

# Simulationsprogramm SMART

Version 2012.04

## Benutzerhandbuch

Stand: 29.06.2012



# VORWORT

Dieses Handbuch soll den Umgang mit dem Simulationsprogramm SMART erleichtern.

Behandelt werden im Wesentlichen nur anwendungsbezogene Dinge, insbesondere das Format der involvierten Dateien und die Vorgehensweise bei der Programmanwendung an sich.

Die Überarbeitung der bislang aktuellen Handbuchfassung bezieht sich vor allem auf Änderungen im Zusammenhang mit der Entwicklung der neuen Benutzeroberfläche WinSMART, welche die Nutzung von SMART wesentlich erleichtert und für den „normalen“ Anwender die Auseinandersetzung mit Fragen zu Dateiformaten und -inhalten erübrigt.

SMART kann jedoch selbstverständlich nach wie vor auch ohne Benutzeroberfläche angewendet werden. Dies kann z.B. dann sinnvoll sein, wenn Simulationen wiederholt durchgeführt werden sollen, etwa mit systematisch veränderten Simulationsparametern oder im Rahmen von Optimierungsaufgaben.

Fragen, die den methodischen Hintergrund von SMART betreffen, können durch einen Blick in die hierzu vorliegenden Publikationen (Finkel et al., 1998; Finkel, 1999; Finkel et al., 1999; Bold, 2004, Jäger, 1996) beantwortet werden.

Sollten für bestimmte Modellszenarien oder Anwendungsfälle Unklarheiten oder gar Fehler auftreten bitte ich um entsprechende Rückmeldungen. Zur Lösung etwaiger Probleme biete ich gerne meine Hilfe und Unterstützung an.

Tübingen, im Juni 2012

**Kontaktadresse:**  
Dr. Michael Finkel  
Eberhard Karls Universität Tübingen  
Zentrum für Angewandte  
Geowissenschaften  
Hölderlinstr. 12  
D-72074 Tübingen  
Fon: 07071 29-73177  
Fax: 07071 29-5059  
Email: michael.finkel@uni-tuebingen.de



# 1 Änderungen und Neuerungen

Im Zuge der Entwicklung der Benutzeroberfläche wurde SMART zum Teil grundlegend erweitert und überarbeitet. Die wesentlichsten Erweiterungen/Änderungen sind:

1. SMART kann nun im sogenannten SMART-Modus auch für mehrschichtige Probleme angewandt werden (*sim\_mode* = 5, siehe auch Punkt 6).

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.

Die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeiten ist dabei für jede Modellschicht separat zu bestimmen. Für jede Schicht kann wahlweise auf extern berechnete Verweilzeitendaten zurückgegriffen werden oder eine Verweilzeitenverteilung berechnet werden.

2. Für die Berechnung der Verweilzeitenverteilung kann nun ein analytisches Modell nach Ogata und Banks (1961) verwendet werden (neue Option „0“ im Eingabebereich „\_\_PDF\_DATA“).
3. Für die separate bzw. entkoppelte Berücksichtigung von konservativem Transport und dem Einfluss der physikalisch-chemisch-biologischen Reaktionen im SMART-Modus ist die explizite Definition einer zeitlichen Diskretisierung des Modells und die Sicherstellung von konsistenten Verweilzeitendaten nicht mehr erforderlich.

Im „neuen SMART-Modus“ (*sim\_mode* = 5, siehe auch Punkt 6) wird das Modell wie bei der konventionellen Berechnung des advektiv-reaktiven Transports räumlich diskretisiert. Die Übersetzung der Modellparameter in ein zeitlich (über die Verweilzeit) diskretisiertes Modell wird vom Programm automatisch übernommen. Lediglich die Anzahl der gewünschten „Zeitzellen“ ist vom Anwender im neuen Eingabebereich „\_\_TRAVEL\_TIME\_CELLS“ anzugeben.

Mit dieser Änderung wird der Wechsel vom SMART-Modus in den „normalen“ Modus und umgekehrt mit nur geringfügigen Änderungen in der Haupteingabedatei ermöglicht.

4. Die Verwaltung und Bezeichnung der Ein- und Ausgabedateien wurde neu gestaltet. Für eine Simulation sind – wenn nicht explizit die Verwendung externer Daten erwünscht ist – neben der Haupteingabedatei nur noch die Katalog-Dateien erforderlich. Die Bezeichnung der Ausgabedateien erfolgt automatisch auf der Grundlage eines „Master“-Dateinamen.

Die Einbindung weiterer Eingabedateien (→ externe Daten) wurde vereinfacht (Bereich „\_\_FURTHER\_INPUT\_FILES“).

5. Es können Kontrollebenen und Kontrollzeitpunkte für die Berechnung von Konzentrationsdurchbruchskurven und Konzentrationsprofilen definiert werden. Die Definition erfolgt mittels Längen- und Zeitwerten. Die Ausgabewerte werden automatisch durch Interpolation zwischen den geeigneten Stützstellen (Modellzellenwerte oder Zeitschrittwerte) berechnet, sind also von der gewählten zeitlichen und räumlichen Modelldiskretisierung unabhängig.

Die Durchbruchskurven können wahlweise im CSV-Format oder in einem zur Weiterverarbeitung mit TECPLOT geeigneten Format ausgegeben werden.

6. Die Umsetzung oben genannter Änderungen bedingte die Einführung
  - a. eines neuen Simulationsmodus (*sim\_mode* = 5) für die Nutzung von SMART über die Benutzeroberfläche WinSMART; der jedoch auch für die alleinige Verwendung von SMART verwendet werden kann.
  - b. weiterer neuer Eingabebereiche: „\_\_VERSION“, „\_\_LAYER\_GEOMETRY“, „\_\_MASTER\_FILENAME“, „\_\_DATA\_BASE\_FILES“, „\_\_OUTPUT\_DEFINITIONS“ und „\_\_FORMAT\_OF\_OUTPUT“.
  - c. eine neue Systematik der zu generierenden Ausgabedateien, die für alle Modellszenarien (Einschicht- und Mehrschichtmodelle, Berechnung im SMART-Modus oder konventionell) anwendbar ist.

## 2 Struktur und Format der SMART-Eingabe-datei

### 2.1 Einige Bemerkungen vorab

#### Eingabeblocke

Die Eingabedatei ist in verschiedene Sektionen (Blöcke) gegliedert welche durch selbsterklärende Schlüsselwörter ('keywords'), beginnend mit „\_\_“ (doppelter Unterstrich) gekennzeichnet sind. Die Schlüsselwörter müssen exakt eingehalten werden. Andernfalls wird die Datei nicht korrekt eingelesen und das Programm bricht vorzeitig ab.

#### Eingabe von Feldern

Bei der Eingabe von Parameterfeldern wird die gleiche Schreibweise verwendet wie im Programm MODFLOW (mit dem Unterschied, dass alle Felder formatfrei eingelesen werden), d.h. dem eigentlichen Datenblock steht eine Zeile voran, ein sogenannter 'control record' bestehend aus zwei Parametern : *locat* und *cnstnt*

- falls *locat*  $\leq$  0 werden alle Feldvariablen einer Konstanten (*cnstnt*) gleichgesetzt
- falls *locat*  $>$  0 wird das Feld aus der Datei mit der Unit *locat* gelesen (Datei-Unit und –Name sind im Block \_\_FURTHER\_INPUT\_FILES anzugeben; siehe Details weiter unten)
- wenn *cnstnt*  $\neq$  0, dann werden alle Werte mit *cnstnt* multipliziert.

#### Kommentare

In die Haupteingabedatei können jeweils zwischen dem Ende einer Daten-Sektion und dem Beginn der nächsten Sektion Kommentare eingefügt werden, ohne dass die Lesbarkeit der Datei beeinflusst wird. Auch werden alle nach einem Ausrufezeichen stehenden Zeichen einer Zeile als Kommentare aufgefasst.

### 2.2 Erläuterungen zu den Eingabeblocken

#### \_\_VERSION

Optionaler Eingabeblock zur Kennzeichnung des neuen Dateiformats. Dazu ist hier eine Zahl  $\geq$  201204 anzugeben. Ist die Zahl  $<$  201204 oder fehlt der Eingabeblock, so wird die Datei als „von SMART-Versionen ab 2012 nicht lesbar“ eingestuft.

**\_\_INTERNAL**

Optionaler Eingabeblock zur Anweisung zusätzlich Programmausgaben. Sollte nur bei Problemen eingesetzt werden. Durch Angabe eines oder zweier weiterer Schlüsselworte (CHECKPARCELS und/oder CHECKRETARDATION) können Informationen zur Verteilung und Größe der Pakete (→ Berechnung retardiert-advektiver Transport) und zur Berechnung der Retardationsfaktoren

**\_\_TITEL**

In diesem ersten Block der Eingabedatei können der Titel und verschiedene Bemerkungen in bis zu 10 Zeilen angegeben werden. In der ersten Zeile der Sektion wird die Anzahl der nachfolgenden Titel- oder Kommentarzeilen angegeben.

**\_\_SIMULATION\_MODE**

Unter diesem Schlüsselwort folgt

- in der 1. Zeile die Angabe des Simulationsmodus (siehe folgende Tabelle)

**Tabelle 1:** Mögliche Simulations-Modi (Parameter `sim_mode`)

| Parameter<br><code>sim_mode</code> | Art der Simulation   |
|------------------------------------|--|
| 0                                  | Nur Advektion  |
| 1                                  | Advektion und Reaktion   |
| 3                                  | Berechnung mittlerer Durchbruchskurven reaktiver Tracer (Verwendung von pdf-Daten eines konservativen Tracers)   |
| 5                                  | Input von WinSMART: Berechnung mittlerer Durchbruchskurven reaktiver Tracer (Verwendung von pdf-Daten eines konservativen Tracers), auch für mehrere Schichten (→ sequentielle Berechnung) |

- in der 2. Zeile die Angabe des Anzahl der Modellschichten (= 1 falls `sim_mode` = 0, 1, 3).
- in der 3. Zeile die Angabe des „Sättigungs-Modus“ (= 1 falls gesättigte Verhältnisse, = 2 falls ungesättigte Verhältnisse)

**\_\_TRAVEL\_TIME\_CELLS**

Eingabeblock nur erforderlich falls `sim_mode` = 5.

In diesem Fall erfolgt hier die Angabe der Anzahl der Modellzellen für die zeitliche Diskretisierung des Modells, getrennt für jede in WinSMART definierte (Neben-)Schicht des Modells. Die Anzahl ist nur bindend, wenn für die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit mit einem analytischen Modell berechnet



wird (siehe Eingabeblock `__PDF_DATA`). Falls die Verweilzeitenverteilungsdaten von einer Datei eingelesen wird, wird die hier gemachte Angabe durch die Anzahl der Werte in der Datei überschrieben.

## **`__DIMENSIONS`**

Hier wird in insgesamt 7 Zeilen die Dimensionierung des Modellraums und der Ausgabe vorgenommen:

- Anzahl der Modellzellen
- Anzahl der Zeitschritte
- Anzahl der Lithokomponenten
- Anzahl der Korngrößenklassen
- Anzahl der Schadstoffe
- Anzahl der Tenside
- Anzahl der Durchbruchkurven (Ausgabe)
- Anzahl der Profile (Ausgabe)

## **`__LAYER_GEOMETRY`**

Eingabeblock nur erforderlich falls `sim_mode = 5`.

In einer ersten Zeile ist die Anzahl der Hauptschichten des Modells anzugeben.

Für jede Hauptschicht wird dann ein zweizeiliger Block (beginnend mit dem Block der „obersten“ Hauptschicht) gelesen: 1. Zeile - Anzahl der Nebenschichten, 2. Zeile – Anzahl der Modellzellen für die räumliche Diskretisierung des Modells).

## **`__MASTER_FILENAME`**

Hier ist in einer Zeile die Bezeichnung des Modells bzw. des zu modellierenden Szenarios anzugeben. Dabei ist auf die Verwendung von Leerzeichen und Sonderzeichen (außer „Unterstrich“) unbedingt zu verzichten. Die Bezeichnung wird für die Benennung aller Ausgabedateien verwendet.

## **`__DATA_BASE_FILES`**

Hier sind die Dateinamen der sogenannten Katalogdateien anzugeben und zwar in folgender Reihenfolge:

1. Zeile: Datei mit Schadstoffeigenschaften (z.B. *contam.clg*)
2. Zeile: Datei mit Lithokomponenteneigenschaften (z.B. *soil.clg*)
3. Zeile (optional, falls Anzahl der Tenside >0): Datei mit Eigenschaften der Tenside (z.B. *surfact.clg*)

## \_\_SIMULATION\_PARAMETER

Hier werden verschiedene Parameter für die Steuerung und den Ablauf der Berechnung definiert (siehe folgende Tabelle).

**Tabelle 2:** Berechnungsparameter

| Parameterbeschreibung   | Bezeichnung in SMART | Standardwert |
|---|----------------------|--------------|
| Maximale Anzahl an Paketen in der Säule   | mxv                  | 4000         |
| Maximale Anzahl an Paketen in der Säule   | mxv                  | 4000         |
| Maximale Anzahl an Partitionen innerhalb eines Pakets   | mxip                 | 30           |
| Maximale Anzahl an Partitionen innerhalb einer Modellzelle  | mxpic                | 1300         |
| Maximale Anzahl an Teilzeitschritten  | mxitsub              | 500          |
| Clipdistanz für Verschiebung der Pakete bzw. Rundungskriterium bei der Berechnung der Advektion: Würde durch das Verschieben der 'parcel' die Definition einer neuen Partition notwendig deren Ausdehnung kleiner als <i>xeps</i> ist, dann wird diese vernachlässigt. Diese Maßnahme verhindert ein allzu großes Anwachsen der Partitionenanzahl.  | xeps                 | 1.d-12       |
| Maximale Anzahl an Iterationen bei der Berechnung der Funktion F (siehe Finkel, 1999; Gl. 5.4)  | mxiter               | 5000         |
| Abbruchkriterium für die Berechnung der Funktion F  | acc_val              | 1.d-10       |
| Relaxationsfaktor der Konzentrationsänderung für die Iteration zwischen der Berechnung der Gleichgewichtsprozesse und der IP-Diffusion. Aus Gl. (5.6) in Finkel (1999) wird dann $c_w(i);neu = c_w(i) - relax * \{Delta M_{c,diff}(i)\} / \{V_w\}$ . Gleichzeitig werden die zuvor berechneten Konzentrationen $c_{diff}(k,j,i)$ neu berechnet: $c_{diff}(k,j,i)^* = c_{diff}(k,j,i)^{old} + relax * (c_{diff}(k,j,i) - c_{diff}(k,j,i)^{old})$ | relax                | 0.4          |
| Maximale Anzahl an Iterationen zwischen der Berechnung der Gleichgewichtsprozesse und der IP-Diffusion  | mxitbc               | 30           |
| Maximal erlaubte relative Konzentrationsänderung in Lösung (infolge Intrapartikeldiffusion) je Zeitschritt bei welcher noch auf eine Iteration zwischen Prozessgruppe B und C verzichtet wird.  | mxdel_diff           | 1.d-02       |
| Maximale Anzahl der Reihenglieder   | mxdefit              | 2000         |
| Anzahl der berücksichtigten Reihenglieder   | n_inf                | 100          |
| Schwellenwert bis zu dem Konzentrationsänderungen vernachlässigt werden   | mxneg_diff           | 1.d-10       |
| Mindestkonzentration für Berücksichtigung des IP-Diffusionsschritts   | min_diss, min_diff   | 1.d-20       |
| Anzahl der Stützstellen innerhalb eines Korns (numerische Berechnung der Intrapartikeldiffusion)  | nr                   | 20           |
| Maximale Anzahl an Iterationen  | itmax                | 20           |
| Minimale Zeitschrittweite (numerische Berechnung der Intrapartikeldiffusion)  | dtmin                | 1.0          |
| Maximale Zeitschrittweite (numerische Berechnung der Intrapartikeldiffusion)  | dtmax                | 1.0d6        |
| Randsteigungs-Faktor zur Ermittlung der Zeitschrittlänge  | tfak                 | 2.0          |
| Lambda-Wert (0: vollständig implizite Berechnung 1: vollständig explizite Berechnung)   | lamda                | 0.4          |

|  |             |         |
|--|-------------|---------|
| Konvergenz-Kriterium bei der numerischen Berechnung der Intrapartikeldiffusion   | eps1        | 1.0e-12 |
| Gleichheitskriterium für Realwerte (numerische Berechnung der Intrapartikeldiffusion)  | eps2        | 1.0e-20 |
| Konzentrationsschwellenwert für die Freundlich Isotherme (numerische Berechnung der Intrapartikeldiffusion)                          | cmin        | 1.0e-20 |
| Skalierungsfaktor für die logarithmische Verteilung der Stützstellen (numerische Berechnung der Intrapartikeldiffusion)              | scale       | 5.0     |
| Maximale Anzahl an Iterationen / Bisektionsmethode für Langmuir-Hinshelwood Kinetik  | mxlh        | 400     |
| Konvergenzkriterium der iterativen Lösung / Bisektionsmethode für Langmuir-Hinshelwood Kinetik                                       | acc_lh      | 1.e-20  |
| Gleichheitskriterium für Konzentrationswerte   | conc_eps    | 1.d-10  |
| Maximale Anzahl an Isothermenparameter   | mxp         | 2       |
| Genauigkeitsziel bei der analytischen Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit (Mindestwert des Integrals) | pdfaccuracy | 0.995   |

## \_\_FURTHER\_INPUT\_FILES

Werden externe Daten verwendet und aus vorhandenen Dateien eingelesen, so sind hier die entsprechenden Angaben zu machen:

1. Zeile: Anzahl der Dateien

Falls Anzahl > 0, sind in weiteren Zeilen Datei-Unit und Dateinamen anzugeben. Der Eingabeblock könnte also folgendermaßen aussehen, wenn beispielsweise für zwei Schichten Verweilzeitenverteilungsdaten gelesen werden sollen:

```
2
151 pdf_sandschicht01.txt
152 pdf_untere_zone.txt
```

Für die Datei-Units sollten Zahlen zwischen 100 und 199 verwendet werden.

## \_\_OUTPUT\_CONTROL

In dieser Sektion kann Art und Umfang sowohl der Berechnungsergebnisse (Datei <name>.dat) als auch von Kontrollausgaben (Datei <name>.out) gesteuert werden. Letztere Datei ist vor allem zur Unterstützung bei der (Weiter-)Entwicklung des Programmcode gedacht.

Der Eingabeblock enthält maximal vier Zeilen:

1. Zeile: Modus – eine Zahl, die nach folgendem Prinzip zu berechnen ist:

$$\text{Modus} = \sum_i 2^{i-1} \quad \forall \text{ ausgewählten Informationskategorien } i$$

Die wählbaren Informationskategorien zeigt Tabelle 3.

Falls Modus = 0, folgen keine weiteren Eingabezeilen mehr. Es werden keine zusätzlichen Informationen in die Protokolldatei (\*.out) geschrieben. In die Hauptausgabedatei (\*.dat) wird nur die räumliche und zeitliche Entwicklung der

Schadstoffkonzentrationen in Lösung (C\_DISS) geschrieben. Dies ist der Fall, wenn die Eingabedatei durch WinSMART generiert wird.

Falls Modus > 0 folgen drei weitere Zeilen:

2. Zeile: Angabe eines Zeitschrittbereichs (Anfangszeit-schrittindex und Endezeit-schrittindex) innerhalb dessen die zusätzlichen Kontrollausgaben gewünscht sind.

In Zeile 3 und 4 wird definiert, welche Konzentrationswerte in die Datei <name>.dat geschrieben werden. In Zeile 3 werden die 6 Schadstoffkonzentrationen an- oder abgewählt (Reihenfolge: *c\_diss*, *c\_mic*, *c\_sorb*, *c\_mono*, *c\_diff*, *c\_red*), in Zeile 4 die drei Tensidkonzentrationen (Reihenfolge: *s\_mono*, *s\_mic*, *s\_sorb*).

**Tabelle 3: Informationskategorien für zusätzliche Ausgaben durch SMART**

| Nr. | Information   | Beitrag zum Modus |
|-----|---|-------------------|
| 1   | Advektion   | 1                 |
| 2   | Vorbereitung der Daten  | 2                 |
| 3   | Simulationsschritte, Paket-zu-Zelle-Verteilung der Stoffmasse | 4                 |
| 4   | Verschiebung der Pakete                                       | 8                 |
| 5   | Reaktionen  | 16                |
| 6   | Zelle-zu-Paket-Verteilung der Stoffmassen, Datenausgabe       | 32                |

*Achtung:* Die Kontrollausgaben, die in die Datei <master\_name>.out geschrieben werden, sind weitgehend wenig bis schlecht erläutert, da sie in erster Linie dem Entwickler oder dem erfahrenen Anwender Informationen zum Programmablauf geben sollen.

## \_\_GEOMETRICAL\_DATA

In diesem Abschnitt wird die Querschnittsfläche und die räumliche Diskretisierung des eindimensionalen (Säulen-) Modells definiert.

## \_\_BOUNDARY\_CONDITIONS

Eingabe der Randbedingungen, wobei in einer Zeile die Parameter *ibound* (Definitions-Typ), *head1* (Potentialhöhe am Säuleneinlauf), *head2* (Potentialhöhe am Säulenauslauf) und *qq* (volumetrischer Fluss) angegeben werden. Es gibt 3 Definitionsmöglichkeiten (Tabelle 4).

**Tabelle 4:** Übersicht und Kurzbeschreibung aller an einer Berechnung beteiligten Dateien

| Parameter ibound | Anzugebender Parameter | Berechneter Parameter |
|------------------|------------------------|-----------------------|
| 1                | <i>head1, head2</i>    | <i>qq</i>             |
| 2                | <i>head2, qq</i>       | <i>head1</i>          |
| 3                | <i>head1, qq</i>       | <i>head2</i>          |

**Achtung:** Falls der Simulationsmodus *sim\_mode* = 3 gewählt wurde (Berechnung über die Verweilzeit), d. h. wenn die räumliche Diskretisierung die Einheit einer Zeit hat, darf nicht *ibound* = 1 gewählt werden, da die Berechnung von *qq* in diesem Fall dann nicht möglich ist.

## \_\_HYDRAULIC\_DATA

Hier werden der Kf-Wert und die Porositäten bzw. deren räumliche Verteilung definiert.

## \_\_TIME\_DATA

In diesem Block wird die zeitliche Diskretisierung des Rechenlaufes festgelegt. In einer ersten Zeile ist zunächst anzugeben, in welcher Form die Diskretisierung erfolgt (Parameter *time\_mode*). Für den Fall einer konstanten Zeitschrittweite (*time\_mode* = 1) folgt lediglich eine weitere Zeile mit der entsprechenden Zeitschrittweite. Sollen variable Zeitschrittweiten definiert werden (*time\_mode* = 2), folgen ein oder mehrere Zeilen der Form Start-Zeitschritt - Ende-Zeitschritt - Zeitschrittlänge.

## \_\_PDF\_DATA

Dieser Abschnitt legt fest, wie die Verteilung der Ankunftszeiten eines konservativen Tracers zu berücksichtigen ist (nur falls *sim\_mode* = 3). In einer ersten Zeile wird mit dem Parameter *pdf\_type* angegeben, ob eine pdf analytisch berechnet werden soll (*pdf\_type* = 0), ob eine rein statistische Ermittlung gewünscht ist (*pdf\_type* = 1: Log-Normalverteilung, *pdf\_type* = 2: Normalverteilung) oder ob eine extern berechnete pdf aus einer Datei eingelesen werden soll (*pdf\_type* = 3). Je nach *pdf\_type* sind weitere Werte in den nachfolgenden Zeilen anzugeben (siehe Tabelle 5).

**Tabelle 5:** Mögliche Modi für die Berücksichtigung von Verweilzeiten im SMART-Modus (Parameter *pdf\_type*)

| <i>pdf_type</i> | Verweilzeitenberechnung | Inhalt der 2. Zeile   |
|-----------------|-------------------------|---|
| 0               | Analytisches Modell     | Bei <i>sim_mode</i> = 3: Modellcode (=1), Dispersivität und reale Modelllänge<br>Bei <i>sim_mode</i> = 5: Modellcode (=1) und Dispersivität |

|   |                                  |   |
|---|----------------------------------|---|
| 1 | Log-Normal-Verteilung            | Mittelwert und Varianz  |
| 2 | Normal-Verteilung                | Mittelwert und Varianz  |
| 3 | Einlesen (aus externer Datei)    | Datei-Unit und Formatcode<br>Unit muss mit Dateispezifizierung im Bereich „__FURTHER_INPUT_FILES“ übereinstimmen; bei $\text{sim\_mode} = 5$ Formatcode = 2 zwingend; bei $\text{sim\_mode} = 3$ besteht Auswahl zwischen Formatcode = 1 oder = 2; siehe auch Annex |
| 4 | Einlesen (aus Haupteingabedatei) | 1. Wert der Verteilung, weitere Werte in Folgezeilen  |

## \_\_CALCULATION\_DATA

In der ersten Zeile dieses Blocks wird bestimmt, ob und wie die Sorptionskinetik in Form der Intrapartikeldiffusion berücksichtigt werden soll (Parameter *diff\_mode*, siehe Tabelle 6). In einer zweiten Zeile wird mit dem Parameter *diff\_cal* bestimmt, ob die Intrapartikeldiffusion analytisch (*diff\_cal* = 1) oder numerisch (*diff\_cal* = 2) berechnet werden soll.

**Tabelle 6:** Mögliche Modi für die Berücksichtigung der Intrapartikeldiffusion (Parameter *diff\_mode*)

| Wert des Parameters<br><i>diff_mode</i> | Behandlung der Diffusion  |
|---|---|
| 0                                       | Keine Intrapartikel-Diffusion   |
| 1                                       | Verwendung des $K_{oc}$ - und $f_{oc}$ -Wertes zur Berechnung des scheinbaren Diffusionskoeffizienten $D_{app}$ |
| 2                                       | Verwendung des $K_d$ -Wertes zur Berechnung des scheinbaren Diffusionskoeffizienten $D_{app}$                   |

## \_\_LITHOCOMPONENTS

In diesem Abschnitt werden die vorhandenen (beteiligten) lithologischen Subkomponenten definiert. Je Lithokomponente wird eine Zeile eingelesen mit der Katalog-Nummer der Lithokomponente und einer Bezeichnung. Die Katalognummer stellt den Bezug zu dem entsprechenden Eintrag in der Katalogdatei her. Die angegebene Bezeichnung wird für die Modellausgabe verwendet und darf von der Bezeichnung im Katalog abweichen.

## \_\_GRAIN\_SIZE\_CLASSES

Hier werden die Korngrößenklassen definiert (siehe *readin.f*, Zeilen 395-405). Für jede Korngrößenklasse ist anzugeben: der Kornradius (1. Zeile innerhalb des Blocks), die räumliche Verteilung des Massenanteils innerhalb der betrachteten Säule sowie der Massenanteil der zuvor definierten Lithokomponenten innerhalb der Korngrößenklasse. Die Massenanteile aller Korngrößenklassen müssen in jeder Modellzelle 1.0 ergeben, ebenso die Massenanteile aller Lithokomponenten

innerhalb jeder Korngrößenklasse. Beide Kontrollen werden vom Programm durchgeführt.

### **\_\_SURFACTANTS**

In diesem Block werden die Tenside, sofern sie in der Berechnung berücksichtigt werden sollen, spezifiziert. Jedem beteiligten Tensid wird eine laufende Nummer zugeordnet. Die Spezifizierung des Tensidtyps bzw. -namens erfolgt indirekt über die Angabe einer Katalog-Nummer mit welcher der Bezug zur entsprechenden Katalog-Datei und den Tenseideigenschaften hergestellt wird. Innerhalb der Berechnung und in den folgenden Blöcken der Eingabedatei wird jedes Tensid über die laufende Nummer identifiziert.

### **\_\_CONTAMINANTS**

In gleicher Weise wie die Tenside (s. o.), werden in diesem Block die beteiligten Kontaminanten spezifiziert. Für die Kontaminanten beginnt die laufende Nummerierung wieder bei eins.

### **\_\_EQUILIBRIUM\_FRACTIONS**

In diesem Block wird definiert, welchen Anteil die Spontan- oder Gleichgewichtssorption am Sorptionsprozess insgesamt hat. Für jede Kombination Schadstoff-Lithokomponente wird ein Wert angegeben.

### **\_\_INITIAL\_CONCENTRATIONS**

Hier werden die Anfangs- oder Startkonzentrationen der beteiligten Stoffe spezifiziert, wobei die Werte in für Tenside und Kontaminanten getrennten Unterblöcken anzugeben sind. Bei den Kontaminanten wird des Weiteren unterschieden zwischen der in den Gleichgewichtsphasen herrschenden Konzentration und der infolge der diffusiv immobilisierten Schadstoffe in den Gesteinspartikeln gegebenen mittleren Konzentration.

Ist der Eingabeblock nicht vorhanden, so werden die Anfangskonzentrationen aller Stoffe in allen Modellzellen gleich Null gesetzt.

### **\_\_SURFACTANTS**

Unterblock für die Tenside.

### **\_\_SOLUTE\_CONCENTRATION**

Hier ist für die betrachteten Tenside der Anfangswert für die Konzentration der Tenside in Lösung  $s_{ini}$  anzugeben. Ist diese größer als die kritische Mizellenkonzentration, wird  $s_{mono} = CMC$  und  $s_{mic} = s_{ini} - CMC$  gesetzt, andernfalls ist  $s_{mono} = s_{ini}$  und  $s_{mic} = 0$ . Aus den berechneten Werten für  $s_{mono}$  wird

entsprechend der spezifizierten Sorptionsisotherme die Anfangskonzentration  $s_{sorb}$  berechnet.

## **\_\_CONTAMINANTS**

Unterblock für die Schadstoffe.

## **\_\_MASS\_PER\_MASS\_SOIL**

Hier ist je betrachtetem Schadstoff ein Anfangswert für die sorbierte Schadstoffmasse pro Masse Boden anzugeben. Die Verteilung der Masse auf die einzelnen Bodenfraktionen sowie zwischen „schnellen“ und „langsamen“ Sorptionsplätzen wird vom Programm berechnet. Wird ein positiver Wert angegeben, so wird von einer anfangs equilibrierten Säule ausgegangen, d. h. der Anfangswert von  $c_{diss}$ , der Schadstoffkonzentration in Lösung außerhalb der Bodenpartikel wird der Schadstoffkonzentration in den Intrapartikelporen gleichgesetzt. Bei Angabe eines negativen Wertes ändert sich hinsichtlich der Berechnung der Konzentrationen in der Feststoffphase nichts, jedoch wird von einer anfangs nicht equilibrierten Säule ausgegangen, d. h. der Anfangswert der Konzentration  $c_{diss}$  ist gleich Null. Der Konzentration  $c_{diss}$  entsprechend werden anschließend die Anfangswerte der anderen Schadstoffkonzentrationen ( $c_{mono}$ ,  $c_{mic}$  und  $c_{sorb}$ ) berechnet.

*Anmerkung:* Es sei hier auf zwei wichtige Punkte bei der Definition von Porositäten hingewiesen:

- Die Gesamt-Porosität (Parameter  $por$ ) ist als „externe“ Porosität (exklusive der Intrapartikelporosität) zu verstehen.
- Unterschiedliche Werte für die Gesamt-Porosität und die effektive Porosität (Parameter  $epor$ ) führen zu einer Retardation der betrachteten Stoffe: Retardationsfaktor  $R = 1 + por / epor$ .

## **\_\_INFLOW\_CONCENTRATIONS**

Die Konzentrationen im Zugabewasser am Einlauf der Säule werden in diesem Abschnitt definiert, wiederum für Tenside und Schadstoffe in getrennten Unterblöcken.

Es wird jeweils in einer ersten Zeile die Bezugsnummer (lfd. Nummer) des Tensids bzw. des Schadstoffs und der Modus der folgenden Eingabe angegeben.  $mode = 0$  bedeutet zeitlich konstante Konzentration und es ist in einer zweiten Zeile nur ein Wert anzugeben. Zeitlich variable Konzentrationen erreicht man mit  $mode = 1$  und der Definition beliebig vieler Zeitschrittbereiche und einem zugehörigen Konzentrationswert (Prinzip wie bei der Spezifizierung der zeitlichen Diskretisierung).

Ist der Eingabeblock nicht vorhanden, so werden die Zustromkonzentrationen aller Stoffe in allen Zeitschritten gleich Null gesetzt.

## **\_\_SURFACTANTS:**

Unterblock für die Tenside.



## \_\_CONTAMINANTS

Unterblock für die Schadstoffe.

## \_\_BIO\_REDUCTION

Hier wird für jeden betrachteten Schadstoff ein Feld mit jeweils vier Parametern: der Berechnungsmodus (*bio\_mode*, siehe Tabelle 7), die Halbwertszeit, die Ordnung, eine Referenzkonzentration (in der wässrigen Phase) für welche die Halbwertszeit errechnet wurde.

Anmerkung: Für den Spezialfall des Abbaus 1. Ordnung ist die angegebene Halbwertszeit konzentrationsunabhängig, dennoch muss ein (beliebiger) Wert angegeben werden.

**Tabelle 7:** Mögliche Modi für die Berücksichtigung des Bioabbaus (Parameter *bio\_mode*)

| Wert des Parameters <i>bio_mode</i> | Behandlung des Bioabbaus                |
|-------------------------------------|---|
| 0                                   | Kein Bioabbau                           |
| 1                                   | Abbau über Kinetik n-ter Ordnung        |
| 2                                   | Abbau nach LANGMUIR-HINSHELWOOD-Kinetik |

Es kann auch ein räumlich heterogener Bioabbau berücksichtigt werden. Der Eingabeblock könnte bei zwei Schadstoffen für ein Modell mit 5 Modellzellen folgendermaßen aussehen

## \_\_BIO\_REDUCTION

```

0  0  1.  1.  1.  ! 1st comp.: no bio reduction in entire model
11 1  1.  1.  1.  ! 2nd comp.: control record
1 86400. 1. 100. ! 2nd comp.: 1st order degrad. in top layer
1 86400. 1. 100. ! 2nd comp.: 1st order degrad. in 2nd layer
0 86400. 1. 100. ! 2nd comp.: no degradation in 3rd layer
0 86400. 1. 100. ! 2nd comp.: no degradation in 4th layer
0 86400. 1. 100. ! 2nd comp.: no degradation in bottom layer

```

## \_\_ISOTHERM\_DEFINITIONS

In diesem Block werden abschließend verschiedene Parameter zu den Gleichgewichtsprozessen, insbesondere zur Beschreibung der Sorptionsisothermen spezifiziert. Je nachdem ob Tenside beteiligt sind oder nicht, müssen verschiedene Unterblöcke definiert werden. Im allgemeinsten (und auch komplexesten) Fall sind das im Einzelnen die folgenden Blöcke:

## \_\_SORPTION\_ONTO\_MINERALSURFACES

Je Kombination Schadstoff-Lithokomponente ist hier eine Isotherme zu spezifizieren, wobei verschiedene Isothermentypen gewählt werden können (Tabelle 8).

Sind keine Tenside an der Berechnung beteiligt, können die folgenden drei Blöcke weggelassen werden.

## \_\_SORPTION\_ONTO\_MONOMERELAYERS

In diesem Abschnitt werden die Isothermen für die Sorption der Schadstoffe an die am/im Feststoff sorbierten Tensid-Monomer-schichten (Ad- und Hemimizellen) spezifiziert. In aller Regel wird hier für jede Kombination Schadstoff-Tensid ein Verteilungskoeffizient  $K_{\text{mono}}$  (Programmvariable  $p_{\text{mono\_ct}}(1,m,i)$ ) angegeben (lineare Isotherme  $\rightarrow imono\_ct(m,i) = 1$ ). Es können jedoch auch nichtlineare Isothermen ( $imono\_ct(i,j) > 1$ ) verwendet werden.

## \_\_SOLUTION\_WITHIN\_MICELLES

Hier wird die Gleichgewichtsbeziehung der Verteilung des Schadstoffs bzw. Kontaminanten zwischen Lösung und Tensidmizellen definiert, wobei hier ebenfalls üblicherweise auf einen einfachen Ansatz in Form eines Verteilungskoeffizienten  $K_{\text{mic}}$  (Programmvariable  $p_{\text{mic\_ct}}(1,m,i)$ ) zurückgegriffen wird (lineare Isotherme  $\rightarrow imic\_ct(m,i) = 1$ ).

## \_\_MONOMERELAYER\_FORMATION

Hier wird die Isotherme angegeben, mit der die Tensidsorption beschrieben wird.

**Achtung:** Die angegebene Isotherme wird nur für Tensidgesamtkonzentrationen in Lösung  $c_{\text{diss}} \leq \text{CMC}$  angewendet. Für höhere Konzentrationen wird von einer nicht weiter zunehmenden Konzentration sorbierter Tensidadmizellen  $q_{\text{max}}$  ausgegangen. Das bedeutet, dass die hier definierten Isothermenparameter nur den ersten Teil des charakteristischen Verlaufs der Tensidsorptionsisotherme („Knick“-Isotherme) beeinflusst. Die „Knick“-Charakteristik ist eine feste (nicht beeinflussbare) Annahme innerhalb des konzeptionellen Modells der Prozesse und dementsprechend fester Bestandteil des Programms (Reaktionsmodul) für den Fall des gekoppelten Transports von Schadstoffen und Tensiden.

**Tabelle 8:** Übersicht und Kurzbeschreibung der implementierten Isothermen

| Kennzahl/Typ | Bezeichnung                         | Erforderliche Parameter   |
|--------------|-------------------------------------|---|
| 1            | Lineare ( <i>Henry</i> -) Isotherme | $K_d$   |
| 2            | <i>Freundlich</i> -Isotherme        | <i>Freundlich</i> -Koeffizient $K_{\text{fr}}$ , <i>Freundlich</i> -Exponent $n_{\text{fr}}$  |
| 3            | <i>Langmuir</i> -Isotherme          | Adsorptionskonstante $K_L$ , maximale sorbierte Konzentration $c_{\text{sorb,max}}$   |
| 4            | BET-Isotherme                       | Adsorptionskonstante $K_{\text{BET}}$ , maximale sorbierte Konzentration $c_{\text{sorb,max}}$ , Sättigungskonzentration $c_{\text{sat}}$ |
| 5            | Zusammengesetzte Isotherme          | Iso- Tabelle mit Konzentrationsbereichen und zugehörigen Isothermensteigungen   |

## \_\_OUTPUT\_DEFINITIONS

In diesem Eingabeblock werden die Durchbruchskurven und Konzentrationsprofile näher festgelegt (falls oben im Block \_\_DIMENSIONS die gewünschte Anzahl > 0 ist. Erwartet wird dann zunächst die Angabe der Orte an welchen die Durchbruchskurven „aufgezeichnet“ werden sollen, beginnend mit dem Schlüsselwort „\_\_LOCATIONS\_OF\_BTCS“. In einem zweiten Block sind die Zeitpunkte anzugeben zu denen Konzentrationsprofile berechnet werden sollen. Der Eingabeblock könnte (für 2 Durchbruchskurven und ein Profil) beispielsweise folgendermaßen aussehen:

```
__OUTPUT_DEFINITIONS
__LOCATIONS_OF_BTCS
0.50          ! 1st BTC in the middle of the column
0.80          ! 2nd BTC at x = 0.80 m
__TIMES_OF_PROFILES
31536000.0    ! Profile after one year
```

Anmerkung: Die Ausgabewerte werden durch Interpolation über die Zeit (zwischen den beiden zur „Profilzeit“ nächstgelegenen Simulationszeitpunkten bzw. zwischen den beiden zum Ort der Durchbruchskurve nächstgelegenen Modellzellen) ermittelt.

## \_\_FORMAT\_OF\_OUTPUT

Optionaler Eingabeblock zur Festlegung des Ausgabeformats. Erwartet wird eines der Schlüsselworte „ASCII“, „CSV“ oder „TECPLOT“. Falls der Eingabeblock nicht in der Eingabedatei enthalten ist, wird das Format standardmäßig auf „ASCII“ gesetzt.

### 2.2.1 Katalogdateien

In den Katalogdateien sind solche Parameter abgelegt, die als feste Größen angesehen werden, d. h. auf der Grundlage von experimentellen Untersuchungen als stoff- oder materialspezifische Konstanten gelten. Die Katalogdateien sind also als gemeinsame, erweiterbare Datenbasis für alle Simulationen konzipiert. Selbstverständlich können die Katalogdateien auch um hypothetische Stoffe oder Materialien bzw. Parameter ergänzt werden, sollten keine gemessenen Werte vorliegen. Insgesamt wird zwischen drei Katalogen für Schadstoffe (z. B. contam.cat), Tenside (z. B. surfact.cat) und Aquifermaterialien (z. B. soil.cat) unterschieden. Beispiele sind im Anhang zu finden.

## 2.3 Programmausgabe

### 2.3.1 Ausgabedateien

Das Programm erzeugt verschiedene Ausgabedateien, deren Inhalte im Überblick in Tabelle 9 dargestellt sind.

**Tabelle 9:** Übersicht und Kurzbeschreibung der Ausgabedateien

| Dateiname                       | Inhalt  |
|---------------------------------|---|
| <master filename>.XX.btc.sdo    | Konzentrationsdurchbruchskurve an der Kontrollebene XX im „raw“-Format (wird von der Benutzeroberfläche WinSMART gelesen)   |
| <master filename>.XX.btc.csv    | Konzentrationsdurchbruchskurve an der Kontrollebene XX im CSV-Format  |
| <master filename>.XX.btc.tp.dat | Konzentrationsdurchbruchskurve an der Kontrollebene XX im TECPLOT-Format  |
| <master filename>.ZZ.prf.sdo    | Konzentrationsprofil zum Kontrollzeitpunkt ZZ im „raw“-Format (wird von der Benutzeroberfläche WinSMART gelesen)  |
| <master filename>.ZZ.prf.csv    | Konzentrationsprofil zum Kontrollzeitpunkt ZZ im CSV-Format   |
| <master filename>.ZZ.prf.tp.dat | Konzentrationsprofil zum Kontrollzeitpunkt ZZ im TECPLOT-Format   |
| <master filename>.YY.pdf.txt    | Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit in der Schicht YY (falls von SMART mit analytischem Modell berechnet)   |
| <master filename>.YY.ba1        | Allgemeine Massenbilanz der Modellrechnung in der Schicht YY  |
| <master filename>.YY.ba2        | Spezifische Massenbilanz der Modellrechnung in der Schicht YY   |
| <master filename>.YY.dat        | Hauptausgabedatei für die Schicht YY mit allen wesentlichen Input-Daten sowie dem gesamten Ergebnisdatensatz (alle Zeitschritte, alle Modellzellen) für alle Konzentrationen, die in der OUTPUT_CONTROL-Sektion der Haupt-Eingabedatei spezifiziert sind. |
| <master filename>.out           | Protokoll-Datei über das Einlesen von Daten, deren Verarbeitung zur Vorbereitung der Simulation und über den Fortschritt der Berechnung.  |

### 2.3.2 Inhalt der Hauptausgabedatei

Die Haupt-Ausgabedatei ist ebenfalls in verschiedene durch Schlüsselwörter gekennzeichnete Blöcke unterteilt. Eine Erläuterung der einzelnen Blöcke findet sich in der folgenden Tabelle 10.

**Tabelle 10:** Erläuterungen zur Haupt-Ausgabedatei

| Schlüsselwort               | Erläuterung  |
|-----------------------------|--|
| __DIMENSION_DATA            | Dimensionen (ni,nm,nj,nk,nix,nt)   |
| __NAMES                     | Bezeichnung der Komponenten (Kontaminanten, Tenside, Lithokomponenten, Korngrößen) |
| __INFLOW_MASS_PER_TIME_STEP | Eingetragene Massen für alle Zeitschritte  |
| __CONTAMINANT[i]            | ... für jeden Kontaminanten (i=1,...,ni)   |
| __SURFACTANT[m]             | ... für jedes Tensid (m=1,...,nm)  |
| __COLUMN_DATA               | Säulenspezifische Daten  |
| __SPECIFIC_DISCHARGE        | Filtergeschwindigkeit  |
| __CELL_WIDTHS               | Diskretisierung ('Zellen'-Größe)   |
| __EFFECTIVE_POROSITY        | Verteilung der effektiven Porosität  |
| __TIME_DATA                 | Gesamt-Simulationszeit für jeden Zeitschritt (aufaddierte Zeitschrittweiten)       |
| __SIMULATION_RESULTS        | Beginn der Berechnungsergebnisse   |
| __TIME_STEP                 | ...  |
| __MASS_BALANCE_S[m]         | Masseninput, -inhalt und -output des Tensids m                                     |
| __MASS_BALANCE_C[i]         | Masseninput, -inhalt und -output des Schadstoffs i                                 |
| __S_MONO[m]                 | Tensid-Monomerkonzentration  |
| __S_MIC[m]                  | Tensid-Mizellenkonzentration   |
| __S_SORB[m]                 | Tensidkonzentration, sorbiert an Festphase   |
| __C DISS[i]                 | Schadstoffkonzentration in Lösung  |
| __C MIC[i]                  | Schadstoffkonzentration, gelöst in Tensidmizellen                                  |
| __C_SORB[i]                 | Schadstoffkonzentration, sorbiert an Feststoff                                     |
| __C_MONO[i]                 | Schadstoffkonzentration, sorbiert an Tensidmizellen                                |
| __C_DIFF[i]                 | Schadstoffkonzentration, diffundiert in der Feststoffmatrix                        |
| __C_RED[i]                  | Schadstoffkonzentration, abgebaut in Lösung  |

## 2.4 Bildschirmausgabe

Der Bearbeitungsstand von SMART wird durch die aktuell berechneten Ergebnisse (Simulationszeit und Konzentration am Säulenauslauf) über den Bildschirm ausgegeben.

## 2.5 Weitere Hinweise

### 2.5.1 Automatische Zeitschrittweitensteuerung

Falls die Intrapartikeldiffusion numerisch errechnet wird ( $diff\_cal = 2$ ), werden die Zwischenschrittweiten über die Parameter  $dtmin$ ,  $dtmax$  und  $tfak$  bestimmt. Die weiteren Ausführungen gelten daher **nicht** für diesen Fall.

Die Automatische Zeitschrittweitensteuerung wird aktiv, wenn die aus der Diffusion resultierende Änderung der Konzentration in der Wasserphase  $c\_diss$  den vom Anwender definierten Grenzwert  $mxdel\_diff$  (Angabe in Prozent) überschreitet. In diesem Fall wird die vom Anwender vorgegebene Zeitschrittweite in Zwischenschritten unterteilt.

Diese Zwischenschritte wirken sich jedoch nur auf den jeweils aktuellen Zeitschritt aus, so dass die Gesamtzahl der bei der (auf Superposition vergangener Zeitschrittdifferenzen beruhenden) Berechnung der Intrapartikeldiffusion zu berücksichtigenden Zeitschritte sich nur unwesentlich vergrößert. Der Mehraufwand an Rechenzeit für die Berechnung der Unterzeitschritte ist den Testrechnungen zufolge unwesentlich im Vergleich zu der Zeitersparnis durch insgesamt größere Zeitschrittweiten.

Für die Dimensionierung der für die Behandlung von Zwischenzeitschritten notwendigen Felder, wird der Parameter  $mxit\_sub$  verwendet. Dieser Wert gilt gleichzeitig auch als obere Grenze der Anzahl der Zwischenschritte. Ein Wert zwischen 10 und 50 können als sinnvoll betrachtet werden. Kleine Werte bedeuten in diesem Zusammenhang nicht unbedingt schnellere Rechenzeiten, da das Kriterium „max. tolerierbare Konzentrationsdifferenz“ (Parameter  $mxdel\_diff$ , siehe oben) auch innerhalb eines Zwischenzeitschritts erfüllt werden muss. Wird die erforderliche Zwischenzeitschrittzahl also durch einen kleinen  $mxit\_sub$  –Wert zu stark reduziert, wird in den (dann zu großen) Zwischenzeitschritten wie bisher zwischen den Prozeßgruppen B (Gl.gew.-Sorption) und C (Intrapartikeldiff.) iteriert.

Als obere Grenze der vom Anwender definierten Zeitschrittweite gilt die Aufenthaltszeit eines konservativen Tracers in der Modellzelle mit dem kleinsten ( $delx$  mal  $epor$ )-Wert. Die angegebenen Zeitschrittweiten werden darauf hin überprüft und können diese Grenze daher ohnehin nicht überschreiten. Es sei hier darauf hingewiesen, dass die Exaktheit des Simulationsergebnisses von der Wahl der Zeitschrittweite abhängt. Eine Berechnung mit 1000 Zeitschritten à 1000 s wird in jedem Fall ein genaueres Ergebnis erzielen als eine Berechnung mit 5 Zeitschritten à 200000 s.

## 2.6 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 S.
- Finkel, M., R. Liedl & G. Teutsch (1998): Modelling Surfactant Influenced PAH Migration. - Phys. Chem. Earth, Vol. 23 (2), pp. 245-250.
- Finkel, M. (1999): Quantitative Beschreibung des Transports von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK) und Tensiden in porösen Medien. - Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten, TGA , C47, 98 S.
- Finkel, M., R. Liedl & G. Teutsch (1999): Modelling surfactant-enhanced remediation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. - Environmental Modelling & Software, Vol. 14, pp. 203-211.
- 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 - Eingabedateien

Die folgenden Eingabedateien beziehen sich auf das Beispiel ex1. Weitere Beispieldateien sind bei den zum Programm mitgelieferten Dateien im Verzeichnis *projects* zu finden.

### Haupteingabedatei ex1.inp

**Beispiel einer Haupteingabedatei (ex1.inp):**

```
__VERSION
201204

__TITEL
3
Beschreibung des Stofftransports zweier Kontaminaten mit konstanter In-
put-Konzentration.
50 cm lange Säule, mit Intrapartikeldiffusion (numerisch) und ohne Bioab-
bau.
vier Lithokomponenten mit jeweils drei verschiedenen Korngrößenklassen.

__SIMULATION_MODE
1
1
1

__DIMENSIONS
25
50
4
3
2
0
0
3

__LAYER_GEOMETRY
1
1
25

__MASTER_FILENAME
ex1

__DATA_BASE_FILES
contam.clg
soil.clg

__SIMULATION_PARAMETER
4000.0
30.0
1300.0
500.0
1.0E-12
5000.0
1.0E-10
0.4
30.0
0.01
2000.0
100.0
1.0E-10
1.0E-20
```

```
20.0
20.0
1.0
1000000.0
2.0
0.4
1.0E-12
1.0E-20
1.0E-20
5.0
400.0
1.0E-20
1.0E-10
2.0
0.995

__FURTHER_INPUT_FILES
0

__OUTPUT_CONTROL
0

__GEOMETRICAL_DATA
0.1
0 0.02

__BOUNDARY_CONDITIONS
2 0.0 1.0 1.0E-5

__HYDRAULIC_DATA
0 0.001
0 0.25
0 0.25

__TIME_DATA
2
1 50 50

__PDF_DATA
0
1 0.01

__CALCULATION_DATA
2
1

__LITHOCOMPONENTS
263 Quarz1.1
244 Jurakalke
243 Muschelkalk
242 Keupersandstein1.0

__GRAIN_SIZE_CLASSES
0.005
0 0.4
0 0.9
0.0.04
0 0.04
0 0.02
0.01
0 0.25
0 0.1
0 0.4
0 0.4
0 0.1
0.03
0 0.35
0 0.0
```

```

0 0.5
0 0.45
0 0.05

__CONTAMINANTS
1 4 naphthalene
2 6 phenanthrene

__EQUILIBRIUM_FRACTIONS
11 1.e0
0.0 0.0
11 1.e0
0.0 0.0
11 1.e0
0.0 0.0
11 1.e0
0.0 0.0

__INITIAL_CONCENTRATIONS
__CONTAMINANTS
__MASS_PER_MASS_SOIL
0 0.0
0 0.0

__INFLOW_CONCENTRATIONS
__CONTAMINANTS
1
1 50 1000.0
1
1 50 10000.0

__BIO_REDUCTION
0 0 86400. 1. 1.
0 0 86400. 1. 1.

__ISOTHERM_DEFINITIONS
__SORPTION_ONTOMINERALSURFACES
1 1 1
3.8E-5 0.0 0.0
1 2 1
6.0E-4 0.0 0.0
2 1 1
0.001504 0.0 0.0
2 2 1
0.02392 0.0 0.0
3 1 1
0.0028 0.0 0.0
3 2 1
0.04435 0.0 0.0
4 1 1
0.00185 0.0 0.0
4 2 1
0.02933 0.0 0.0

__OUTPUT_DEFINITIONS
__LOCATIONS_OF_BTCS
0
__TIMES_OF_PROFILES
100.0
1000.0
2500.0
__FORMAT_OF_OUTPUT
CSV

```

## Katalogdateien \*.clg

### Beispiel einer Katalogdatei für Schadstoff (contam.clg):

```

*** Spezifische Eigenschaften der Wasserinhaltsstoffe ***
Daq Werte berechnet nach HAYDUK & LAUDIE bei 25°C
logKow Werte nach SCHWARZENBACH Appendix bei 25°C
logKoc Werte: Mittelwerte, berechnet Quellen T2, T7 und T12, siehe
              Table 3.2 in FETTER; Contaminant Hydrogeology
Achtung: Werte koennen nur verwendet werden, wenn Einheiten
          entsprechend sind (L und kg), d.h. Laengeneinheit muss dm sein

No.      Stoff-Bezeichnung      Daq      logKow      logKoc
__DATA
  1      benzene                1.02E-09    2.13      1.92
  2      toluene                9.39E-10    2.69      2.48
  3      trichloroethene        1.04E-09    2.42      2.21
  4      naphthalene            8.18E-10    3.36      3.06
  5      fluorene               7.22E-10    4.18      3.87
  6      phenantrene            6.84E-10    4.57      4.26
  7      anthracene             6.84E-10    4.54      4.23
  8      fluoranthrene          6.58E-10    5.22      4.91
  9      pyrene                 6.58E-10    5.13      4.82
 10      benz(a)anthracene       5.97E-10    5.91      5.60
 11      benzo(a)pyrene         5.79E-10    6.50      6.19
 14      naphthaleneII          8.18E-10    3.36      3.06
 16      phenanthreneII         6.84E-10    4.57      4.26

```

### Beispiel einer Katalogdatei für Aquifermaterialien (soil.clg):

```

*** Spezifische Eigenschaften der Gesteine und Lithofragmente ***

No.      Stoff-Bezeichnung      m      foc      l_dens      nip

units: kg, m

__DATA
  1      Kalkstein                2.5      0.001    2.00d+03    0.02
  2      Ton-Siltstein            2.5      0.005    2.50d+03    0.005
  3      Sandstein                2.5      0.0005   2.50d+03    0.01
  4      Ton/Schluff              2.0      0.005    3.00d+03    0.001
 10      Test-Material            2.0      0.020    2.50d+03    0.130
 11      Neckarsand               2.0      0.020    2.73d+03    0.010
 12      Neckarsand2              2.0      0.020    2.73d+03    0.020
 13      Pseudo_Mat1              2.0      0.020    2.73d+03    0.020
 14      Pseudo_Mat2              2.0      0.020    2.73d+03    0.020
 15      Pseudo_Mat3              2.0      0.020    2.73d+03    0.020
161      Quarz1.0                 1.00     0.001    2.65d+03    0.0100
241      Quarz1.0                 1.00     0.001    2.65d+03    0.0050
242      Keupersandstein1.0        2.10     0.00161  2.65d+03    0.0800
243      Muschelkalk              2.00     0.00244  2.73d+03    0.0057
244      Jurakalke                2.10     0.00131  2.73d+03    0.0160
251      Quarz                    1.00     0.001    2.65d+03    0.0100
252      Keupersandstein2.00       2.00     0.005    2.69d+03    0.0880
261      Quarz1.0                 1.00     0.001    2.65d+03    0.0030
262      Quarz1.2                 1.20     0.001    2.65d+03    0.0050
263      Quarz1.1                 1.10     0.000033 2.65d+03    0.0020
300      Quarz1.1                 1.00     0.0001   1.00d+03    0.100

```

## Anhang B – Format der Eingabedatei für externe Verweilzeitendaten

### Formatcode = 1

Das erwartete Format des Dateiformats illustriert das Beispiel in Abbildung B.1. Es werden nur die Häufigkeitsdichtewerte erwartet. Anzahl der Werte sowie die Konsistenz mit der zeitlichen Diskretisierung des Modells werden vorausgesetzt.

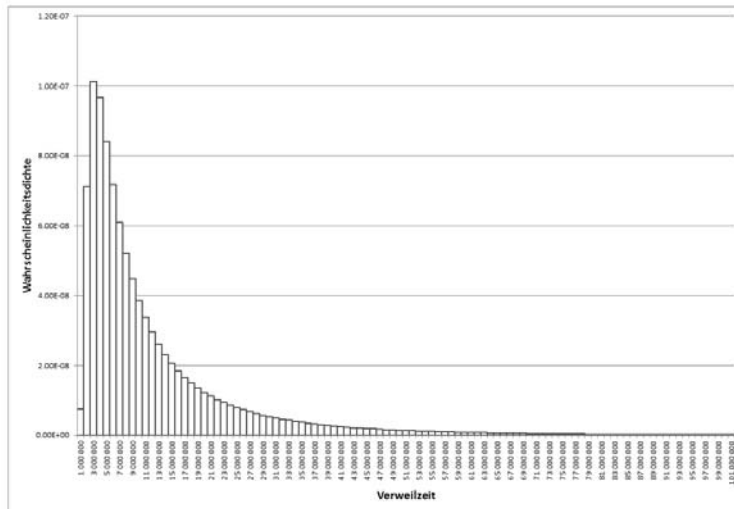
```
.0000000000E+00
.0000000000E+00
.0000000000E+00
.1688821365E-25
.6005376770E-17
.9218450805E-12
.2201188363E-08
.4344419497E-06
.1713796511E-04
.2251334511E-03
.1350292546E-02
.4541351260E-02
.9847589667E-02
.1518674087E-01
.1788133069E-01
.1694209199E-01
.1344131229E-01
.9207351235E-02
.5577851185E-02
.3045874652E-02
.1522375882E-02
.7051879655E-03
.3058462050E-03
.1252560114E-03
.4878306072E-04
.1817635382E-04
.6511941844E-05
.2252980142E-05
.7555433294E-06
```

**Abbildung B.1:** Beispiel einer Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit (falls Formatcode = 1)

### Formatcode = 2

Das erwartete Format des Dateiformats illustriert das Beispiel in Abbildung B.2. In einer ersten Zeile ist die Anzahl der folgenden Einträge anzugeben, in den folgenden Zeilen werden Verweilzeit-Häufigkeitsdichte-Wertepaare  $(\tau, h)$  erwartet.  $\tau$  gibt dabei jeweils den oberen Wert des Verweilzeitintervalls an,  $h$  die Häufig-

keitsdichte. Das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung über  $\tau$  d.h. sollte möglichst nahe an 1 sein:  $\sum (\Delta \tau * h) \approx 1$ .



|           |          |
|-----------|----------|
| 101       |          |
| 1000000.  | 7.51E-09 |
| 2000000.  | 7.12E-08 |
| 3000000.  | 1.01E-07 |
| 4000000.  | 9.67E-08 |
| 5000000.  | 8.42E-08 |
| 6000000.  | 7.18E-08 |
| 7000000.  | 6.10E-08 |
| 8000000.  | 5.21E-08 |
| 9000000.  | 4.47E-08 |
| 10000000. | 3.87E-08 |
| 11000000. | 3.37E-08 |
| 12000000. | 2.96E-08 |
| 13000000. | 2.61E-08 |
| 14000000. | 2.32E-08 |
| 15000000. | 2.06E-08 |
| 16000000. | 1.85E-08 |
| 17000000. | 1.66E-08 |
| 18000000. | 1.50E-08 |
| 19000000. | 1.36E-08 |
| 20000000. | 1.23E-08 |
| 21000000. | 1.12E-08 |
| 22000000. | 1.02E-08 |
| 23000000. | 9.36E-09 |
| 24000000. | 8.58E-09 |

**Abbildung B.2:** Beispiel einer Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Verweilzeit (falls Formatcode = 2)