bei $xnkon \neq 0$

Beachte: Alle Feldvorgaben erfolgen als Block, gekennzeichnet durch Gitternummern von k1 bis k2, von i1 bis i2, von j1 bis j2.

#suppression (Block: Courant INPUT suppression)

1, 2, 1, 1, 1, 1
nlay1 nlay2 nrow1, nrow2, ncol1, ncol2
k1 k2 i1 i2 j1 j2

Angabe der Zellen, in denen die Courant-Unterdrückung immer wirken soll. (Es können mehrere Zeilen vorgegeben werden), → wird nur wirksam bei $xnkon \neq 0$.

#tcell index (Block: Only Temperature simulation or flow mass transport = passive, and: No NEWTON-coefficients in this cell)

1, 3, 1, 1, 1, 1 1
nlay1, nlay2 nrow1, nrow2, ncol1, ncol2, cell status

Mit einem Änderungsstatus ($\neq 0$) werden Zellen markiert.

Cell status > 0

In den Zellen soll nur Wärmetransport simuliert werden. Im Fall, dass Wärmetransport nicht aktiv ist, werden Strömungs- und Massentransport-Zellen passiv gesetzt. (Es können mehrere Zeilen vorgegeben werden), Für diese Zellen wird die Strömungs- und die Stofftransportsimulation passiv gesetzt.

Cell status < 0 (nur für 2-Phasen-Strömung):

In den Zellen sollen die Koeffizienten der Jacobi-Matrix für die Newton-Iteration nicht berechnet werden (d.h konstante Koeffizienten).

Die Änderung des Zellstatus kann durch Eingabe eines Änderungsstatus = 0 zurückgenommen werden.

#budget index (Block: Budgets)

#bud,XX (#bud, XX= maximale Anzahl von Budgets, XX < 10)

1, 3, 1, 1, 1, 1 1
nlay1, nlay2 nrow1, nrow2, ncol1, ncol2, budget number

Man unterscheidet zwei Arten von Budgets:

- **Budget = volume budget.** Die Budget-Nummer muss positiv sein. Hier werden die Massen, die in den Budgetzellen gespeichert sind, addiert und in Ausgabefiles „budget_xxx.dat“ geschrieben, wobei Liquid und Gas und die Massen der einzelnen Komponenten/Wärme unterschieden werden.
- **Boundary Budget.** Die Budget-Nummer muss negativ sein. Hier werden die Massenflüsse über die Ränder $i+1/2$, $j+1/2$ und $k+1/2$ getrennt aufaddiert, die kumulativen Werte und die mittleren Konzentrationen/Temperatur an den Randflächen in Ausgabefiles „budget_xxx.dat“ ausgewiesen.

(xxx ist dabei die Budget-Nummer). Überlappungen der Budgets sind möglich.

5.3 Zusätzliche Eingabe und für die Zweiphasenströmung Gas-Wasser

Optional einzulesende **Keywords** für die Zweiphasenströmung:

Keyword	Inhalt Eingabeblock	erforderlich	Beispiel BI
#isw	Zell-Indikation für Gasphase	Zweiphasen	
#pgas	Initialer Gasdruck, bar absolute	Zweiphasen	
#sw	Initiale Wassersättigung	Zweiphasen	
#rp	RelPerm-, Kapillardruck-Tabellen	Zweiphasen	
#dom	Domain (Gebiet) für RelPerm	Zweiphasen	
#dx	Änderung der Zellweite dx	Optional	
#dy	Änderung der Zellweite dy	optional	

#isw (Block: Zell-Indikation für die Gasphase, default=0)

Die Angabe entspricht der Modflow-Denkweise (>0: aktive Zelle, <0: Randzelle, =0: passive Zelle). Jeder Blockteil beginnt mit **BEGINN** und endet mit **ENDE**.

```
beginn,      0,      b
              Nummer  Art
1,          59,      1,      1,      1,      1,      -1
1,          58,      1,      1,      1,      2,      1
NLAY1      NLAY2      NROW1      NROW2      NCOL1      NCOL2      WERT
ende
```

BEGINN -- Beginn eines Eingabeblockes

NUMMER -- Nummer der Komponente, falls nicht zutreffend, NUMMER = 0
ART -- Art der Eingabedaten
 b: Blockeingabe, wie hier gezeigt
 m: Matriceingabe, die Folgezeile muss den Namen der Datei mit der Datenmatrix enthalten.
 f: Formeleingabe, in Abhängigkeit vom Abstand zur Bezugstiefe z00
 Wert = Wert00 + A1*zz + A2*zz², zz=z00-z(j,i,k)
 (z00=Bezugstiefe der Formel
 A1 und A2 sind Koeffizienten, Gradient, [Wert/m] bzw. [Wert/m²]

Für **ART = b** gilt:

NLAY1 -- Gitterpunkt k des Blockbeginnes in z-Richtung,
NLAY2 -- Gitterpunkt k des Blockendes in z-Richtung,
NROW1 -- Gitterpunkt i des Blockbeginnes in x-Richtung,
NROW2 -- Gitterpunkt i des Blockendes in x-Richtung,
NCOL1 -- Gitterpunkt j des Blockbeginnes in y-Richtung,
NCOL2 -- Gitterpunkt j des Blockendes in y-Richtung,
WERT -- Wert der Eingabegröße (hier: Integergröße für Zell-Indikation)

Diese Zeile kann wiederholt werden, dabei wird überschrieben, letztgenannte Eingabewerte gelten.

Für **ART = f** gilt:

ART = f ist nur zulässig bei initialer Gasdruck, initiale Wassersättigung, Initialtemperatur, mobiler und immobil Initialkonzentration. Für alle Größen, ausser Temperatur, gilt:

Wert = Wert00 für zz ≤ 0

Für Wassersättigung und Konzentrationen gilt:

Wert = max (0., min(wert, 1.))

NLAY1 -- Gitterpunkt k des Blockbeginnes in z-Richtung,
NLAY2 -- Gitterpunkt k des Blockendes in z-Richtung,
NROW1 -- Gitterpunkt i des Blockbeginnes in x-Richtung,
NROW2 -- Gitterpunkt i des Blockendes in x-Richtung,
NCOL1 -- Gitterpunkt j des Blockbeginnes in y-Richtung,
NCOL2 -- Gitterpunkt j des Blockendes in y-Richtung,
Z00 -- Bezugstiefe der Formel, m
Wert00 -- Wert bei Bezugstiefe
A1 -- linearer Koeffizient
A2 -- quadratischer Koeffizient

Diese Zeile kann wiederholt werden, dabei wird überschrieben, letztgenannte Eingabewerte gelten.

#pgas (Block: Initialer Gasdruck, default=1, bar abs.), Eingabe wie **#isw**

#sw (Block: Initiale Wasser- (Flüssigkeits-) Sättigung default=0), Eingabe wie **#isw**

Wenn in der Folgezeile (beginn...) das Wort „evapo“ auftritt, wird die Verdunstung von Wasser erfasst. Wenn das Wort „vaporization“ auftritt, wird auch die Verdampfung von Wasser bei Unterdruck erfasst. Beide Varianten sind gleichzeitig möglich.

#rp (Block: Relative Permeabilität, Kapillardruck)

beginn, 0, m
 Nummer Art
 Relperm.inp
 Name der Datei
 ende

#domain (Block: Domain=Gebietszuordnung der RelPerm-Datasets, default=1),

Die Data-Sets der RelPerm-Kapillardruckkurven (s. auch nachfolgende Datei RelPerm) sind numeriert. Diese Nummern werden hier einem Gebiet (Domain) zugeordnet. Eingabe wie **#isw**

#dx (Block: Geänderte Zellabmessung dx)

beginn, 0, b
 Nummer Art
 1, 3, 4, 6, 2, 4, 0.23
 NLAY1 NLAY2 NROW1 NROW2 NCOL1 NCOL2 value dx
 ende

#dy (Block: Geänderte Zellabmessung dy)

beginn, 0, b
 Nummer Art
 2, 3, 3, 8, 1, 2, 0.18
 NLAY1 NLAY2 NROW1 NROW2 NCOL1 NCOL2 value dy
 ende

Erläuterungen zu Berücksichtigung von geänderten Zellabmessungen

Inputwerte nach Visual Modflow/Cadshell

Die vertical Leakage-Werte CV in z-Richtung (vertikal) werden in den Programmen **Visual Modflow** (Waterloo Hydrogeologic) bzw. **CadShell** (IHU Nordhausen) als harmonische Mittelwerte nach der Formel

$$CV_{k+1/2} = \frac{1}{\frac{dz_k}{2k_k} + \frac{dz_{k+1}}{2k_{k+1}}}$$

berechnet. Hier werden Änderungen von dx und dy in vertikaler Richtung nicht berücksichtigt. Als Durchlässigkeiten k nutzen diese Programme die Inputwerte vertical conductivity (Durchlässig-

sigkeit in z-Richtung), die jedoch nicht in den Modflow-Inputdateien gespeichert sind. Eine geänderte Zellabmessung in x,y-Richtung ist nicht vorgesehen.

Verarbeitung in ModGeo3D

Die Leitfähigkeit zwischen einer Zelle z.B. mit kleinen (geänderten) Werten dx und/oder dy (d.h. geänderter Fläche a_k und einem normalen Wert a_{k+1}) wird nach dem stationären Konzept der Addition von Fließwiderständen berechnet:

$$CV_{k+1/2} = \frac{1}{\frac{dz_k}{2 k_k a_k} + \frac{dz_{k+1}}{2 k_{k+1} a_{k+1}}}$$

mit k =Durchlässigkeit, a =zur z-Richtung senkrechte Querschnittsfläche ($dx \cdot dy$).

In x bzw. y-Richtung werden analoge Mittelungen vorgenommen.

ACHTUNG: Es ist zu beachten, dass in z-Richtung die Durchlässigkeit in horizontaler Richtung (conductivity) genutzt werden muss, da es eine gesonderte vertikale Durchlässigkeit nicht gibt.

Die Addition der Fließwiderstände unter Beachtung der Querschnittsänderungen infolge geänderter Zellabmessung dx/dy erfolgt innerhalb ModGeo3D.

Falls es eine *örtliche Trennung der beiden Schichten* gibt (d.h. „discontinuous layering“ $z_k - dz_k/2 > z_{k+1} + dz_{k+1}/2$) und die Schichten trotzdem hydraulisch verbunden sein sollen (vertical leakage >0), dann muss der Wert der vertical leakage je nach Situation per Hand in den Eingabedaten geändert werden, so dass der Fließwiderstand sich wie gewünscht ergibt.

Beispiel: In einer vertikalen Säule von Zellen sind $dx_{j,i,k}$ und $dy_{j,i,k}$ geändert, (z.B. sehr kleine Werte), $dx_{j,i,k+1}$ und $dy_{j,i,k+1}$ aber nicht. Zwischen den Schichten sei eine vertikale Differenz von Δz (wie ein senkrechte Verbindungsröhre mit der Durchlässigkeit $k_{j,i,k}$).

Dann ist der reale CV-Wert:

$$realer\ CV_{j,i,k+1/2} = \frac{1}{\frac{\frac{dz_{j,i,k}}{2} + \Delta z}{k_{j,i,k} a_{j,i,k}} + \frac{dz_{j,i,k+1}}{2 k_{j,i,k+1} a_{j,i,k+1}}}$$

(hier ist a =Querschnittsfläche $dx \cdot dy$).

Der CV-Wert nach Inputdatei enthält nicht die Wirkung von Δz , so dass der Inputwert des vertical leakage korrigiert werden muss

$$CV_{j,i,k+1/2, \text{ korrigiert}} = CV_{j,i,k+1/2, \text{ Input}} \times \text{Faktor};$$

$$\text{Faktor} = \frac{\frac{dz_{j,i,k}}{2} + \Delta z}{\frac{dz_{j,i,k}}{2} + \Delta z} \times \frac{\frac{dz_{j,i,k}}{2} + \Delta z}{\frac{dz_{j,i,k}}{2} + \Delta z} + \frac{dz_{j,i,k+1}}{2 k_{j,i,k+1} a_{j,i,k+1}}$$

Der vorgegebene Inputwert des vertical leakage ($CV_{j,i,k+1/2}$) in der Datei {projekt}.bcf muss mit dem Faktor multipliziert werden, wenn in der „Röhre“ die Durchlässigkeit $k_{j,i,k}$ gelten soll. Soll die

Durchlässigkeit $k_{j,i,k+1}$ gelten, dann sind in obiger Gleichung die Indizes k mit $k+1$ zu vertauschen.

5.4 Aufbau einer Datei für RelPerm-Datasets

c ModGeo3D: Relative Permeabilität Gas-Wasser, Kapillardruck

c **ACHTUNG:** "c" in erster Spalte bedeutet Kommentarzeile !, Maßeinheit Kapillardruck in bar

c

Vorgabe als Tabelle

c Sw	Krg	Krw	Pcap (bar)	max. Sw (anstatt 0.92)	max. Verringerung P_{cap}
dataset,1,8 ! (Datensatz 1 mit 8 aufeinanderfolgenden Eingabezeilen) nur für Tensid !					
1.71E-01,	1.00E+00,	0.00E+00,	5.00E-01		
2.10E-01,	8.30E-01,	4.32E-04,	3.50E-01		
2.92E-01,	6.63E-01,	3.32E-03,	2.50E-01		
5.47E-01,	2.63E-01,	6.14E-02,	1.00E-01		
6.64E-01,	8.98E-02,	1.31E-01,	7.00E-02		
7.65E-01,	3.02E-02,	3.71E-01,	5.00E-02		
9.10E-01,	7.26E-03,	6.58E-01,	2.50E-02		
9.20E-01,	0.00E+00,	9.59E-01,	1.00E-02,	9.80E-01,	0.3

c

dataset,2,2 ! (Datensatz 2 mit 2 aufeinanderfolgenden Eingabezeilen)

0.2,	1.,	0.,	2.e-10
0.97,	0.,	1.,	1.e-10

Bemerkungen:

- Die minimale Wassersättigung sollte $Sw > 0.$, die maximale Wassersättigung $Sw < 1.$ sein.
- Für die minimale Wassersättigung muss der Wert $krw=0.$, für die maximale Wassersättigung $krg=0.$ sein.

c-----

c ODER: Vorgabe als Korrelation nach Brooks/Corey

dataset,3,Brooks-Corey (Datensatz 3 mit 1 nachfolgenden Zeile)

0.171,	0.05	3.0,	0.01
--------	------	------	------

c Restsättigung Wasser Swr, kritische Gassättigung Sgc Lambda-Exponent, kapillarer Eindringdruck für Gas (bar)

c-----

c ODER: Vorgabe als Korrelation nach van Genuchten/Mualem

dataset,4,Genuchten-Mualem (Datensatz 4 mit 1 nachfolgenden Zeile) Exponent

0.171,	0.05	4.0,	7.	0.6
--------	------	------	----	-----

c Restsättigung Wasser Swr, kritische Gassättigung Sgc n - Exponent, Alpha-Koeffizient=Bezugsgröße des Kapillardruckes (1/bar), Exponent x nach Bodenphysik.Tabelle (optional)

c

c weitere Datensätze möglich !

c-----

5.5 Zusätzliche Eingaben bei Nutzung der erweiterten Optionen in ModGeo3D

Prinzipiell ist die Eingabe dieser Daten nur für die Komponenten (2...ncomp) erforderlich, da die Komponente 1 bereits durch CADSHELL oder VISUAL MODFLOW erfasst wurde. Wenn die

Komponente 1 vorgegeben wird, überspeichert es die entsprechenden, mit CADSHELL bzw. VISUAL MODFLOW eingegebenen Daten.

Optional einzulesende **Keywords** für Mehrkomponententransport

keyword	Inhalt Eingabeblock	Erforderlich	Beispiel BI
#ccw	Initiale Konzentration der einzelnen Komponenten, ppm = mg/kg Komponente (2... ncomp)	Immer	x
#cic	Initiale Konzentration der immobilten Flüssig-Komponenten, ppm Komponenten (1...ncomp), nur liquid	Nur für immobile Porosität und liquide Komponenten	
#cmd	Molekularer Diffusionskoeffizient (m ² /s) für . Komponenten (2...ncomp)	Immer	x
#sp1	Sorptionsparameter 1.Ordnung (Kd)	nur bei Berechnung der entsprechenden Szenarien	
#sp2	Sorptionsparameter 2.Ordnung,		
#rc1	Reaktionsrate 1.Ordnung, kg/m ³ /s		
#rc2	Reaktionsrate 2.Ordnung		

Zusätzliche Berechnung Dual porosity (x)

#pim	Immobilte Porosität	Immer	
#dim	Übergangskoeffizient für Dual porosity-System (1/s)	Immer	

Zusätzlich Temperatursimulation (x):

#tem	Initiale Temperatur (°C)	Immer	
#shw	Spez. Wärmekapazität, Flüssigkeit, J/(kgK)	Immer	
#shm	Spez. Wärmekapazität, Solid, J/(kgK)	Immer	
#hco	Wärmeleitfähigkeit des Porenraumes W/(mK)	Immer	
#fro	Frosttemperatur (°C)	optional	nur bei Permeabilitäts-änderung beim Gefrieren
#bul	Sedimentdichte (bulk density), kg/m ³	Immer	

erforderlich/

darf nicht verändert werden

#ccw- Initiale Konzentrationen der Komponenten 2 ...ncomp, ppm = mg/kg, (Konzentration der Komponente 1 in der Datei **{projekt}.bt3** (btn) erfasst)

```
beginn,      2,      m
             Nummer  ART
cl_start.dat
ende
.
.
beginn,4,b
1,59,1,1,1,1,414.53
ende
```

NR – Nummer der jeweiligen Komponente entsprechend der unter #nam vorgegebenen Nummerierung

ART – Steuerung des Eingabeformates

m: Einlesen der Daten aus einem gesonderten Eingabefile, dessen Namen zwischen *beginn ... ende* vorgegebenen wird. Datenaufbereitung innerhalb dieser Datei in Matrixform entsprechend der in MODFLOW üblichen Eingabeform (Vorgabe der Werte für jedes Element - zeilenweise); für örtlich differenzierte Konzentrationen

```
standardwert nh4_1
0.
standardwert nh4_2
0.
standardwert nh4_3
0.
standardwert nh4_4
0.
standardwert nh4_5
0.
standardwert nh4_6
0.
variabel nh4_7
325.9963      320.2853      314.7653      307.9310      297.5184
285.4109      291.7898      303.4850      312.4344      320.6182
328.2220      333.9817      338.1461      341.8979
351.9198      347.0570      343.9250      343.9114      352.7709
358.7856      351.4179      343.4358      342.3456      345.5504
350.1423      353.9143      356.6256      359.0002
422.0097      415.8948      408.1840      357.4048      356.0594
354.9552      359.2654      361.6028      365.1229      368.6884
371.5208      373.2015      374.1570      374.8350
432.5221      428.1363      422.4079      413.8957      403.6574
408.4015      412.2689      419.4847      384.0361      386.0786
386.5642      386.2248      385.6845      385.0208
442.0847      439.1115      435.1623      429.4417      431.3171
432.1093      435.6346      440.0025      443.0137      444.3015
444.4810      444.2140      443.8815      414.6249
449.6646      447.3041      444.2567      460.3363      463.6159
450.1417      455.4948      458.8036      458.6244      456.4154
453.7072      451.5983      420.9821      416.8916
458.6982      458.4931      457.8828      457.4379      460.9069
470.8469      471.2411      474.6981      471.8924      466.7639
461.6890      447.8823      422.8387      417.6373
458.5020      458.0551      456.1124      453.3943      456.6942
472.6317      488.1393      487.3844      479.0546      466.8736
454.1445      444.7700      438.4988      433.3613
458.4803      457.7548      455.0036      450.9677      454.1568
476.0867      495.3282      494.2402      482.1434      465.6204
449.7071      438.9284      432.2317      427.1004
458.6089      457.8677      456.0688      453.8039      458.1899
478.7740      496.0701      494.3370      479.2998      458.8648
```

Beispiel für eine mit der Option ,m' einzulesende Datei

standardwert: für den layer gilt für alle Zellen ein einheitlicher Wert (im Beispiel =0 für die layer 1 – 6))

variabel: unterschiedliche Werte für die Zellen in diesem layer (im Beispiel layer 7) – zeilenweise Vorgabe, beginnend mit der linken oberen Ecke des Modellgebietes; wird ein layer als ,variabel' gekennzeichnet, muss für jedes Element ein Wert vorgegeben werden.

Beachte: Schreibweise der Worte standardwert und variable wie im Beispiel angegeben

- b:** blockweise Vorgabe der Elemente in der oben beschriebenen Form und Zuordnung einer Konzentration zu den Bereichen. Dabei können mehrere Blöcke innerhalb von *beginn...ende* geschrieben werden; für weitgehend einheitliche Anfangsbelegung der jeweiligen Konzentration

#cic - Initiale Konzentrationen der immobilien Liquidkomponenten (1 ...ncomp), ppm = mg/kg, Eingabe wie **#ccw**

#cmd - Molekularer Diffusionskoeffizient der Komponenten 2 ...ncomp (m²/s), Eingabe wie **#ccw**
Eingabe wie **#ccw**

#sp1 - Sorption1

Eingabe wie **#ccw**

Für liquide Komponenten ist SP1 der Kd-Wert der Henry-Isotherme.

Dabei gilt folgende Beziehung:

$$C_{\text{solid}} = SP1 * C_{\text{fluid}} * RHO_{\text{fluid}}$$

(kg/kg) m³/kg (kg/kg) (kg/m³)

Für Gaskomponenten ist SP1 die Gaslöslichkeit in Flüssigkeit nach folgender Formel:

$$C_{\text{gas}} * RHO_{\text{gas}} = SP1 * C_{\text{liquid}} * RHO_{\text{liquid}}$$

(kg/kg) m³/kg (-) (kg/kg) (kg/m³)

SP1 = 0, wenn $C \leq CS0$ oder $C \geq CS$ der entsprechenden Komponente.

#sp2 - Sorption2, dimensionslos (nur für liquide Komponenten)

Eingabe wie **#ccw**

#rc1 - Reaktionsrate 1.Ordnung, kg/(m³ s)

Eingabe wie **#ccw**

#rc2 - Reaktionsrate 2.Ordnung

Eingabe wie **#ccw**

#pim - immobile Porosität, nur liquid-Sättigung in diesem Porenraum

Eingabe wie **#isw** oder **#ccw**.

#dim - Übergangskoeffizient für Double porosity-System, (1/s).

Eingabe wie **#ccw**

Der komponentenabhängige Stoffübergang zwischen mobiler und immobilierter Flüssigkeit geschieht nur in liquiden Komponenten.

Der Übergangsmassenstrom je Flüssigkeitsmasse berechnet sich aus:

$$\text{Massenstrom} = DIM * (C_{\text{immobil}} - C_{\text{mobil}})$$

(kg/(kg s)) (1/s) (kg/kg) (kg/kg)

Temperaturvorgaben

#tem- Initiale Temperatur, °C. Die Vorgabe kann als Block (b), Matrix (m) oder Formel (f) erfolgen. Bei Vorgabe als Formel werden die Gitterpunkte, für die die Formel gilt, erfasst.

NR – =0

ART – Steuerung des Eingabeformates, **m** und **b** wie oben

f: Formel

$$T(z) = T_{\text{Bezug}} + \text{lin. Koeff.} \times (z - z_{\text{Bezug}}) + \text{quadr. Koeff.} \times \{z - z_{\text{Bezug}}\}^2$$

```

beginn,      0,      f
              Nummer  ART
k1 k2 i1 i2 j1 j2 Bezugstiefe Temperatur bei Bezug, linearer.Koeff (K/m). quadratischer Koeff. (K/m²).
1, 59, 1, 1, 1, 1, -200., 16., 0.03, 0.
ende
  
```

#shw- Spezifische Wärmekapazität des Fluids, J/(kg K).

#shm- Spezifische Wärmekapazität der Gesteinsmatrix, J/(kg K)

#hco- Wärmeleitfähigkeit des Gesteinsgerüsts, W/(m K).

#fro - Gefriertemperatur des Porenfluides, °C.

#bul- Dichte des Gesteinsgerüsts, kg/m³ (nur für jedes Layer vorzugeben).

Zusätzliche Berechnung chemischer Reaktionen (PHREEQC)

Keyword	Inhalt Eingabeblock	Erforderlich	Beispiel Bl
#phr	Angaben zu PhreeqC	Immer	x

Unter diesem Keyword werden alle Daten eingegeben, die für den Aufruf von **PhreeqC** erforderlich sind.

#phreeqc-Aufruf

Als erster Block können (optional) die Namen von **PhreeqC**- Mineralphasen, pH- und pe-Werte eingegeben werden.

Als zweiter Block müssen die Zellen, in denen chemische Gleichgewichtsreaktionen berechnet werden sollen, angegeben werden. Anschließend können (optional) zu den oben aufgeführten Mineralphasen Initialkonzentrationen vorgegeben werden. Die Konzentrationswerte sind in den Maßeinheiten vorzugeben, die **PhreeqC** verlangt (und in der Datei {projekt}.phr gewählt wurden). Defaultwert ist Null.

Erster Block – Namen von Mineralphasen/Eigenschaften

```

beginn,      names
Beginn      Namen der Mineralphasen/Eigenschaft
1,          pH
Nr.         Mineralphase/Eigenschaft
2,pe
3,Calciumsiderite
4,Gypsum
5,Fe(OH)3(a)
6,Calcite
  
```

```

7,CaX2
8,FeX2
.
ende

```

Zweiter Block – Zellen, in denen *PhreeqC* gerechnet wird

Der Eingabe-Wert ist 1, wenn in der Zelle *PhreeqC* gerechnet wird, sonst 0 (default=0).

```

beginn, 0, b
Beginn, ohne Bedeutung Vorgabeart
1, 59, 1, 1, 1, 0
nlay1 nlay2 nrow1 nrow2 ncol1 ncol2 value
1, 59, 1, 1, 1, 2, 1
.
ende

```

Dritter und Folgeblöcke - Initialwerte

```

beginn, 1, b
Beginn Nummer Vorgabeart
1, 59, 1, 1, 2, 2, 6.
nlay1 nlay2 nrow1 nrow2 ncol1 ncol2 value
.
ende

```

5.6 Vorgabe zusätzlicher Randbedingungen

Liegen zeitlich veränderliche Randkonzentrationen vor, werden die Daten der Komponenten (2...ncomp) und optional Temperatur wie folgt vorgegeben (die Komponente 1 wird durch *Visual Modflow* bzw. *CADSHELL* eingelesen):

#crc	Konzentration der Grundwasserneubildung, ppm=mg/kg	optional	
#cev	Konzentration der Evapotranspiration, ppm=mg/kg	optional	
#wel	Konzentration von Quellen/Senken, ppm=mg/kg	optional	
#riv	Konzentration von Vorflutern (River), ppm=mg/kg	optional	
#bnd	Konzentration von Randbedingungen 3.Art (general head boundary)	optional	
#fra	Index für Permeabilitätsänderung infolge Frac oder Gefrieren	optional	

Falls die Eingabe von **#crc** und **#cev** fehlen, gilt der default-Wert. Für **#wel**, **#riv** und **#bnd** müssen die Vorgaben für die erste Stressperiode unbedingt vorliegen, sonst gibt es eine Fehlermeldung. Für alle weiteren Stressperioden kann die Eingabe entfallen, dann bleiben die Werte der ersten Periode erhalten.

##stress,1,permc (Nachfolgende Daten gelten ab Stressperiode 1, Permeabilitätsänderung, wenn **permc** nicht leer ist)

Das Wort **permc** steuert eine durch Input, Temperatur- und Druckänderung hervorgerufene Permeabilitäts-/Durchlässigkeits- bzw. Strömungsporositätsänderung. Es besteht aus maximal 5 Buchstaben:

1. **Buchstabe: p** – bedeutet Änderung der Permeabilität mit dem Porendruck (Kompaktion),
2. **Buchstabe: t** – bedeutet Änderung der Permeabilität mit der Temperatur (Kältefrac),
3. **Buchstabe: f** – bedeutet Gefrieren/Auftauen des Porenwassers (Frosttemperatur = tfrost(für jede Zelle), default = -1.e20 °C == kein Gefrieren möglich)
4. **Buchstabe: k** – bedeutet Änderung der Permeabilität durch Faktor,
5. **Buchstabe: n** – bedeutet Änderung der Porosität (Strömung=SC2, nicht aber für Transport =PR) durch Faktor. Dabei wird die Bilanz beachtet, d.h. die Drücke und Sättigungen (bei Zweiphasenströmung) ändern sich schlagartig.

Die ersten vier Prozesse können gleichzeitig auftreten.

Beim **Gefrieren des Porenwassers** wird die Strömungszelle temporär passiv gesetzt, so dass keine Fluidbewegung möglich ist, Stoff- und Wärmetransport wird jedoch berücksichtigt. Für das Gefrieren und Auftauen des Porenwassers wird eine Bilanz aller zu- und abfließenden Wärmemengen mitgeführt, die nach jedem Zeitschritt mit der Kristallisationsenthalpie des Porenwassers verglichen wird. Solange die Kristallisationsenthalpie des Porenwassers noch nicht aufgebraucht ist, wird die Zelle hinsichtlich der Temperatur als Randbedingung 1.Art mit der Frosttemperatur als Wert berücksichtigt.

Für Temperaturen unterhalb der Frosttemperatur steigt die **Wärmeleitfähigkeit** an nach

$$\lambda_{gefroren} = \lambda_{Input} \times \max(1.0, \min(\exp(poro), 1.4))$$

wobei bedeuten: λ – Wärmeleitfähigkeit, poro – Porosität (Teile von 1).

Diese Mechanismen werden nur wirksam, wenn unter **#fra** die Zellen eingegeben werden, in denen sie wirken sollen und unter **#ptf** die Daten dazu vorgegeben werden. Falls jedoch in einer früheren Stressperiode Zellen benannt wurden, bleibt diese Information erhalten bis zu einer Änderung.

Zur Sicherheit gegen unbeabsichtigte PORO-Perm-Änderung muss **ANTP unter **#con** als Großbuchstabe eingegeben sein.**

#fra – Index zur Berücksichtigung von Permeabilitätsänderungen (Frac) in den Zellen (Vorgabe wie **#isw**. Für jede Zelle gilt:

Index =1: Änderung der Poro-Perm nach den Vorgaben von permc.

Index =0: keine Änderung

Index=-1: die Poro-Perm der vorhergehenden Stressperiode bleibt erhalten.

#ptf – Daten für die Permeabilitätsänderung. Die Daten gelten für folgende Formeln.

Permeabilitätsänderung mit dem Druck

$$k = k_{initial} \times \exp\{c \times (p - p_{initial})\} \text{ für } p < p_{Frac}.$$

c – empirischer Koeffizient (1/bar), p – Druck, bar.

Permeabilitätserhöhung infolge hydraulischem Druck (Frac)

$$k = k_{Fracbeginn} \times \max\left\{1, \left(\frac{p - p_{Frac}}{d\sigma}\right)^2\right\} \text{ für } p > p_{Frac}.$$

$k_{Fracbeginn}$ – Permeabilität bei Fracbeginn, m^2 , p_{Frac} – Fracdruck, bar, $d\sigma$ – Bezugsdifferenz der Drücke, bar.

Die Reichweite des Fracs kann durch die Vorgabe einer Frachalblänge (zusätzlich zur Wirkung des Druckes nach obigen Formeln) beeinflusst werden. Vorzugene ist dann die Klufterstreckung (Frachalblänge). Alle Zellen innerhalb der Frachalblänge erhalten eine abstandsgewichtete Permeabilität, die das Maximum der Permeabilität nach den obigen Formeln und des abstandsgewichteten Wertes darstellt.

Permeabilitätserhöhung infolge Temperaturverringierung bei Überschreitung der Gesteinsfestigkeit (Zugfestigkeit)

$$k = a_M \times \frac{(\beta_T \times \Delta T \times L_B)^3}{12 \times L_B} \text{ für } \Delta T > \text{Schwellwert (Eingabegröße)}$$

β_T – linearer Temperatúrausdehnungskoeffizient, 1/K, ΔT – Temperaturabsenkung, K, L_B – Bezugslänge (Länge mit je einer Kluft), m, a_M – Maßstabsfaktor (beide Werte entstammen Laboruntersuchungen am Gestein).

Die Daten sind in einer Zeile je für **p** (pressure) , **T** (temperature) und **k** (Poro-Perm) anzugeben.

Bezugstiefe m, Fracdruck bei Bezug bar, linearer Koeff. bar/m, $k_{fracbeginn}$, m^2

P: -1000., 210., 0.19, 1e-15,

Fortsetzung Bezugsdifferenz bar, Koeff. c, vertikale Klufterstreckung m (nur bei Hori-Bohrungen)

12., 0.008 30.

Linearer Temperatúrausdehnungskoeff 1/K, Bezugslänge m, Schwellwert ΔT_s K, Maßstabsfaktor a_M .

T: 1.5e-5, 1., 35., 0.9

Faktor für Permeabilitätsänderung Faktor für Porositätsänderung

K: 10., 0.99

#crc (Block: Konzentration der Grundwasserneubildung, default = 0.)

Eingabe wie **#ccw** .

Dabei ist die Vorgabe der Layer-Nummer unwichtig (es sollte stets für Layer 1 gelten), da die Grundwasserneubildung in vertikaler Richtung nur für eine Zelle eingelesen werden kann. Wenn die Eingabe **#crc** fehlt, gilt der default-Wert.

#cev (Block: Konzentration der Evapotranspiration, default = 0.)

Eingabe wie **#ccw**.

Dabei ist die Vorgabe der Layer-Nummer unwichtig (es sollte stets für Layer 1 gelten), da die Evapotranspiration in vertikaler Richtung nur für eine Zelle eingelesen werden kann. Wenn die Eingabe fehlt, gilt der default-Wert.

Bemerkung: Die Evapotranspiration wirkt i.d.R. nur als Entnahme aus der Zelle, so dass die Vorgabe einer Konzentration hinfällig ist. Die Eingabe ist nur erforderlich, wenn mit Hilfe des Prozesses der Evapotranspiration auch ein Zufluss simuliert werden soll.

#well (Block: Well - Brunnen)

beginn

59, 1, 1, 1992.12, 1.84e-4, 1716.35, 4240.36, 10, 100, 0, 0.1
K i j C2 C3 C4 C5 T HB Skin rB
ende

K	– Nummer des Modelllayers
I	– Nummer der Zelle in x-Richtung (Hochwert)
J	– Nummer der Zelle in y-Richtung (Rechtswert)
C	– Konzentrationen der jeweiligen Komponenten (ppm=mg/kg), Reihenfolge entsprechend der unter #nam angegebenen Nummerierung
T	-- Temperatur (°C)
HB	-- Spiegelhöhe auf Bohrlochsohle, m
Skin	-- Skinfaktor (Skin > 0 ==Schädigung, Skin < 0 == Verbesserung)
rB	-- Bohrlochradius, m

Die Eingabezeile mit den Zahlenwerten kann beliebig oft wiederholt werden (für alle Brunnen-Zellen).

Liquid-Well: Falls das Well nur Flüssigkeit produziert/injiziert, gilt in der Datei **{projekt}.wel** die Standardwahl (liquid), die Raten gelten für Referenzbedingungen (i.d.R. Standardbedingungen, m³_{st}/Zeiteinheit). **HB** ist dann die Spiegelhöhe in Meter.

(Ein Liquid-Well darf **nicht** enthalten: **gas, heat, ews**)

Gas-Well: Falls das Well nur Gas produziert/injiziert, muss in der Datei **{projekt}.wel** nach der Rate das Kennwort **gas** stehen, die Raten gelten für Referenzbedingungen (i.d.R. Standardbedingungen, m³_{st}/Zeiteinheit). Bei Gassonden ist **HB** der Bohrlochsohlendruck in bar absolut.

Heat-Well: Falls das Well nur Wärme produziert/injiziert, muss in der Datei **{projekt}.wel** nach der Rate das Kennwort **heat** stehen, die Raten gelten (Joule/Zeiteinheit). Dann ist **HB** die Bohrlochsohlentemperatur in °C.

Total Wells

Es können eine beliebige Anzahl von Wells zu einem **Totalen Well** zusammengefasst werden. Dazu muss in der Datei {projekt}.wel hinter jeder Zelle die Nummer des Totalen Wells stehen:

totno=xx

Dabei ist **totno=** das Erkennungsmerkmal für die nachfolgende Nummer, xx ist dabei die Nummer des Totalen Wells. In diesem Bohrloch wird näherungsweise der Druck/Temperatur bei Förderung in allen Zellen gleich berücksichtigt. Die Rate des Totalen Wells ergibt sich aus der Summe der Einzel-Wells, die Aufteilung auf die Einzel-Wells geschieht nicht mehr nach Vorgabe in {projekt}.wel, sondern erfolgt programmintern nach der Leistungsmöglichkeit jedes Einzel-Wells und so, dass der Druck (oder Temperatur) in allen Einzel-Wells nahezu gleich ist.

Zeile aus {projekt}.wel als Beispiel:

<i>k</i>	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>q</i>	<i>heat-well</i>	<i>Total well number</i>
7	32	16	-7.70e10	h	totno=1

Die Reihenfolge der Nummerierung nach Totalem Well spielt keine Rolle.

Falls die **Nummer des Totalen Well negativ** ist, bedeutet es, dass das Totale Well nur die Summation der Raten aller zugehörigen Einzel-Wells berechnet.

Horizontal Wells

Jedes Well kann als Horizontalbohrung in der Zelle bezeichnet werden.

Dazu muss in der Datei {projekt}.wel hinter jeder Zelle die Nummer des Totalen Wells stehen:

hori=xx

Dabei ist **hori=** das Erkennungsmerkmal für die nachfolgende Nummer, xx ist dabei die Nummer der horizontalen Bohrung (die ein Totales Well sein kann). In diesem Bohrloch wird die Zuströmung nach der stationären Formel für Horizontalbohrungen berechnet.

Zeile aus {projekt}.wel als Beispiel:

<i>k</i>	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>q</i>	<i>Horizontal well</i>
7	32	16	-7.70e10	hori=1

Erdwärmefelder: Kopplung mit ModGeoTherm

ModGeo3D erlaubt in der Datei {projekt}.wel die Vorgabe von numerierten Erdwärmesonde mit dem Kennwort **ews.nummer**, die die Daten und Ergebnisse einer EWS-Simulation mit **ModGeoTherm** enthält. Als Beispielzeile:

<i>k</i>	<i>i</i>	<i>j</i>	<i>Qmax</i>	<i>name.Nummer</i>
1	5	4	1.e10	ews.1

Die Layer-Nummer *k* muss immer 1 sein, die Datei **ews.xx** enthält alle Daten zu allen aktiven Layern. Der Wärmestrom Q_{\max} ist die obere zulässige Grenze (Wärme: >0, Kälte: < 0), sie kann z.B. auch Null sein. Es ist darauf zu achten, dass die Stressperioden in beiden Programmen die gleiche Reihenfolge und Länge haben.

ModGeoTherm liefert in dieser Datei die Wärme-/Kältemengen, die in einer Stressperiode gewonnen werden, die dabei wirkende treibende Temperaturdifferenz und die unteren und oberen Grenzwerte für die Temperatur. Die Wärme-/Kälteströme werden auf die im 3D-Feld (in **ModGeo3D**) wirkenden treibenden Temperaturdifferenzen umgerechnet, so dass die gegenseitige Beeinflussung der EWS berücksichtigt wird:

$$Q_{ModGeo3D} = Q_{EWS} \times \frac{T_{finite\ Zelle} - T_{EWS}}{T_{EWS,geothermisch} - T_{EWS}}$$

Die Layer-Nummer k muss immer 1 sein, die Datei **ews.xx** enthält alle Daten zu allen aktiven Layern. Der Wärmestrom Q_{max} ist die obere zulässige Grenze (Wärme: >0 , Kälte: <0), sie kann z.B. auch Null sein. Es ist darauf zu achten, dass die Stressperioden in beiden Programmen die gleiche Reihenfolge und Länge haben.

ModGeoTherm liefert in dieser Datei die Wärme-/Kältemengen, die in einer Stressperiode gewonnen werden, die dabei wirkende treibende Temperaturdifferenz und die unteren und oberen Grenzwerte für die Temperatur. Die Wärme-/Kälteströme werden auf die im 3D-Feld (in **ModGeo3D**) wirkenden treibenden Temperaturdifferenzen umgerechnet, so dass die gegenseitige Beeinflussung der EWS berücksichtigt wird:

Erdwärme: Sonden-Dubletten ohne Wärmepumpeneinsatz

ModGeo3D erlaubt in der Datei **{projekt}.wel** die Vorgabe von numerierten Dubletten-Sonden mit dem Kennwort **dub.nummer**. Die Nummer bezeichnet die jeweils andere Sonden der Dublette (die Nummer entspricht der Aufzählung der Sonden in der Datei **{projekt}.wel**). Als Beispielzeilen:

k	i	j	Qmax	name.Nummer
3	5	4	-1.e3	dub.3
6	2	4	1.e3	
3	7	3	1.e3	
1	5	4	1.e10	

In der Dublettenanordnung wird bei Ausspeisung von Wärme die Förderrate Liquid dann Null gesetzt, wenn die Temperatur des Förderstromes unter den Vorgabewert in der Datei **{projekt}.rho** fällt. Da bei Dublettenanordnung die jeweils andere Sonde Wasser injiziert, wird auch dort die Injektionsrate Null gesetzt (also im Beispiel für die Sonden 1 und 3).

Erdwärme: Sonden-Dubletten mit Wärmepumpeneinsatz

ModGeo3D erlaubt in der Datei **{projekt}.wel** die Vorgabe von numerierten Dubletten-Sonden mit dem Kennwort **dub.nummer**. Die Nummer bezeichnet die jeweils andere Sonden der Dublette (die Nummer entspricht der Aufzählung der Sonden in der Datei **{projekt}.wel**). Bei Wärmepumpeneinsatz muss die Nummer in **dub.xx** negativ sein. Als Beispielzeilen:

k	i	j	Qmax	name.Nummer
3	5	4	-1.e3	dub.-3
6	2	4	1.e3	
3	7	3	1.e3	
1	5	4	1.e10	

Die Vorgabe von **dub.xx** ist nur möglich, wenn die Rate negativ ist (Förderung). Wenn in der Sonde 1 (im Beispiel) die Temperatur unter den (Vorgabewert+delWP) fällt, dann arbeitet die Sonde weiter, jedoch wird eine Wärmepumpe eingeschaltet, die den Vorgabewert sichert. (Vorgabewert = Temperatur unter **#well**, delWP = Eingabewert unter **#con**).

#river (Block: River - Vorfluter)

Eingabe wie **#wel**.

#bnd (Block: General Head Boundary – Randbedingung 3.Art)

Eingabe wie **#wel**.

Gas-Zelle: Falls die General Head Boundary nur Gas produziert/injiziert, muss die Layer-Nummer (in der Datei **{projekt}.ghb**) **negativ** vorgegeben werden und der Druck in bar Überdruck. Die Conductance gilt für die jeweiligen Druck- und Temperaturbedingungen der Stressperiode, Maßeinheit=[(i.d.R. Standardbedingungen, $\text{m}^3_{\text{st}}/\text{bar}/\text{Zeiteinheit}$].

#fra (Block: Frac Permeability Change Index)

Eingabe wie **#isw**.

Der Index =0 bewirkt keine Perm-Änderung, Index=1 lässt Änderungen zu; Index=-1 übernimmt die bis zu dieser Simulationszeit geänderten Permeabilitäten und behält sie weiterhin bei.

##stress,2,permc,frost (Nachfolgende Daten gelten ab Stressperiode 2)

..
..
..

#eof Ende der Daten

5.7 Besonderheiten bei Einphasen-Gasströmung (bzw. Zweiphasenströmung mit Gas-Well, Gas-General Head Boundary or Constant Gas Boundary) oder Wärmequellen (heat well)

Für die Gasströmung sind in **Visual Modflow** nicht vorgesehen:

- zeitabhängige Randbedingungen 1. Art (constant head)
- zeitabhängige Randbedingungen 3.Art (general head boundary)
- Quellen/Senken (wells).

Die anderen hydraulische Besonderheiten, wie z.B. **river und drain**, haben für die Gasströmung keine Bedeutung.

Deshalb wurde folgende Verfahrensweise in **ModGeo3D** involviert:

Zeitabhängige Randbedingungen (Gasdruck),

Die Zellen werden in **Visual Modflow / CADSHELL** als Randzellen (in der Datei **{projekt}.ch** mit negativer Layer-Nummer) gekennzeichnet, die einzugebende Spiegelhöhe ist der **Gasdruck in bar Absolutdruck**. In der dann erzeugten Randbedingungsdatei **{projekt}.ch** werden alle Zellen, für die der Gasdruck gelten soll, gekennzeichnet, **indem die Schichtnummer (layer) als negative Zahl eingegeben wird**.

Bei **Zweiphasenströmung** kann die Wassersättigung in der Randzelle zeitabhängig vorgegeben werden. Dazu wird in den Spalten 51-60 die Anfangssättigung, in den Spalten 61-70 die Endsättigung vorgegeben (in der Stressperiode lineare Interpolation).

Well (Bohrloch) mit vorgegebenem Gas-Massenstrom

Die Zellen werden in **Visual Modflow / CADSHELL** als Brunnen (Well, in der Datei ({projekt}.wel) gekennzeichnet, der einzugebende Volumenstrom ist der **Gasvolumenstrom in m³ im Referenzzustand**. In der dann erzeugten Datei {projekt}.wel muss ein „g“ eingefügt werden (s. Block **#well**).

Wärmequellen (heat well) und Zusammenfassung von Zellen zu einem Totalen Well
siehe Block **#well**

General Head Boundary mit vorgegebenem Druck und Volumen eines Speichers

Diese Bedingung kann eine integrale Randbedingung ersetzen, indem an eine Zelle ein Speichervolumen mit vorgegebenem Initialdruck angeschlossen wird.

Die Zellen werden in **Visual Modflow / CADSHELL** als **General Head Boundary** gekennzeichnet. Die einzugebende Spiegelhöhe ist der **Gasdruck des Speichervolumens in bar Überdruck**. Der einzugebende Leitwert gilt für den Referenzzustand.

In der dann erzeugten Datei {projekt}.ghb werden alle Zellen, für die der Gasdruck gelten soll, gekennzeichnet, indem die **Schichtnummer (layer) als negative Zahl eingegeben wird**.

5.8 Inputdatei für PhreeqC

Wenn in einer Zelle oder in einem Teilgebiet eine chemische Gleichgewichtssimulation erfolgen soll, dann müssen die chemischen Reaktionen nach dem **PhreeqC**-Manual charakterisiert und in einer Datei vorgegeben werden. Diese Datei hat den Namen des Jobs mit Zusatz .phr (projekt.phr). Der Aufbau ist dem **PhreeqC**-Manual zu entnehmen. Dabei sind jedoch die variablen Inputkonzentrationen jeder Komponente (die bei jedem **PhreeqC**-Aufruf von **ModGeo3D** übergeben/übernommen werden müssen) wie folgt vorzugeben.

- Komponenten der flüssigen Phase: **xxxxN**
- Komponenten der Gasphase: **yyyyN**
- Mineralphase (Feststoff): **zzzzN**

(N ist dabei die Nummer der Komponente aus der Datei {projekt}.rho).

6 Programmstart / Datei batch.con

Zur Software **ModGeo3D** gehören insgesamt folgende Programme und Dateien:

- **ModGeo3D.exe** (ausführbares Programm),
- **phreeqc.exe** (ausführbares Programm, falls chemische Gleichgewichtsberechnungen erfolgen sollen),
- **modgeo3d.nam** (Namensfile),
- **license.cal** (Lizenzfile),
- **chemischeSpecies.dat** (Datenfile, falls chemische Gleichgewichtsberechnungen erfolgen sollen bzw. die thermodynamischen Eigenschaften von Gasen nach der Zustandsgleichung von **Peng-Robinson** berechnet werden sollen),
- Eingabefiles **{projekt}.***, erzeugt von **Visual Modflow** bzw. **CADSHHELL**.
- **{projekt}.rho** (zusätzlicher Eingabefile),
- **{projekt}.phr** (Eingabefile für chemische Gleichgewichtsberechnungen).

(**{projekt}** ist der Jobname, der im Namensfile definiert ist).

Zum Programmstart müssen das Programm **ModGeo3D.exe** und die Namensdatei **modgeo3d.nam** in einem Verzeichnis stehen, i.d.R. gemeinsam mit allen Eingabe-Dateien.

Die Eingabedateien können jedoch auch in einem gesonderten Verzeichnis stehen, das in **modgeo3d.nam** bezeichnet ist.

Der Text in einem typischem Namensfile ist nachfolgend ausgedruckt:

d:\aktuell\2phase\demo\modflow.in ! Pfad+Name der zuerst aufzurufenden Input-Datei

d:\aktuell\2phase\demo\ausgabe\ ! Pfad für Output-Dateien

ACHTUNG: letztes BACKSLASH in zweiter Zeile muss immer vorhanden sein !

Der Lizenzfile **License.CAL** mit einer gültigen Lizenz muss entweder in dem Verzeichnis **C:\license** oder im gleichen Verzeichnis wie das Programm stehen.

Der Lizenzfile sollte halbjährlich erneuert werden, um die jeweils aktuelle Version von „**chemischeSpecies.dat**“ zu nutzen. Ebenso müssen monatlich zwei Lizenzkennzahlen vom Lizenzgeber abgefragt werden. Bei falschen Lizenzkennzahlen startet die Software nicht.

Falls chemische Gleichgewichtsberechnungen mit PHREEQC vorgesehen sind, muss dieses Programm (**phreeqc.exe**) im gleichen Verzeichnis wie **ModGeo3D.exe** oder bei den Eingabedaten stehen. Die zugehörige Datenbasis **phreeqc.dat** muss im gleichen Verzeichnis wie die Eingabedaten stehen. Die Datei **chemischeSpecies.dat** kann entweder in **C:\license** oder bei den Eingabedaten stehen.

Ist eine Datei **batch.con** vorhanden und beginnt die erste Zeile dieser Datei mit dem Startwort **ACTIVE**, dann erfolgt eine Batch-Abarbeitung des Programmes, andernfalls wird die Datei **batch.con** neu geschrieben mit dem Startwort **INACTIVE**.

6.1 Abarbeitung im Dialog/Batchbetrieb

Nach dem Start des Programmes sind eine Anzahl von Eingaben im Dialog notwendig, die jedoch selbsterklärend sind. Nach jeder Stressperiode kann die Abarbeitung zur Ergebnissausgabe unterbrochen werden. Bei langen Rechenzeiten ist diese Art der Abarbeitung nicht attraktiv, deshalb werden alle Eingaben in der Datei **batch.con** mitgeschrieben.

Die Abfragen zu Beginn der Simulationsrechnung sind abhängig von der zu lösenden Problemstellung. Wird z.B. nur Strömung oder Grundwasserströmung oder Zweiphasenströmung oder Strömung und Transport mit unterschiedlicher Anzahl von Komponenten mit/ohne **PhreeqC** gerechnet, sind unterschiedliche Dialogantworten erforderlich.

Vorteilhaft ist folgendes Verfahren:

- Start im Dialogbetrieb mit inaktiver Datei **batch.con**,
- Unterbrechung nach der ersten Stressperiode und Ausgabe aller gewünschten Ergebnisse,
- Stop der Simulation, Vervollständigung der Datei **batch.con** für alle Stressperioden und **Aktivierung** der Datei (Startwort **ACTIVE**),
- Neustart des Programmes im Batch-Betrieb.

6.2 Zu den Dialog-Abfragen

- Bei jeder Frage (außer Zahlenvorgaben) werden die Antwortmöglichkeiten angezeigt.
- Bei Antwortmöglichkeit in **Kleinbuchstaben: Eingabe unbedingt erforderlich**.
- Bei Antwortmöglichkeit in **Großbuchstaben: Frage kann mit ENTER beantwortet werden**, als Antwort wird der ‚groß geschriebene‘ Buchstabe gesetzt.
- Das Programm kann nach jeder Stressperiode oder einer vorzugebenden Stressperiode zur Ergebnissausgabe angehalten werden. Erfolgt keine Eingabe einer Stressperiodennummer (Return), dann können Ergebnisse nur am Ende der letzten Periode ausgegeben werden.
- Die Ausgabe ist als 3D-Datei (für TECPLOT vorbereitet), als 1D-, 2D- oder 3D-Datei für beliebige Grafik-Software (ASCII) erfolgen. Dabei werden die Koordinaten in Meter und der entsprechende Wert im ASCII-Code ausgegeben. Falls die Ursprungskoordinaten **X0** und **Y0** ungleich Null vorgegeben sind (z.B. als Gauss-Krüger-Koordinaten), erfolgt die Ausgabe in diesem Koordinatensystem.
- Die Achsenbezeichnungen sind **R = Rechtswert** (horizontale oder y-Achse mit Zellindex j), **H = Hochwert** (senkrechte oder x- Achse mit Zellindex i) und **Z = Vertikale Koordinate** (vertikale oder z-Achse mit Zellindex k).
- Die Geschwindigkeiten sind Darcygeschwindigkeiten (Abstandsgeschwindigkeit = Darcygeschwindigkeit / Porosität) und sind nach den Achsen y, x ,z benannt, also: wy,wx,wz bzw. wly,wlx,wlz für Flüssigkeiten und wgy, wgx, wgz für Gas.

Optionen:

Bemerkung: die Namen der zu speichernden Files **müssen** mit **.dat** enden, da der Punkt als Enderkennung dient.

t: Tecplotausgabe (vorbereitet), 3D und alle 2D-layer, keine weitere Ausgabe des entsprechenden Ergebnisses

a: ASCII-Ausgabe 1D, 2D entsprechend Grafikprogramm mit

XY oder YX: Horizontalschnitt, Vorgabe des gewünschten Modelllayers

XZ bzw. YZ: Vertikalschnitt mit Vorgabe des gewünschten Indizes für X bzw. Y

Z: Ergebnisdarstellung 1D = Säule – Vorgabe j und i

Für Vertikalschnitte kann ein Skalierungsfaktor (default = 10) vorgegeben werden, um bei der grafischen Darstellung das Verhältnis Höhe/Breite anzugleichen.

Bei dieser Option können für einen Parameter beliebig viele Schnitte gespeichert werden.

n: bewirkt die Abfrage der nächsten Daten

e: Beenden der Ausgabesteuerung. Diese Eingabe wird noch einmal nachgefragt. Es besteht die Möglichkeit, weitere Ausgabefiles zu erstellen (**y'**) oder eine folgende Stressperiode für eine Ergebnisspeicherung (**n'**) anzugeben.

Die **Ausgabe von Spiegelhöhen** (hydraulic head = Höhe der dichteabhängigen Säule; freshwater head = Höhe einer Süßwassersäule) wird gekennzeichnet (zur späteren grafischen Unterdrückung),

- für passive Zellen (Wert = -1.E30 m),
- für die Grundwasserströmung bei trockenen Zellen, die auch vertikal darunter nur trockene bzw. passive Zellen besitzen (Wert = -1.E6 m),
- für die Zweiphasenströmung, wenn die Flüssigkeitssättigung kleiner als $(1 - S_{\text{gas,krit.}})$ ist (Wert = -1E30).

6.3 Ergebnissicherung für Fortsetzungsrechnungen

Bei sehr langen Rechenzeiten ist es vorteilhaft, die Möglichkeit von Fortsetzungsläufen vorzusehen. Deshalb wird im Dialog abgefragt, ob beim Start des Programmes gerettete Ergebnisse als Startwerte genutzt werden sollen (Drücke, Geschwindigkeiten, Konzentrationen, Temperatur) bzw. ob solche Daten **nach jeder Stressperiode** gerettet werden sollen (in einer Binärdatei {projekt}.sav). Nach jedem Zeitschritt werden zusätzlich die Daten in der Binärdatei

{projekt_step}.sav gespeichert. Wenn man mit den Daten in {projekt_step}.sav starten will, muss sie in {projekt}.sav umbenannt werden. Diese Datei wird nach jeder Stressperiode überschrieben, so dass stets die zuletzt berechnete Stressperiode bzw. der zuletzt berechnete Zeitschritt gespeichert ist. Mit diesen Daten sind Fortsetzungsläufe möglich.

Im Dialog wird abgefragt, ob mit geretteten Daten gestartet werden soll (Fortsetzungslauf). Dazu muss als Antwort „r“ oder „R“ (für **read**) eingegeben werden. Bei „R“ werden auch die geretteten aktuellen Permeabilitäten und vertical leakage-Werte eingelesen.