

WinSMART

WinSMART

Veröffentlicht 2012

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Installationshinweise	2
2.1. Inhalt des Installationsarchivs	2
2.2. Installation	2
3. Benutzeroberfläche	3
3.1. Hauptmenüleiste	3
3.1.1. Datei	3
3.1.2. Hilfe	4
3.2. Festlegung der Modelleingabeparameter und Ergebnisausgaben	4
3.2.1. Szenarioinformationen	4
3.2.2. Modellgeometrie und Diskretisierung	5
3.2.3. Bestimmung der Verweilzeitenverteilung	7
3.2.4. Simulationszeiten und zeitliche Diskretisierung	7
3.2.5. Untergrundeigenschaften	8
3.2.6. Auswahl der Komponenten	9
3.2.7. Korngrößenklassen	10
3.2.8. Zusammensetzung der Kornmatrix	11
3.2.9. Hydraulische Parameter	12
3.2.10. Randbedingungen (Strömung)	12
3.2.11. Randbedingungen (Transport)	13
3.2.12. Bioabbau	15
3.2.13. Sorption	15
3.2.14. Sonstige Modellparameter	16
3.2.15. Spezifikation der Ausgabe	20
3.3. Ergebnisvisualisierung und -ausgabe	20
3.3.1. Durchbruchskurven	20
3.3.2. Konzentrationsprofile	21
3.3.3. Weitere Ergebnisse	22
3.4. Dateiorganisation	23
3.4.1. Szenariodatei	23
3.4.2. Katalogdateien	24
3.4.3. Weitere externe Dateien	24
3.4.4. Projektordner/Ergebnisse	24
4. Literatur	25
A. Berechnung im SMART-Modus	26
B. Externe Bestimmung der Verweilzeitenverteilung	29

Abbildungsverzeichnis

3.1. Elemente der WinSMART-Benutzeroberfläche	3
3.2.	4
3.3. Formular "Neues Szenario"	4
3.4. Formular "Szenarioinformationen"	5
3.5. Eingabemaske für das Wurzelverzeichnis im Formular "Modellgeometrie"	6
3.6. Eingabemaske für eine Hauptschicht im Formular "Modellgeometrie"	6
3.7. Eingabemaske für eine Nebenschicht im Formular "Modellgeometrie"	6
3.8. Modelleditor nach Festlegung der Modellgeometrie	7
3.9. Formular "Verweilzeitenbestimmung"	7
3.10. Formular "Simulationszeiten und zeitliche Diskretisierung"	8
3.11. Formular "Untergrundeigenschaften"	8
3.12. Modelleditor nach Festlegung der Materialkennungen	9
3.13. Formular "Katalog-Editor" (Schadstoffe)	10
3.14. Formular "Katalog-Editor" (Schadstoffe)	10
3.15. Formular "Katalog-Editor" (Lithokomponenten)	10
3.16. Formular "Korngrößenklassen" (benutzerdefiniert)	11
3.17. Formular "Korngrößenklassen" (nach DIN4022)	11
3.18. Material-Editor	11
3.19. Material-Editor	12
3.20. Formular "Randbedingungen (Stroemung)"	13
3.21. Formular "Randbedingungen (Transport) - Obere Randbedingungen"	14
3.22. Formular "Randbedingungen (Transport) - Anfangsbedingungen"	14
3.23. Formular "Bioabbau: Modellparameter"	15
3.24. Formular "Sorptionsthermen"	16
3.25. Formular "Sonstige Modellparameter: Transportmodell"	17
3.26. Formular "Sonstige Modellparameter: Konzentrationsgleichgewicht nach Newton-Raphson"	17
3.27. Formular "Sonstige Modellparameter: Iterative Berechnung Prozessschritte"	17
3.28. Formular "Sonstige Modellparameter: Berechnung Intrapartikeldiffusion"	18
3.29. Formular "Sonstige Modellparameter: Analytische Berechnung der Intrapartikeldiffusion"	18
3.30. Formular "Sonstige Modellparameter: Numerische Berechnung IP-Diffusion"	18
3.31. Formular "Sonstige Modellparameter: Berechnung Bioabbau"	19
3.32. Datenausgabe"	19
3.33. Formular "Sonstige Modellparameter: Weitere Parameter"	20
3.34. Formular "Spezifikation der Ausgabe"	20
3.35. Ergebnisdarstellung: Durchbruchskurven	21
3.36. Ergebnisdarstellung: Konzentrationsprofile	22
3.37. Ergebnisdarstellung: Bilanzierung	23
A.1. SMART-Prinzip: Beschreibung des konservativen Transports als Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit	26
A.2. SMART-Prinzip: Beschreibung des Einflusses der Reaktionen durch die Simulation des advektiv-reaktiven Transports über die Verweilzeit τ	27
A.3. SMART-Prinzip: Berechnung des Konzentrationsdurchbruchs durch Kopplung von konservativem Transport und Reaktionen	28
B.1. Beispiel einer Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit	29

Tabellenverzeichnis

3.1. Strömungsrandbedingungen	12
3.2. Übersicht und Kurzbeschreibung der implementierten Isothermen	16
3.3. Übersicht der Ergebnisdateien	23

1

Einleitung

Das mathematische Simulationsmodell SMART wurde im Rahmen verschiedener Diplom- und Dissertationsarbeiten (Jäger, 1996, Finkel, 1999; Bold, 2004) am Zentrum für Angewandte Geowissenschaften der Eberhard Karls Universität entwickelt.

Für Transportmodellierungen, die einer mechanistischen Beschreibung der zeit-abhängigen Sorption bedürfen, ist SMART das gegenwärtig am weitesten fortgeschrittene Sickerwasserprognosemodell, verfügte aber bislang nicht über eine geeignete Benutzeroberfläche. Daher hat das Expertenteam „SiWaP-Modellwerkzeuge“ der TASK-Initiative des BMBF im Jahr 2009 die Entwicklung einer grafischen Benutzeroberfläche für das Programmsystem SMART empfohlen.

Dieser Empfehlung folgend wurde mit Hilfe der Finanzierung durch TASK das Programmsystem *WinSMART* entwickelt

Das vorliegende Benutzerhandbuch enthält Beschreibungen und Hinweise zum Umgang mit der Benutzeroberfläche von *WinSMART* zur Durchführung von Simulationen mit SMART.

Installationshinweise

2.1. Inhalt des Installationsarchivs

Die Installationsdatei *WinSMART.zip* beinhaltet eine in der Programmiersprache Java geschriebene grafische Benutzeroberfläche, eine in *FORTTRAN* geschriebene Recheneinheit, Katalogdateien mit Schadstoffen und Lithokomponenten, Beispieldatensätze sowie eine Hilfsdokumentation.

Inhalte von *WinSMART.zip* (Ordner sind kursiv dargestellt):

- *WinSmart.jar*
- *WinSMART.pdf*
- *Readme.txt*
- *examples*
- *files*
- *fortran*
- *project*
- *data*

Im Ordner *examples* befinden sich die Beispieldatensätze, der Ordner *files* beinhaltet die Katalogdateien. Im Ordner *fortran* liegt jeweils eine ausführbare FORTRAN-Datei für die Betriebssysteme Windows und Linux. (Der Aufruf der FORTRAN-Dateien erfolgt über die grafische Benutzeroberfläche.) Für jedes angelegte Szenario in der Benutzeroberfläche wird im Ordner *project* ein Unterordner erzeugt, der alle Eingaben für und Ausgaben von FORTRAN beinhaltet, er bildet somit die Daten-Schnittstelle zwischen Benutzeroberfläche und Recheneinheit. Benötigt eine Berechnung zusätzliche externe Dateien, so können diese im Ordner *data* abgelegt werden.

2.2. Installation

Zur Installation von *WinSMART* ist lediglich das Installationsarchiv zu entpacken. Dabei kann das Installationsverzeichnis, in das die Dateien aus *WinSMART.zip* entpackt werden, beliebig gewählt werden. Die Struktur innerhalb des Installationsverzeichnisses darf jedoch nicht geändert werden.

3

Benutzeroberfläche

Die Benutzeroberfläche und ihre unterschiedlichen Arbeitsbereiche zeigt [Abbildung 3.1](#), „Elemente der WinSMART-Benutzeroberfläche“ [3].

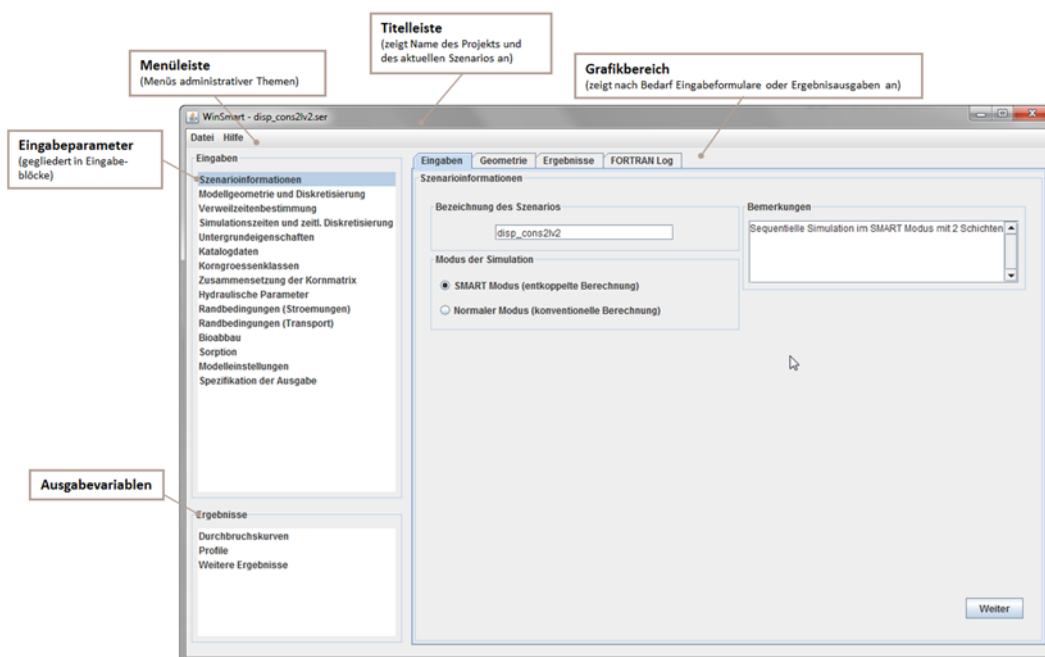


Abbildung 3.1. Elemente der WinSMART-Benutzeroberfläche

3.1. Hauptmenüleiste

3.1.1. Datei

Über den Menüpunkt "Datei" werden alle Funktionen der Erstellung und Speicherung eines Modellszenarios erreicht (siehe [Abbildung 3.2](#), „[4]).

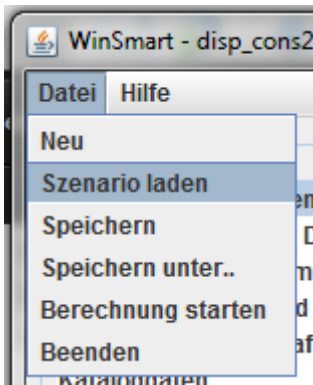


Abbildung 3.2.

Die Erstellung eines neuen Szenarios erfolgt über den Menüeintrag *Neu*. In einem Formular sind die Szenariobezeichnung sowie der gewünschte Speicherort der zugehörigen Szenariodatei anzugeben (siehe [Abbildung 3.3](#), „Formular ‘Neues Szenario’“ [4]).

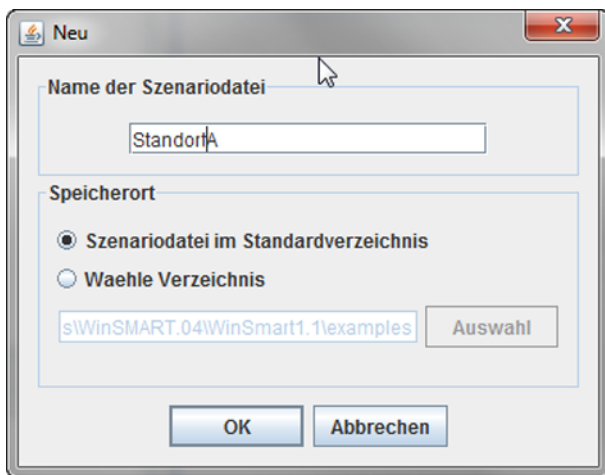


Abbildung 3.3. Formular “Neues Szenario”

3.1.2. Hilfe

Unter dem Menüpunkt "Hilfe" sind das Online-Handbuch sowie allgemeine Hinweise zu WinSmart zu finden.

3.2. Festlegung der Modelleingabeparameter und Ergebnisausgaben

Die erforderlichen Eingaben sind inhaltlich in insgesamt 14 Eingabeblocke gegliedert. Da verschiedene Eingaben voneinander abhängig sind, sollten die Eingaben in der vorgegebenen Reihenfolge von oben nach unten vorgenommen werden.

Die einzelnen Eingabeblocke werden nachfolgend erläutert.

3.2.1. Szenarioinformationen

Für jedes Modellszenario kann eine Bezeichnung angegeben werden, die standardmäßig, d.h. nachdem ein neues Szenario erzeugt wurde, mit dem Namen der zugehörigen Szenariodatei übereinstimmt. Dies ist aber nicht zwingend erforderlich. Die Bezeichnung kann nachträglich verändert werden.

Im Feld *Bemerkungen* können erläuternde Hinweise zum Szenario, etwa zu Sinn, Zweck und Annahmen des Szenarios, gemacht werden.

Im Formularbereich *Modus der Simulation* ist festzulegen, ob eine entkoppelte Berechnung von konservativem Transport und der Reaktionen durchgeführt werden soll (SMART-Modus) oder ob eine konventionelle Berechnung des advektiv-reaktiven Transports gewünscht ist (Normaler Modus).

Bei einer entkoppelten Berechnung berechnet SMART nur den reaktiven Transport. Der konservative Transport wird durch die (Wahrscheinlichkeitsdichte-)Verteilung der Verweilzeiten beschrieben. Näheres zum „SMART-Prinzip“ wird in [Anhang A, Berechnung im SMART-Modus \[26\]](#) erläutert. Sind Berechnungsparameter wie beispielsweise Porosität oder die Zusammensetzung der Kornmatrix im Modellraum räumlich heterogen verteilt und soll der Modellraum daher in unterschiedliche Horizonte bzw. Schichten unterteilt werden, dann wird für jede dieser Schichten eine separate Berechnung mit SMART durchgeführt, wobei sequentiell in Strömungsrichtung vorgegangen wird und die Konzentrationen der betrachteten Wasserinhaltsstoffe im Ausfluss einer Schicht als Randbedingungen für den Zufluss der nachfolgenden Schicht gesetzt werden. Dementsprechend ist die Verweilzeitenverteilung ebenfalls schichtweise zu bestimmen (siehe hierzu den [Abschnitt 3.2.3, „Bestimmung der Verweilzeitenverteilung“ \[7\]](#)).

Bei einer konventionellen Berechnung wird unabhängig von der räumlichen Diskretisierung und der räumlichen Verteilung der Berechnungsparameter eine Simulation des advektiv-reaktiven Transports mit SMART durchgeführt.

Abbildung 3.4. Formular “Szenarioinformationen”

3.2.2. Modellgeometrie und Diskretisierung

Im Eingabebereich "Modellgeometrie und Diskretisierung" ist die Geometrie des Modellraums und dessen räumliche Diskretisierung festzulegen. Der Modellraum wird dabei unterteilt in Haupt- und Nebenschichten. Eine Hauptschicht besteht aus einer oder mehrerer Nebenschichten.

Die Zuweisung von Bodeneigenschaften erfolgt auf der Hierarchieebene „Nebenschicht“. D.h., eine Nebenschicht ist in sich homogen, den zugehörigen Modellzellen werden dieselben Parameterwerte zugeordnet).

Die Definition der Haupt- und Nebenschichten erfolgt im Formularbereich *Schichtexplorer*. Hauptschichten werden hinzugefügt oder entfernt, indem im Baumverzeichnis der sogenannte Wurzelknoten (Standardbezeichnung: *Oberfläche*) gewählt wird und die Schaltflächen "Neu" oder "Entfernen" gedrückt werden. Nebenschichten werden einer Hauptschicht hinzugefügt oder entfernt, indem im Baumverzeichnis die entsprechende Hauptschicht gewählt wird und die Schaltflächen "Neu" oder "Entfernen" gedrückt werden.

Für das Wurzelverzeichnis ist die Querschnittsfläche des betrachteten Modellraums sowie eine Bezeichnung festzulegen (siehe hierzu [Abbildung 3.5, „Eingabemaske für das Wurzelverzeichnis im Formular “Modellgeometrie”“ \[6\]](#)). Für jede Nebenschicht ist die gewünschte räumliche Auflösung, d.h. die Anzahl der Modellzellen zu definieren, durch welche die Nebenschicht äquidistant diskretisiert wird.

Für jede Haupt- und für jede Nebenschicht sind die Lage der Oberkante (OK) und Unterkante (UK) sowie eine Bezeichnung festzulegen (siehe hierzu [Abbildung 3.6, „Eingabemaske für eine Hauptschicht im Formular “Modellgeometrie”“ \[6\]](#) und [Abbildung 3.7, „Eingabemaske für eine Nebenschicht im Formular “Modellgeometrie”“ \[6\]](#)). Für jede Nebenschicht ist die gewünschte räumliche Auflösung, d.h. die Anzahl der Modellzellen zu definieren, durch welche die Nebenschicht äquidistant diskretisiert wird.

Spätere Änderungen an der Modellgeometrie können Löschungen von bereits eingegebenen Modellparametern zur Folge haben.

The screenshot shows the 'Modellgeometrie' input mask. On the left, the 'Schichtexplorer' panel displays a tree structure with 'Oberfläche' selected. Below it are 'Hauptschicht.1' and five sub-layers: 'S1: fS', 'S2: St', 'S3: Su2t2', 'S4: Sut', and 'S5: St'. At the bottom of the explorer are 'Neu' and 'Entfernen' buttons. On the right, the 'Schichtdaten' panel shows the 'Bezeichnung' field with the value 'Oberfläche' and the 'Querschnittsflaeche (qm)' field with the value '1.0'.

Abbildung 3.5. Eingabemaske für das Wurzelverzeichnis im Formular “Modellgeometrie”

The screenshot shows the 'Modellgeometrie' input mask with 'Hauptschicht' selected in the 'Schichtexplorer'. The tree structure shows 'rootLayer' containing 'Hauptschicht', which in turn contains 'seq1' and 'seq2'. The 'Schichtdaten' panel on the right shows 'Bezeichnung' as 'Hauptschicht', 'x-Wert OK (m)' as '0.0', and 'x-Wert UK (m)' as '1.0'. 'Neu' and 'Entfernen' buttons are at the bottom of the explorer.

Abbildung 3.6. Eingabemaske für eine Hauptschicht im Formular “Modellgeometrie”

The screenshot shows the 'Modellgeometrie' input mask with 'seq1' selected in the 'Schichtexplorer'. The tree structure is the same as in the previous image. The 'Schichtdaten' panel on the right shows 'Bezeichnung' as 'seq1', 'x-Wert OK (m)' as '0.0', 'x-Wert UK (m)' as '0.3', and 'Anzahl Modellzellen' as '30'. 'Neu' and 'Entfernen' buttons are at the bottom of the explorer.

Abbildung 3.7. Eingabemaske für eine Nebenschicht im Formular “Modellgeometrie”

Im Modelleditor wird nach Festlegung der Modellgeometrie der Modellaufbau dargestellt (Abbildung 3.8, „Modelleditor nach Festlegung der Modellgeometrie“ [7]). Mittels zweier Säulen wird die räumliche Charakterisierung des Modellraums hinsichtlich der hydraulischen Kenngrößen (blaue Säule) und der Zusammensetzung der Kornmatrix (rote Säule) illustriert. Solange noch keine Untergrundeigenschaften festgelegt sind (siehe dazu Abschnitt 3.2.5, „Untergrundeigenschaften“ [8]), oder falls die Kenngrößen/Parameter homogen im Modellraum verteilt sind, sind beide Säulen einfarbig.

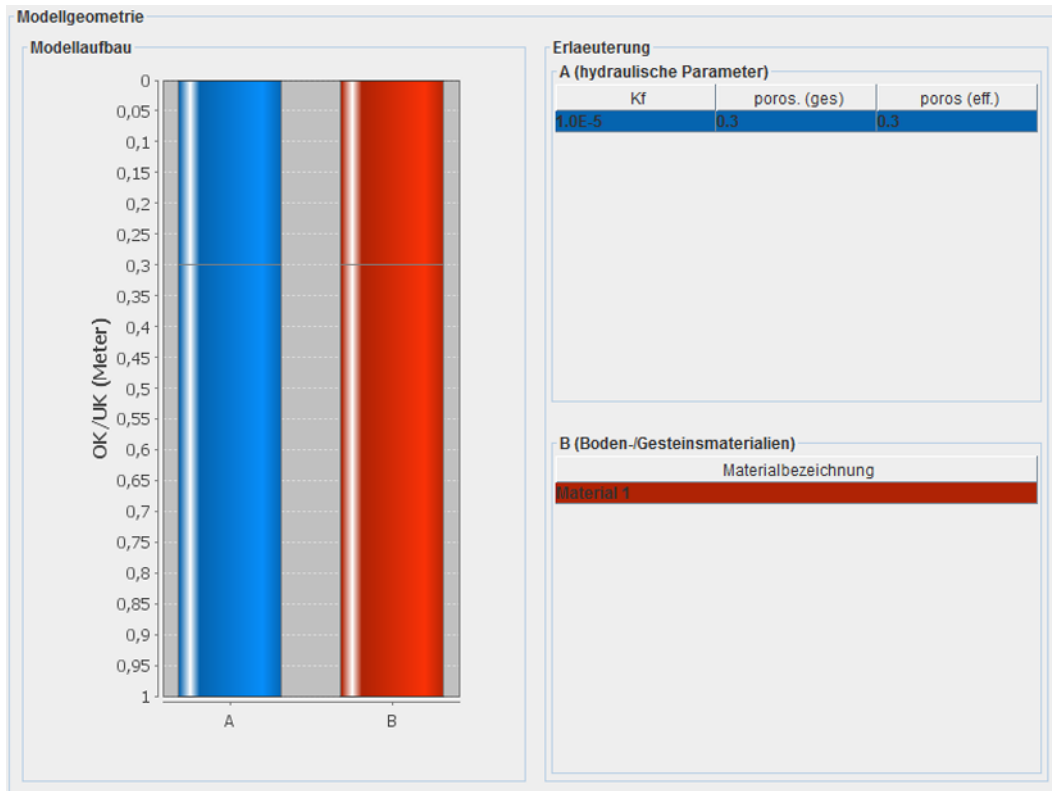


Abbildung 3.8. Modelleditor nach Festlegung der Modellgeometrie

3.2.3. Bestimmung der Verweilzeitenverteilung

Wurde im Formular *Szenarioinformationen* der SMART-Modus gewählt, ist für jede Nebenschicht die Verweilzeitenverteilung zu bestimmen.

Für jede der im Formularbereich *Nebenschichten* durch Mausklick auszuwählende Nebenschicht kann im Formularbereich *Wertebelegung* individuell gewählt werden, ob die Verweilzeitendaten von einer externen Datei zu lesen sind (Option „Werte aus Datei“) oder ob die Verweilzeitenverteilung analytisch nach Ogata and Banks (1961) berechnet werden soll (Option „Berechnung mit Parametern“). Siehe hierzu auch die [Abbildung 3.9](#), „Formular *Verweilzeitenbestimmung*“ [7].

Werden die Werte eingelesen, richtet sich die Diskretisierung der jeweiligen Modellschicht automatisch nach der Anzahl der in der ausgewählten Datei enthaltenen Werte. [Anhang B, Externe Bestimmung der Verweilzeitenverteilung](#) [29] erläutert das erwartete Format der Datei.

Abbildung 3.9. Formular *Verweilzeitenbestimmung*

3.2.4. Simulationszeiten und zeitliche Diskretisierung

Für die zeitliche Diskretisierung der Simulation können konstante oder variable Zeitschrittweiten gewählt werden ([Abbildung 3.9](#), „Formular *Verweilzeitenbestimmung*“ [7]).

Es können beliebig viele Zeitperioden definiert werden, für die Anzahl und Weite der Zeitschritte angegeben werden müssen.

Simulationszeiten und zeitliche Diskretisierung

Modus

☐ Konstant

☒ Variabel

Zeitschritte (s)

Periode Nr.	Anzahl	Laenge
1	200	189215
2	800	86400
3	300	172800

- +

Abbildung 3.10. Formular "Simulationszeiten und zeitliche Diskretisierung"

3.2.5. Untergrundeigenschaften

Nachdem der Aufbau des Modellraums im Formular *Modellgeometrie* festgelegt und in Haupt und Nebenschichten gegliedert wurde, ist jede Nebenschicht durch ihre hydraulischen Kenngrößen und ihre spezifische Kornmatrix zu charakterisieren. Dazu sind zunächst zwei Materialkennungen zuzuweisen (Mat. A -> hydraulische Eigenschaften, Mat. B -> Boden- oder Gesteinsmaterial).

Im Formular *Untergrundeigenschaften* werden alle Nebenschichten aufgelistet. In den Spalten *Hydraul. Parameter* und *Bodenparameter* sind entsprechende ganzzahlige Zahlencodes einzugeben. [Abbildung 3.11, „Formular ‘Untergrundeigenschaften’“ \[8\]](#) zeigt ein Beispiel für insgesamt sechs Nebenschichten. Für die Charakterisierung der Nebenschichten hinsichtlich ihrer hydraulischen Eigenschaften wurden drei Materialklassen, für die Charakterisierung bezgl. ihres lithologischen Aufbaus und ihrer Korngrößenzusammensetzung wurden vier Materialklassen eingeführt.

Die

Untergrundeigenschaften (Materialkennungen)

Lfd. Nr.	Bezeichnung	OK (m)	UK (m)	Hydraul. Parameter	Bodenparameter
1	Nebenschicht 1.1	0.0	0.5	1	1
2	Nebenschicht 1.2	0.5	1.0	1	2
3	Nebenschicht 2.1	1.0	2.0	2	3
4	Nebenschicht 2.2	2.0	2.6	1	3
5	Nebenschicht 2.3	2.6	3.0	1	3
6	Nebenschicht 3.1	3.0	5.0	3	4

Abbildung 3.11. Formular “Untergrundeigenschaften”

Im Modelleditor wird nach Festlegung der Materialkennungen der Modellaufbau mit den Zuordnungen der Materialkennzahlen dargestellt ([Abbildung 3.12, „Modelleditor nach Festlegung der Materialkennungen“ \[9\]](#)). In Bezug auf die Schichteigenschaften werden zunächst Standardwerte angenommen und angezeigt. Diese Werte werden später, in den Eingabebereichen *Korngrößenklassen*, *Zusammensetzung der Kornmatrix* und *Hydraulische Parameter*, festgelegt.

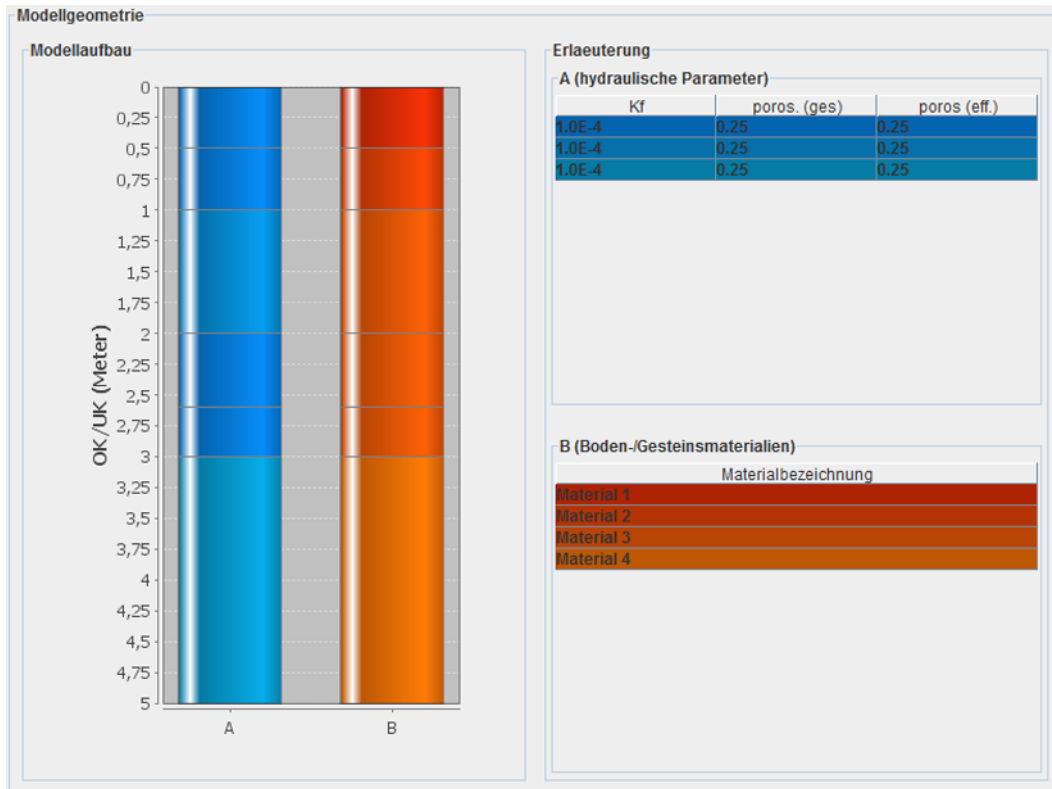


Abbildung 3.12. Modelleditor nach Festlegung der Materialkennungen

3.2.6. Auswahl der Komponenten

In diesem Eingabebereich werden die zu betrachtenden Schadstoffe und die für die Beschreibung des Boden- bzw. Gesteinsmaterials zu berücksichtigenden Lithokomponenten ausgewählt.

Sowohl den Schadstoffen als auch den Lithokomponenten sind verschiedene Eigenschaften bzw. Kenngrößen zugeordnet, deren Wert (z.B. auf der Grundlage von experimentellen Untersuchungen als stoff- oder materialspezifische Konstanten angesehen werden. Da die Eigenschaftswerte also üblicherweise nicht vom Anwender von Simulation zu Simulation neu festgelegt werden, sondern übernommen werden, wird hier auch von Katalogdaten gesprochen. Die Katalogdateien sind also als erweiterbare für alle Simulationen gemeinsame Datenbasis konzeptioniert. Selbstverständlich können die Katalogdateien auch um hypothetische Stoffe oder Materialien bzw. Parameter ergänzt werden, sollten keine gemessenen Werte vorliegen.

Entsprechend werden hier (im Regelfall) lediglich die Komponenten ausgewählt. Hierzu ist im Feld *Kataloge* zunächst die entsprechende Gruppe durch Mausklick anzuwählen (Abbildung 3.13, „Formular “Katalog-Editor” (Schadstoffe)“ [10]). Anschließend können im Eingabebereich *Material* in der Spalte "Auswahl" durch aktivieren des Kontrollkästchens selektiert werden (siehe Abbildung 3.14, „Formular “Katalog-Editor” (Schadstoffe)“ [10] und Abbildung 3.15, „Formular “Katalog-Editor” (Lithokomponenten)“ [10]).

Die Katalogdaten können jederzeit auch ergänzt werden, wenn noch keine Einträge zu den zu betrachtenden Schadstoffen oder Lithokomponenten vorliegen (Schaltfläche "+"). Des Weiteren können auch bestehende Einträge gelöscht werden (Schaltfläche "-").



Abbildung 3.13. Formular "Katalog-Editor" (Schadstoffe)

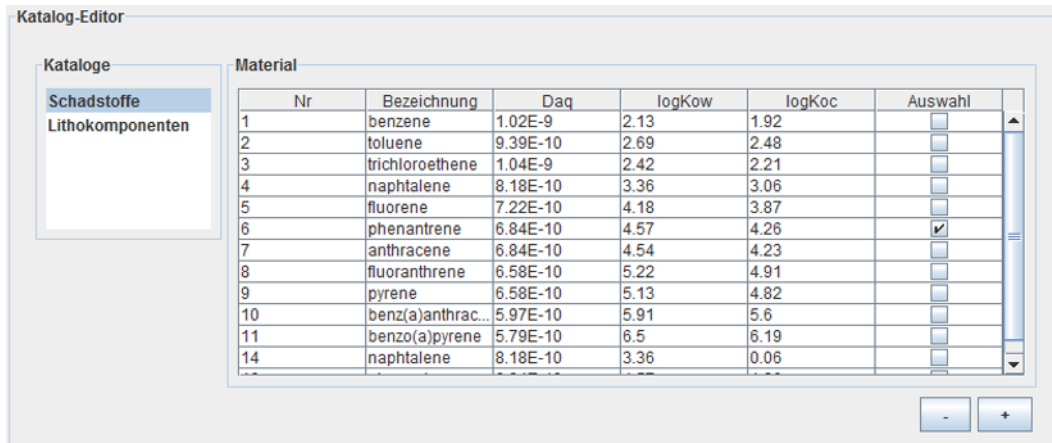


Abbildung 3.14. Formular "Katalog-Editor" (Schadstoffe)

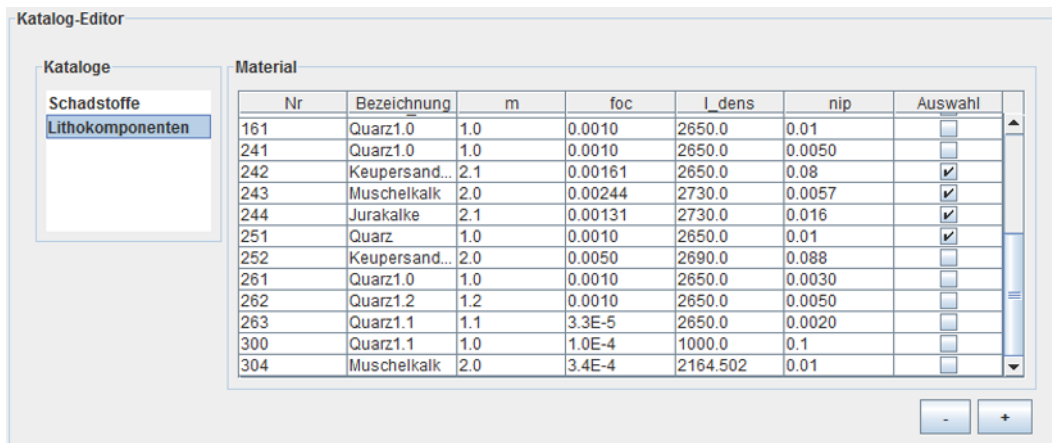


Abbildung 3.15. Formular "Katalog-Editor" (Lithokomponenten)

3.2.7. Korngrößenklassen

Die Definition der Korngrößenklassen kann entweder frei oder nach DIN 4022 vorgenommen werden. Während in letzterem Fall die Verteilung der Korngrößen anhand fest vorgegebener Korngrößenbereiche zu definieren ist (Abbildung 3.17, „Formular "Korngrößenklassen" (nach DIN4022)" [11]), können im Rahmen der freien Definition Korngrößenklasse und deren Anzahl beliebig festgelegt werden (Abbildung 3.16, „Formular "Korngrößenklassen" (benutzerdefiniert)" [11]).

Korngroessenklassen

Modus

☒ benutzerdefiniert
☐ nach DIN 4022

Definiere und waehle Korngroessenklassen

Bezeichnung	Kuerzel	mittl. d (mm)	Auswahl
>16	GF	20.0	<input checked="" type="checkbox"/>
8-16	MGF	12.0	<input checked="" type="checkbox"/>
4-8	MF	6.0	<input checked="" type="checkbox"/>
2-4	FMF	3.0	<input checked="" type="checkbox"/>
1-2	FF	1.5	<input checked="" type="checkbox"/>

- +

Abbildung 3.16. Formular "Korngrößenklassen" (benutzerdefiniert)

Korngroessenklassen

Modus

☐ benutzerdefiniert
☒ nach DIN 4022

Definiere und waehle Korngroessenklassen

Bezeichnung	Kuerzel	mittl. d (mm)	Auswahl
Grobkies	gG	$20 \leq d < 63$	<input type="checkbox"/>
Mittelkies	mG	$6,3 \leq d < 20$	<input type="checkbox"/>
Feinkies	fG	$2 \leq d < 6,3$	<input checked="" type="checkbox"/>
Grobsand 1	gS1	$1 \leq d < 2$	<input checked="" type="checkbox"/>
Grobsand 2	gS2	$0,63 \leq d < 1$	<input checked="" type="checkbox"/>
Mittelsand	mS	$0,2 \leq d < 0,63$	<input checked="" type="checkbox"/>
Feinsand 1	fS1	$0,1 \leq d < 0,2$	<input checked="" type="checkbox"/>
Feinsand 2	fS2	$0,063 \leq d < 0,1$	<input checked="" type="checkbox"/>
Grobschluff 1	gU1	$0,05 \leq d < 0,063$	<input type="checkbox"/>
Grobschluff 2	gU2	$0,02 \leq d < 0,05$	<input type="checkbox"/>

- +

Abbildung 3.17. Formular "Korngrößenklassen" (nach DIN4022)

3.2.8. Zusammensetzung der Kornmatrix

Nachdem Lithokomponenten und Korngrößenklassen festgelegt sind, kann die Zusammensetzung der Kornmatrix bestimmt werden. Dazu sind für jede in [Abschnitt 3.2.5, „Untergrundeigenschaften“](#) [8] eingeführte Materialklasse die Massenfraktionen der Korngrößenklassen und Lithokomponenten einzugeben ([Abbildung 3.18, „Material-Editor“](#) [11]). Die standardmäßig mit "Material#X" bezeichneten Materialklassen können im Feld *Bezeichnung/Umbenennen* neu bezeichnet werden.

Dabei werden zunächst die prozentualen Massenanteile der einzelnen Korngrößenklassen eingetragen. Die Summe in der rechten Spalte zeigt an, ob die Eingaben korrekt sind („100%“ in grüner Farbe). In einem zweiten Schritt sind die prozentualen Massenanteile der Lithokomponenten [underline]#innerhalb der Korngrößenklasse# anzugeben, deren Summe wiederum (je Korngrößenklasse) 100% ergeben müssen, wiederum angezeigt in der untersten Zeile des Material-Editors.

Material-Editor

Waehle Material

Oberer Horizont
Neckarkies

Bezeichnung/Umbenennen

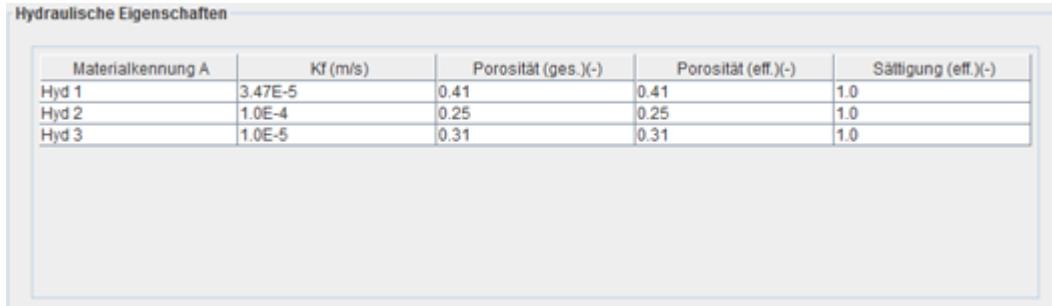
Zusammensetzung (Gewichtsanteile in %)

	GF	MGF	MF	FMF	FF	Summe
Gesamta...	50	20	10	5	15	100.0
Keupersa...	0	0	0	20	55	
Muschelk...	20	65	65	50	25	
Jurakalke	40	30	25	20	15	
Quarz	40	5	10	10	5	
Summe	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	

Abbildung 3.18. Material-Editor

3.2.9. Hydraulische Parameter

Für jede in [Abschnitt 3.2.5, „Untergrundeigenschaften“ \[8\]](#) eingeführte Materialklasse für die Charakterisierung der Modellschichten in Bezug auf die hydraulischen Parameter sind der hydraulische Durchlässigkeitsbeiwert („Kf (m/s)“), die effektive und Gesamt-Porosität sowie die Wassersättigung einzugeben ([Abbildung 3.19, „Material-Editor“ \[12\]](#)). Die Materialklassen sind jeweils mit "hyd#X" bezeichnet.



Materialkennung A	Kf (m/s)	Porosität (ges.)(-)	Porosität (eff.)(-)	Sättigung (eff.)(-)
Hyd 1	3.47E-5	0.41	0.41	1.0
Hyd 2	1.0E-4	0.25	0.25	1.0
Hyd 3	1.0E-5	0.31	0.31	1.0

Abbildung 3.19. Material-Editor

3.2.10. Randbedingungen (Strömung)

SMART ist derzeit nur für konstante Strömungsverhältnisse anwendbar. Die Bestimmung der Randbedingungen im [Abbildung 3.20, „Formular "Randbedingungen \(Stromung\)"“ \[13\]](#) ist dementsprechend trivial. Entweder sind zwei Festpotentiale an den Modellrändern anzugeben oder der Volumenstrom durch die Modellsäule (als Zu- oder Abstrom) und ein Festpotential. Die jeweils dritte Größe wird durch SMART berechnet (siehe hierzu auch [Tabelle 3.1, „Strömungsrandbedingungen“ \[12\]](#)).

Tabelle 3.1. Strömungsrandbedingungen

Option	Anzugebende Parameter		Von SMART berechneter Parameter
	"Obere" Randbedingung	"Untere" Randbedingung	
1	Festpotential h(o)	Festpotential h(u)	Volumenstrom Q
2	Festpotential h(o)	Abstrom Q	Festpotential h(u)
3	Zustrom Q	Festpotential h(u)	Festpotential h(o)

Randbedingungen (Stroemung)

"Obere" Randbedingung (x=0)

☐ Konstante Druckhoehe (Festpotential)
☒ Konstanter Zustrom

Wert: 9.512937595E-9

"Untere" Randbedingung (x=L)

☒ Konstante Druckhoehe (Festpotential)
☐ Konstanter Abstrom

Wert: 1.0

Zurueck Weiter

Abbildung 3.20. Formular "Randbedingungen (Stroemung)"

3.2.11. Randbedingungen (Transport)

Die Randbedingungen für den Stofftransport sind für alle Schadstoffe spezifisch anzugeben ([Abbildung 3.21, „Formular "Randbedingungen \(Transport\) - Obere Randbedingungen"“ \[14\]](#)). Zur Wahl stehen konstante und variable Konzentrationsrandbedingungen für den Zustrom am „oberen“ Modellrand. Variable Konzentrationen können als Stufenfunktion in beliebiger zeitlicher Diskretisierung angegeben werden. Die Umrechnung auf die zeitliche Diskretisierung des Modells erfolgt automatisch, wobei drei verschiedene Optionen zur Verfügung stehen: (i) Interpolation - die Werte werden durch Interpolation zwischen den im Formular angegebenen Stützstellen ermittelt, (ii) voriger Wert - es wird jeweils der Wert der vorigen Stützstelle zugeordnet, also der nächstfrüheren Stützstelle, (iii) nächster Wert - es wird jeweils der Wert der nächsten Stützstelle zugeordnet, also der nächstspäteren Stützstelle.

Die Eingaben können händisch gemacht werden oder durch Einlesen der Daten aus einer Datei.

Die Anfangsbedingungen sind (ebenfalls stoffspezifisch) als Stoffkonzentration in der Festphase oder in der wässrigen Phase festzulegen ([Abbildung 3.21, „Formular "Randbedingungen \(Transport\) - Obere Randbedingungen"“ \[14\]](#)). Hier können räumlich konstante oder variable Konzentrationen angegeben werden. Die Umrechnung auf die räumliche Diskretisierung des Modells erfolgt automatisch, wobei auch hier drei verschiedene Optionen zur Verfügung stehen.

Zusätzlich kann angegeben werden, ob sich das System zu Anfang im Gleichgewicht befindet oder nicht. Wird die Option „Ungleichgewicht“ gewählt, dann werden die Stoffkonzentrationen zum Simulationsbeginn nur in der jeweils gewählten Phase gesetzt. Wurde diesbezüglich die Option „Festphase“ gewählt, und ist die Boden- bzw. Gesteinsmatrix aus unterschiedlichen Lithokomponenten zusammengesetzt, dann sind die eingegebenen Werte als "mittlere Gesamtkonzentration" aufzufassen. Die tatsächlichen Stoffkonzentrationen innerhalb der einzelnen Lithokomponentenfraktionen werden vom Programm automatisch ermittelt. Zu beachten ist, dass die Intrapartikelporen ebenfalls zur Festphase zu zählen sind und sich hier ebenfalls Anfangskonzentrationen größer Null ergeben. Wird die Option „Gleichgewicht“ gewählt, dann werden die Konzentrationen in der jeweils anderen (d.h. im Formular nicht gewählten) Phase mit den im Formular angegebenen Anfangskonzentrationen der gewählten Phase ins Gleichgewicht gesetzt. Die anfangs in der Modellsäule enthaltene Massen der einzelnen Schadstoffe erhöhen sich dementsprechend.

Rand- und Anfangsbedingungen

Parameterkategorie
 Obere Randbedingungen
 Anfangsbedingungen

Parameterwerte

Konzentration
☐ konstant
☒ variabel

Modus
☒ Interpolation
☐ voriger Wert
☐ nächster Wert

Werte (mg/L)

Intervall Nr.	Zeitpunkt (s)	naphthalene
1	200000.0	1.498
2	400000.0	1.496
3	600000.0	1.494
4	800000.0	1.492
5	1000000.0	1.491
6	1200000.0	1.489
7	1400000.0	1.487
8	1600000.0	1.485
9	1800000.0	1.483
10	2000000.0	1.481
11	2200000.0	1.479
12	2400000.0	1.477
13	2600000.0	1.475
14	2800000.0	1.474
15	3000000.0	1.472
16	3200000.0	1.47
17	3400000.0	1.468
18	3600000.0	1.466
19	3800000.0	1.464

Aus Datei - +

Zurück Weiter

Abbildung 3.21. Formular "Randbedingungen (Transport) - Obere Randbedingungen"

Rand- und Anfangsbedingungen

Parameterkategorie
 Obere Randbedingungen
 Anfangsbedingungen

Parameterwerte

Anfangsbedingungen

Konzentration
☒ konstant
☐ variabel

Stoffkonzentr. in
☒ Festphase
☐ wässriger Phase

System im
☒ Gleichgewicht
☐ Ungleichgewicht

Modus
☒ Interpolation
☐ voriger Wert
☐ nächster Wert

Werte (mg/kg)

Intervall Nr.	x-Wert (m)	naphthalene
1	0.0	0.0

Aus Datei - +

Zurück Weiter

Abbildung 3.22. Formular "Randbedingungen (Transport) - Anfangsbedingungen"

3.2.12. Bioabbau

Für die Berechnung des Bioabbaus der betrachteten Schadstoffe kann räumlich ebenfalls zwischen den definierten Nebenschichten differenziert werden. Im Einzelnen sind vier Parameter anzugeben ([Abbildung 3.23](#), „Formular “Bioabbau: Modellparameter“ [15]): der Berechnungsmodus, die Halbwertszeit, die Ordnung der Abbaureaktion sowie ein Referenzwert der Konzentration in der wässrigen Phase.

Bioabbau: Modellparameter

Schadstoffe

phenantrene

Isothermentypen und Parameter je Lithokomponente

Lfd. Nr.	Bezeichnu...	OK	UK	Modus	T 1/2 (s)	Ordnung	Referenz (...)
1	seq1	0.0	0.3	0	86400.0	1.0	1.0
2	seq2	0.3	1.0	0	86400.0	1.0	1.0

Erläuterungen

Berechnungsmodi des Bioabbaus: 0 = kein Bioabbau, 1 = Abbau n-ter Ordnung, 2 = Langmuir-Hinshelwood-Kinetik

Da die Halbwertszeit sowohl für n 1 und die LH-Kinetik konzentrationsabhaenig ist, ist eine Referenzkonzentration anzugeben

Abbildung 3.23. Formular “Bioabbau: Modellparameter

3.2.13. Sorption

Für die Berücksichtigung von Sorptionsprozessen sind stoff- und lithokomponentenspezifische Isothermen anzugeben ([Abbildung 3.24](#), „Formular “Sorptionsthermen“ [16]). Je nach dem welcher Isothermentyp gewählt wird, sind ein, zwei oder drei Parameter anzugeben ([Tabelle 3.2](#), „Übersicht und Kurzbeschreibung der implementierten Isothermen“ [16]).

Sorptionsisothermen

Schadstoffe

phenantrene

Isothermentypen und Parameter je Lithokomponente

Lithokomponente	freq	Isoth.typ	Parameter 1	Parameter 2	Parameter 3
Keupersandst...	0.0011	1	6.0	0.0	0.0
Muschelkalk	0.0044	1	71.0	0.0	0.0
Jurakalke	0.0017	1	6.3	0.0	0.0
Quarz	0.0222	1	1.2	0.0	0.0

Erläuterungen

Isothermentypen: 1 = Henry, 2 = Freundlich, 3 = Langmuir, 4 = BET

Parameter (je nach Isothermentyp):

- 1 - Sorptionskoeffizient
- 2 - Freundlich-Koeffizient, Freundlich-Exponent
- 3 - Adsorptionskonstante, maximale sorbierte Konzentration
- 4 - Adsorptionskonstante, maximale sorbierte Konzentration, Sättigungskonzentration

Zurueck Weiter

Abbildung 3.24. Formular "Sorptionsisothermen"

Tabelle 3.2. Übersicht und Kurzbeschreibung der implementierten Isothermen

Typ/Bezeichnung	Erforderliche Parameter
Lineare (Henry-)Isotherme	Kd
Freundlich- Isotherme	Freundlich- Koeffizient K(fr), Freundlich- Exponent n(fr)
Langmuir-Isotherme	Adsorptionskonstante K(L), maximale sorbierte Konzentration c(sorb, max)
BET-Isotherme	Adsorptionskonstante K(BET), maximale sorbierte Konzentration c(sorb, max), Sättigungskonzentration c(sat)

Der Anteil der schnellen Gleichgewichtsfraction an der Sorption wird über den Parameter f_{eq} festgelegt (ein Wert von 1.0 entspricht 100%).

3.2.14. Sonstige Modellparameter

In diesem Eingabebereich können in verschiedene Einzelformularen Einstellungen diverse Parameter vorgenommen werden. In einigen Formularen können die Parameterwerte für z.B. Konvergenzkriterien und Iterationsschranken im Regelfall unverändert bleiben.

Solange keine Probleme bei der Berechnung auftreten, sind außer in den Formularen "Berechnung Intrapartikeldiffusion" und "Datenausgabe" keine Änderungen zu machen.

3.2.14.1. Transportmodell

Hier können Einstellungen für das sogenannte "Parcel-Tracking"-Verfahren gemacht werden, mit dem SMART den retardierten advektiven Transport berechnet.

Parameter	Parameterwerte
Transportmodell	
Konzentrationsgleichgewicht nach Newton	
Iterative Berechnung Prozessschritte	
Berechnung Intrapartikeldiffusion	
Berechnung Intrapartikeldiffusion (analytisch)	
Numerische Berechnung IP-Diffusion	
Berechnung Bioabbau	
Weitere Parameter	

max. Anzahl: Pakete in der Saeule (mxv)	4000.0
max. Anzahl: Partitionen innerhalb eines Pakets (mxip)	30.0
max. Anzahl: Partitionen innerhalb einer Modellzelle (mxpic)	1300.0
max. Anzahl: Teilzeitschritte (mxitsub)	500.0
Chipdistanz fuer Verschiebung der Pakete (xeps)	1.0E-12

Abbildung 3.25. Formular "Sonstige Modellparameter: Transportmodell"

3.2.14.2. Konzentrationsgleichgewicht nach Newton-Raphson

Hier können Einstellungen für die Nullstellensuche bei der Berechnung der Stoffverteilung in den verschiedenen Phasen mit dem Newton-Raphsonverfahren gemacht werden.

Parameter	Parameterwerte
Transportmodell	
Konzentrationsgleichgewicht nach Newton-Raphson	
Iterative Berechnung Prozessschritte	
Berechnung Intrapartikeldiffusion	
Berechnung Intrapartikeldiffusion (analytisch)	
Numerische Berechnung IP-Diffusion	
Berechnung Bioabbau	
Weitere Parameter	

max. Anzahl: Iterationen (mxiter)	5000.0
Genauigkeit (acc_val)	1.0E-10

Abbildung 3.26. Formular "Sonstige Modellparameter: Konzentrationsgleichgewicht nach Newton-Raphson"

3.2.14.3. Iterative Berechnung Prozessschritte

Hier können Einstellungen für die Berechnung der Prozessschritte und einer ggf. erforderlichen Iteration zwischen den Gleichgewichtsprozessgruppen und der Intrapartikeldiffusion gemacht werden.

Parameter	Parameterwerte
Transportmodell	
Konzentrationsgleichgewicht nach Newton-Raphson	
Iterative Berechnung Prozessschritte	
Berechnung Intrapartikeldiffusion	
Berechnung Intrapartikeldiffusion (analytisch)	
Numerische Berechnung IP-Diffusion	
Berechnung Bioabbau	
Weitere Parameter	

Relaxationsfaktor der Konzentrationänderung (relax)	0.4
max Anzahl Iterationen: Gleichgewichtsprozessen / IP-Diffusion (mxitbc)	30.0

Abbildung 3.27. Formular "Sonstige Modellparameter: Iterative Berechnung Prozessschritte"

3.2.14.4. Berechnung Intrapartikeldiffusion

Hier kann bestimmt werden, ob (und wenn ja: wie) die Sorptionskinetik durch die Berechnung der Diffusion der gelösten Schadstoffe in die Intrapartikelporen der Boden- bzw. Gesteinspartikel berücksichtigt werden soll.

Eine analytische Berechnung ist aber nur bei geringen Zeitschrittzahlen (<100) zu empfehlen.

Die Eingaben werden ggf. durch die Angabe des Parameters f_{eq} (Anteil der Gleichgewichtsfraction bei der Berechnung der Sorption) im Formular Sorption (Abschnitt [Abschnitt 3.2.13, „Sorption“](#) [15]) überschrieben. Ist $f_{eq} = 1$ (= 100%), dann wird die Intrapartikeldiffusion nicht berechnet.

Die Berechnung des scheinbaren Diffusionskoeffizienten zur Berücksichtigung des Einflusses der Sorption innerhalb der Intrapartikelporen kann entweder über die Werte für die Parameter f_{oc} und k_{oc} in den Katalogdateien berechnet werden oder über den Verteilungskoeffizienten aus der Sorptionsisotherme.

Abbildung 3.28. Formular “Sonstige Modellparameter: Berechnung Intrapartikeldiffusion”

3.2.14.5. Analytische Berechnung der Intrapartikeldiffusion

Hier können Einstellungen der analytischen Berechnung der Intrapartikeldiffusion vorgenommen werden.

Abbildung 3.29. Formular “Sonstige Modellparameter: Analytische Berechnung der Intrapartikeldiffusion”

3.2.14.6. Numerische Berechnung IP-Diffusion

Hier können Einstellungen der numerischen Berechnung der Intrapartikeldiffusion vorgenommen werden.

Abbildung 3.30. Formular “Sonstige Modellparameter: Numerische Berechnung IP-Diffusion”

3.2.14.7. Berechnung Bioabbau

Hier können Einstellungen der numerischen Berechnung des Bioabbaus, insbesondere des angewendeten Bisektionsverfahrens zur Nullstellenbestimmung vorgenommen werden.

Abbildung 3.31. Formular “Sonstige Modellparameter: Berechnung Bioabbau”

3.2.14.8. Datenausgabe

Hier kann festgelegt werden, (i) welche Kontrollausgaben in der Log-Datei *.log protokolliert werden sollen, (ii) welche Ergebnisdaten in den Hauptausgabedateien (*.dat) gewünscht sind und (iii) in welchem Format die Werte der Konzentrationsverlaufsdaten und Konzentrationsprofilaten in die entsprechenden Dateien geschrieben werden sollen.

Abbildung 3.32. Datenausgabe”

3.2.14.9. Weitere Parameter

Hier können die Einstellungen einiger weiterer Parameter vorgenommen werden. Nicht verändert werden sollten die ersten zwei Parameterwerte. Der Parameterwert *Genauigkeit der PDF* legt den Mindestwert des Integrals der Verweilzeitenverteilung

fest. Eine exakte Berechnung würde einen Wert von 1.0 ergeben. Der Standardwert von 0.995 bedeutet, dass ein Fehler von 0.5% zugelassen wird.

Parameter	Parameterwerte
Transportmodell	
Konzentrationsgleichgewicht nach Newton	
Iterative Berechnung Prozessschritte	
Berechnung Intrapartikeldiffusion	
Berechnung Intrapartikeldiffusion (analytisch)	
Numerische Berechnung IP-Diffusion	
Berechnung Bioabbau	
Weitere Parameter	

Gleichheitskriterium für Konzentrationswerte (conc_eps)	1.0E-10
Maximale Anzahl an Isothermenparameter (mxp)	2.0
Genauigkeit der PDF	0.995

Abbildung 3.33. Formular "Sonstige Modellparameter: Weitere Parameter"

3.2.15. Spezifikation der Ausgabe

Die Simulationsergebnisse werden als Konzentrationsdurchbruchskurven und Konzentrationsprofile dargestellt. Am Ende bzw. am Ausfluß der Modellsäule wird standardmäßig eine Durchbruchskurve aufgezeichnet. Die Lage (x-Wert) weiterer Kontrollebenen ist vom Anwender festzulegen. Gleiches gilt für die Zeitpunkte zu denen das Konzentrationsprofil entlang der Modellsäule aufgezeichnet werden soll.

Zu beachten ist, dass im SMART-Modus Konzentrationswerte nur an den Schichtgrenzen berechnet werden können. Die Kontrollebenen werden dementsprechend automatisch festgelegt. Datenpunkte für die Konzentrationsprofile können ebenfalls nur an den Schichtgrenzen berechnet werden.

Kontrollebenen für Durchbruchskurven	
Kontrollebene Nr.	Wert (m)
1	0.3
2	1.0

Kontrollzeitpunkte für Konzentrationsprofile	
Kontrollzeitpunkt Nr.	Wert (s)
1	5.0E7

Gesamtlänge der Zeitintervalle: 189215000 s

Abbildung 3.34. Formular "Spezifikation der Ausgabe"

3.3. Ergebnisvisualisierung und -ausgabe

3.3.1. Durchbruchskurven

Entsprechend den Eingaben im Bereich *Spezifikation der Ausgabe* werden Durchbruchskurven erstellt, die im Grafikbereich angezeigt werden (Abbildung 3.35, „Ergebnisdarstellung: Durchbruchskurven“ [21]).

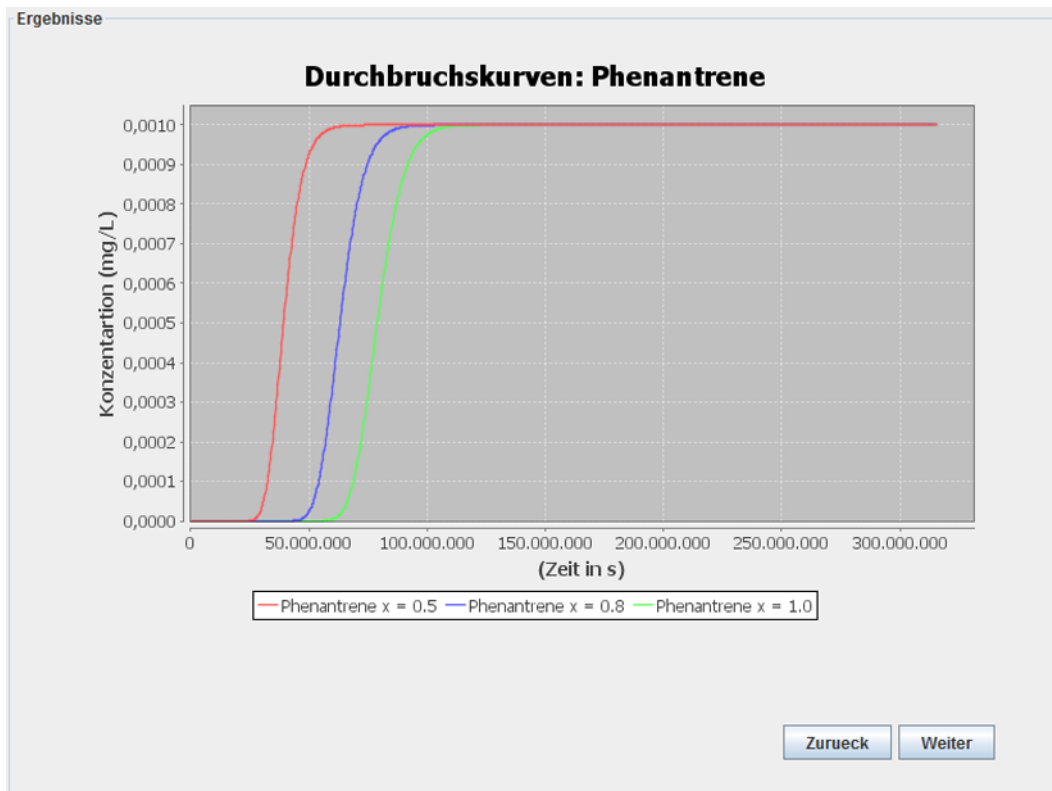


Abbildung 3.35. Ergebnisdarstellung: Durchbruchskurven

3.3.2. Konzentrationsprofile

Entsprechend den Eingaben im Bereich *Spezifikation der Ausgabe* werden Konzentrationsprofile erstellt, die im Grafikbereich angezeigt werden ([Abbildung 3.36, „Ergebnisdarstellung: Konzentrationsprofile“ \[22\]](#)).

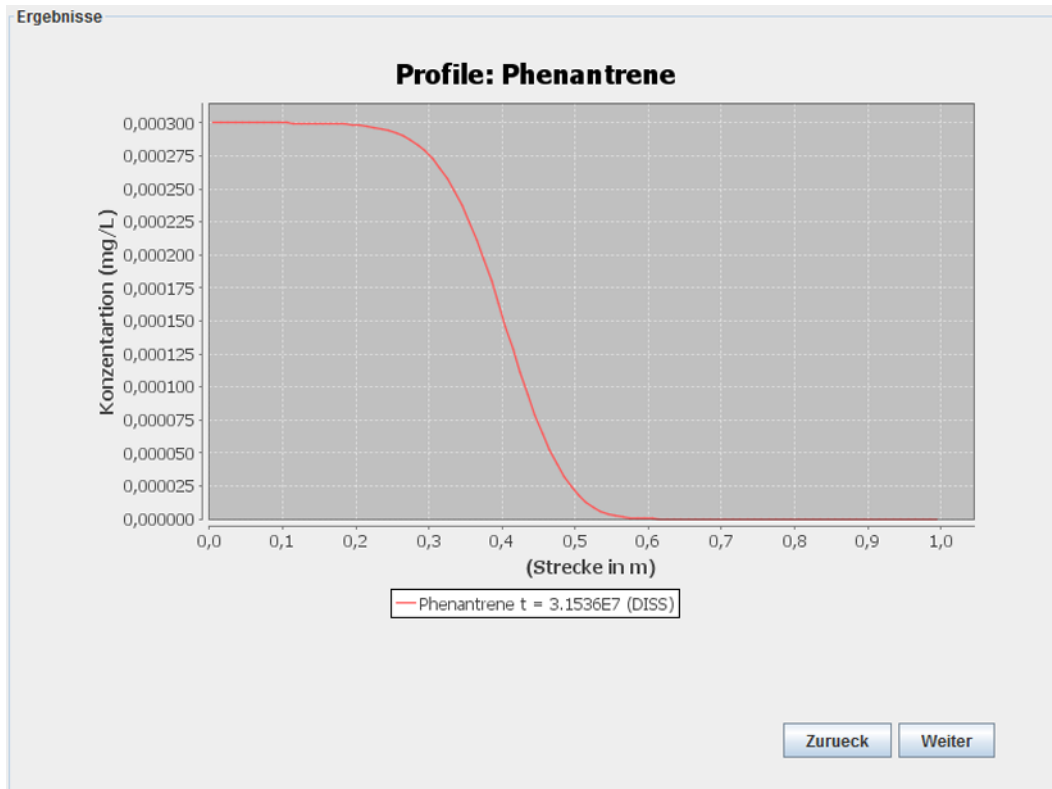


Abbildung 3.36. Ergebnisdarstellung: Konzentrationsprofil

3.3.3. Weitere Ergebnisse

Für jede Simulation werden in SMART Massenbilanzen erstellt. Diese geben Aufschluss über Massen-Inputs- und –Outputs in den bzw. aus dem Modellraum und über die Verteilung der Stoffmasse innerhalb der betrachteten Phasen. Gleichzeitig weisen die Bilanzen auch Bilanzfehler aus, also die numerische Genauigkeit der Simulation. Die Bilanzen (und weitere Textausgaben) können ebenfalls im Grafikbereich von WinSMART angezeigt werden ([Abbildung 3.37, „Ergebnisdarstellung: Bilanzierung“ \[23\]](#)). Durch einen Mausklick auf die Schaltfläche Auswahl kann die gewünschte Datei gewählt werden. Eine Erläuterung der zur Auswahl stehenden Dateien gibt ([Tabelle 3.3, „Übersicht der Ergebnisdateien“ \[23\]](#)).

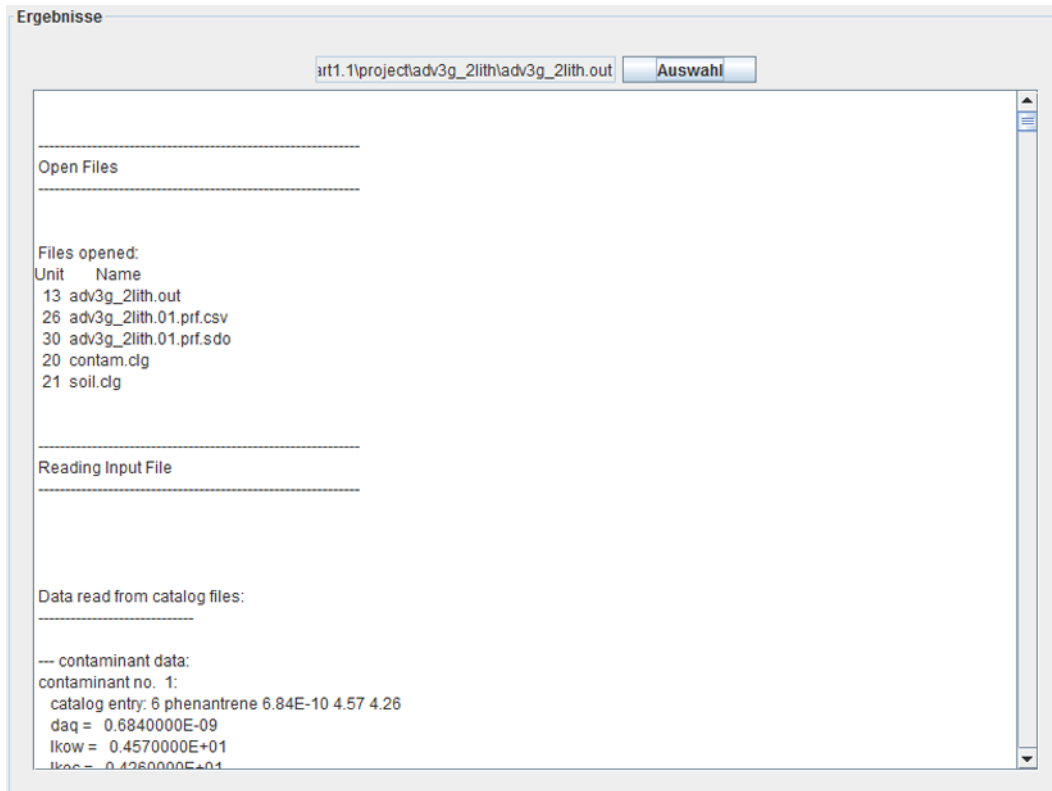


Abbildung 3.37. Ergebnisdarstellung: Bilanzierung

Tabelle 3.3. Übersicht der Ergebnisdateien

Bezeichnung	Dateiinhalt
<bezeichnung>.dat	Hauptausgabedatei. Modelldaten und Konzentrationswerte aller Komponenten für alle Modellzellen und Zeitschritte.
<bezeichnung>.ba1	Allgemeine Massenbilanz der Modellrechnung. Falls im SMART-Modus mehrere Schichten berechnet werden, wird für jede Berechnung/Schicht eine Bilanz erstellt. Die Dateien sind dann fortlaufend nummeriert (<bezeichnung>.<num>.ba1).
<bezeichnung>.ba2	Spezifische Massenbilanz der Modellrechnung. Falls im SMART-Modus mehrere Schichten berechnet werden, wird für jede Berechnung/Schicht eine Bilanz erstellt. Die Dateien sind dann fortlaufend nummeriert (<bezeichnung>.<num>.ba2).
<bezeichnung>.out	Protokoll-Datei über das Einlesen von Daten, deren Verarbeitung zur Vorbereitung der Simulation und über den Fortschritt der Berechnung.

3.4. Dateioorganisation

Im Folgenden genannte Verzeichnisse beziehen sich auf das Installationsverzeichnis von *WinSMART*.

3.4.1. Szenariodatei

Eingaben in der Benutzeroberfläche von *WinSMART* können gespeichert, und zu einem späteren Zeitpunkt/Programmstart wieder geladen werden. Beim Speichervorgang wird eine so genannte Szenariodatei erzeugt, die alle Benutzereingaben beinhaltet.

Die Menüpunkte "Datei" > "Speichern" bzw. "Datei" > "Speichern unter" (über-)schreiben die aktuelle Szenariodatei mit den Werten aus der Benutzeroberfläche. Wurde noch keine Szenariodatei erzeugt, öffnet sich ein entsprechender Dialog zu Angabe des Namens und Speicherortes. Das Standardverzeichnis für Szenariodateien ist der Unterordner *examples* des Installationsverzeichnisses. Mit dem Dialog "Datei" > "Neu" lässt sich vorab eine neue, leere Szenariodatei generieren

3.4.2. Katalogdateien

Informationen zu Schadstoffen und Lithokomponenten werden in *WinSMART* aus Katalogdateien gelesen, die sich Ordner *files* befinden. Gegenüber einem rein programminternen oder datenbankbasierten Ansatz bietet dieser Dateizugriff die Möglichkeit einer einfachen, textbasierten Datenmanipulation außerhalb des Programms. Zusätzlich sind Änderungen an den Katalogdateien aber auch innerhalb von *WinSMART* möglich.

Hierbei ist zu beachten, dass *WinSMART* direkt auf den Dateien operiert (also nicht mit Kopien dieser Dateien arbeitet). Dies hat zur Folge, dass sich Änderungen an Katalogdaten szenarioübergreifend auswirken.

3.4.3. Weitere externe Dateien

Werden in einem Szenario weitere externe Dateien benötigt, ist es ratsam, diese unterhalb des *WinSMART*-Installationsverzeichnisses abzulegen. Standardmäßig schlägt *WinSMART* bei der Einbindung weiterer Dateien den Ordner *data* vor.

(Der Vorteil hierbei liegt darin, dass bei einem Umzug der *Win WinSMART*-Installation relative Pfade zu externen Dateien gültig bleiben.) Liegt eine Datei an angegebenem Pfad nicht vor, überprüft *WinSMART*, ob die Datei im Ordner *data* liegt. Ist dies nicht der Fall, so wird eine Fehlermeldung ausgegeben.

3.4.4. Projektordner/Ergebnisse

Führt man nach Bestimmung der Eingabeparameter eine Berechnung durch (Menüpunkt "Datei" > "Berechnung starten"), so werden alle für FORTRAN benötigten Dateien in einem Unterordner des Projektordners *project* gesammelt. Der Name des Unterordners entspricht dem Namen der Szenariodatei. Falls dieser bereits existiert, so werden die Inhalte (nach Bestätigung des Benutzers) überschrieben. Die Inhalte setzen sich zusammen aus der Haupteingabedatei *smart.inp*, die alle für FORTRAN aufbereiteten Eingaben aus der Benutzeroberfläche beinhaltet, Kopien der Katalogdateien und, soweit erforderlich, weiteren externen Dateien.

Zudem werden hier die von FORTRAN produzierten Ergebnisse abgelegt und für die anschließende Ergebnisdarstellung in *WinSMART* ausgelesen.

4

Literatur

Bold, S. (2004): Process-based prediction of the long-term risk of groundwater pollution by organic non-volatile contaminants. - Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten, TGA , C72, 96 pp.

Finkel, M. (1999): Quantitative Beschreibung des Transports von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) und Tensiden in porösen Medien. - Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten, TGA , C47, 98 pp.

Jäger, R. (1996): Modellierung nichtlinearer Intra-Partikel-Diffusion in heterogenem Aquifermaterial. – Diplomarbeit, Geologisches Institut der Universität Tübingen.

Ogata, A., Banks, R.G. (1961): A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. – Prof. paper 411-A, U.S. Geol. Survey, Washington D.C.

Anhang A. Berechnung im SMART-Modus

Das Prinzip der entkoppelten Berechnung von konservativem Transport und (dem Einfluß der) physiko-chemischen Reaktionen veranschaulichen [Abbildung A.1](#), „SMART-Prinzip: Beschreibung des konservativen Transports als Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit“ [26], [Abbildung A.2](#), „SMART-Prinzip: Beschreibung des Einflusses der Reaktionen durch die Simulation des advektiv-reaktiven Transports über die Verweilzeit τ “ [27] und [Abbildung A.3](#), „SMART-Prinzip: Berechnung des Konzentrationsdurchbruchs durch Kopplung von konservativem Transport und Reaktionen“ [28].

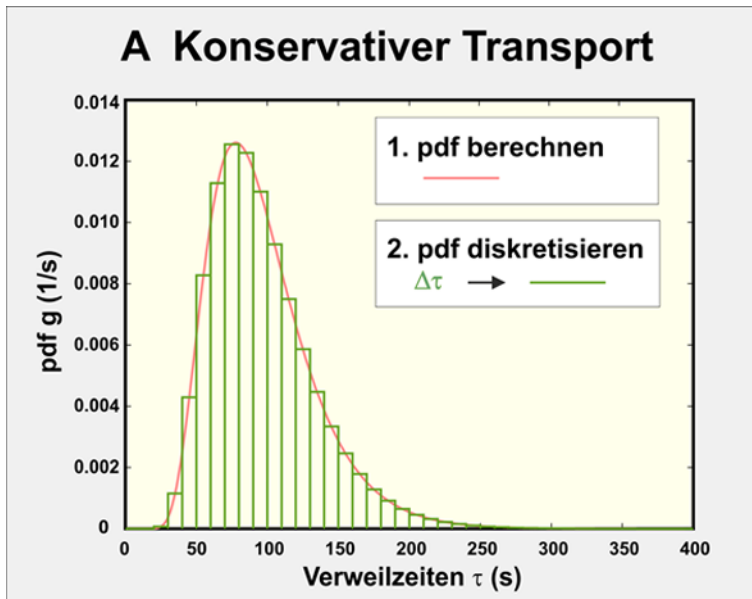
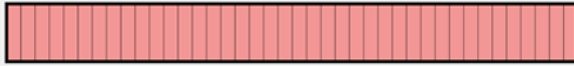


Abbildung A.1. SMART-Prinzip: Beschreibung des konservativen Transports als Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit

B 1D-Modell: Advektion + Reaktion



$\tau \longrightarrow$

3. Simulation über τ , Berechnung von $\Gamma(\tau, t)$

$$\Gamma(\tau, t) = c(\tau, t)$$

— Konzentrationsprofile $\Gamma(\tau)$
für alle Zeitschritte t_i

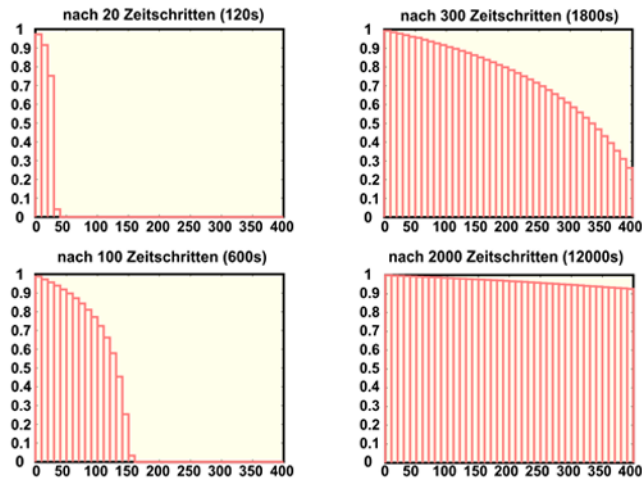


Abbildung A.2. SMART-Prinzip: Beschreibung des Einflusses der Reaktionen durch die Simulation des advektiv-reaktiven Transports über die Verweilzeit τ

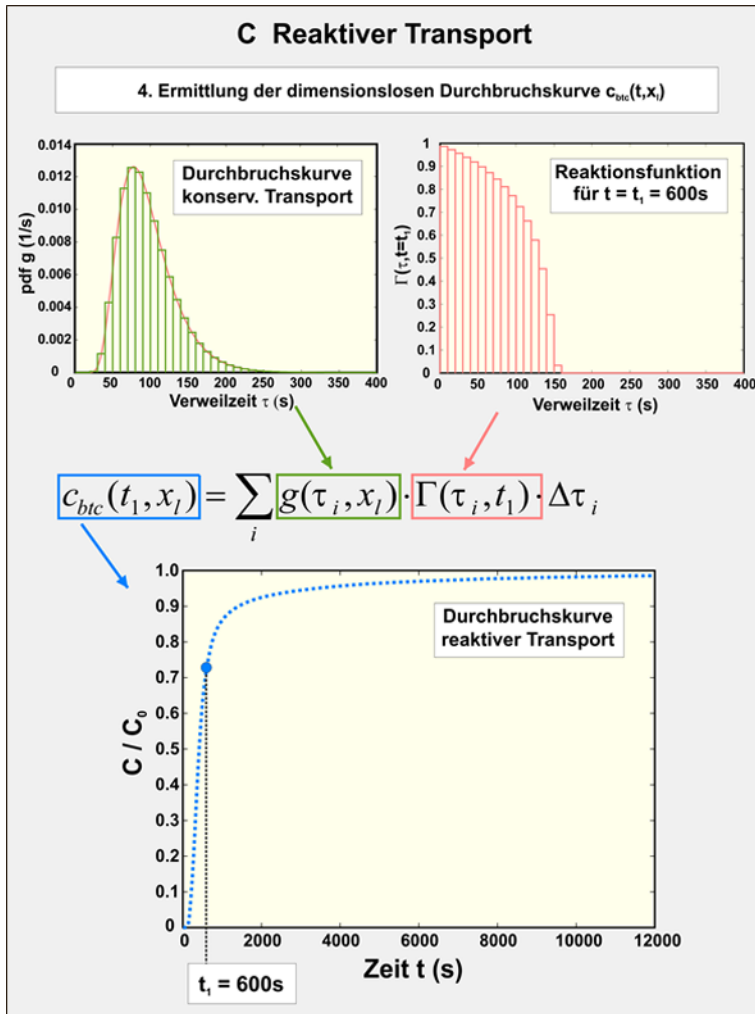


Abbildung A.3. SMART-Prinzip: Berechnung des Konzentrationsdurchbruchs durch Kopplung von konservativem Transport und Reaktionen

Anhang B. Externe Bestimmung der Verweilzeitenverteilung

Die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit kann auch extern, beispielsweise durch Experimente oder mit Hilfe eines mathematischen Modells (z.B. Hydrus 1D oder andere). Das Ergebnis wird von SMART gelesen und zur Berechnung des dispersiv-reaktiven Transports verwendet (siehe Näheres hierzu in [Anhang A, Berechnung im SMART-Modus \[26\]](#)).

Das erwartete Format der Dateiformat illustriert das Beispiel in [Abbildung B.1, „Beispiel einer Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit“ \[29\]](#). In einer ersten Zeile ist die Anzahl der folgenden Einträge anzugeben, in den folgenden Zeilen werden Verweilzeit-Häufigkeitsdichte-Wertepaare (τ, h) erwartet. τ gibt dabei jeweils den oberen Wert des Verweilzeitintervalls an, h die Häufigkeitsdichte. Das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung über τ d.h. sollte möglichst nahe an 1 sein: $\sum (\Delta \tau * h) \approx 1$.

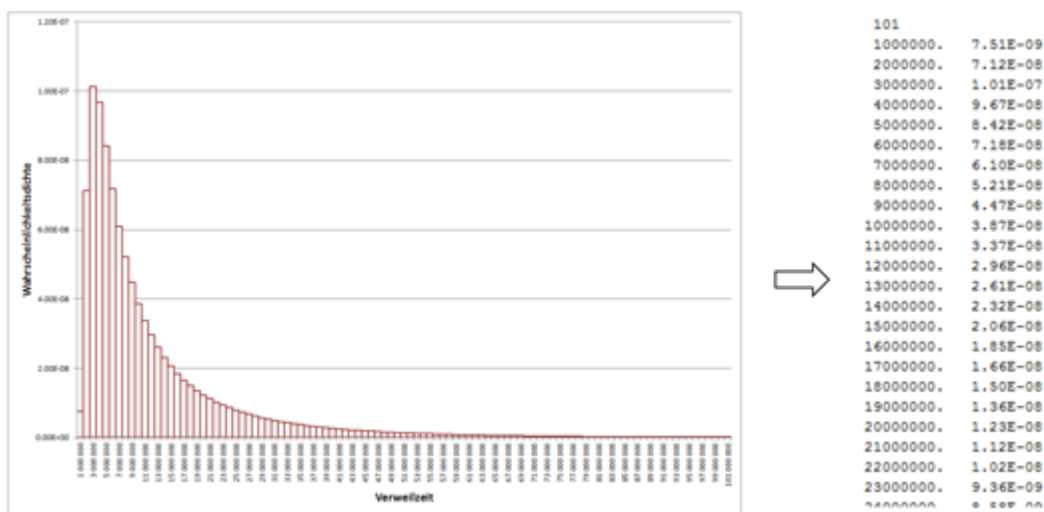


Abbildung B.1. Beispiel einer Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit