

Technische Universität Dresden
Fakultät Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften

SYSTEMANALYSE IN DER WASSERWIRTSCHAFT

Peter-Wolfgang Gräber

Sommersemester 2007

Das vorliegende Lehrmaterial ist internes Studienmaterial für die Studiengänge der Fachrichtung Wasserwesen der TU Dresden. Das Material unterliegt den Urheberrechten und ist nur zum Gebrauch für interne Aus- und Weiterbildung innerhalb der TU Dresden gestattet. Jegliche Vervielfältigung, auch auszugsweise, ist nur mit Zustimmung des Verfassers zulässig.

Redaktion und Gestaltung: Prof. Dr.-Ing. habil. Peter-Wolfgang Gräber
TU Dresden
Fakultät Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften
Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten

Tel.: (03501) 530029
Fax: (03501) 530022
e-mail: graeber@rcs.urz.tu-dresden.de
Internet: <http://www.tu-dresden.de/fghhiaa/graeber>
Redaktionsschluss: 01.04.2007

Autorenreferat

Die Vorlesung **Wasserwirtschaftliche Systemanalyse** baut auf Vorlesungen des Grundstudiums wie Mathematik, Physik und Informatik auf. Dabei werden aus diesen Vorlesungen insbesondere solche Kapitel herangezogen, die für die Lösung wasserwirtschaftlicher Aufgabenstellungen eine Rolle spielen. Dies sind u.a. die Vektoranalysis, die Lösung von Gleichungssystemen und in dem Zusammenhang die Matrizenrechnung, die Lösung von Differentialgleichungen sowie die numerische Integration.

Die folgenden Kapitel zu derartigen Themen stellen damit eine Wiederholung des Grundlagenstoffes dar und werden entsprechend nur stichpunktartig dargestellt. Von den Studenten wird hier ein erhöhter Anteil an Selbststudium zur Wiederholung des Stoffes vorausgesetzt.

Die weiteren Kapitel gehen über den Stoff der Grundlagenfächer hinaus und zeigen mathematische Methoden auf, die für die Praxis der Wasserwirtschaft relevant sind.

Der Lehrinhalt des Faches **Wasserwirtschaftliche Systemanalyse** stellt einen hohen mathematischen Anspruch, der einige Abstraktionsfähigkeit voraussetzt. In den dazugehörigen Übungsaufgaben und im Computerpraktikum wird versucht, den vermittelten Stoff durch praxisrelevante Aufgabenstellungen zu untersetzen und damit die Anschaulichkeit zu vertiefen.

Inhaltsverzeichnis

Autorenreferat	III
Tabellenverzeichnis	XIII
Abbildungsverzeichnis	XIX
Abkürzungen und Formelzeichen	XX

I Mathematische Grundlagen **XXV**

Teil

1 Algebraische Grundlagen	1
1.1 Exponential- und logarithmische Ausdrücke	2
1.2 Matrizen	4
1.2.1 Grundlagen	4
1.2.2 Rechenregeln	8
1.2.3 Determinante einer Matrix	13
1.2.4 Aufgaben zur Berechnung von Matrizen	15
1.3 Lineare Gleichungssysteme (LGS)	17
1.3.1 Gesamtschrittverfahren	18
1.3.1.1 Eliminationsverfahren nach GAUSS	18
1.3.1.2 CRAMERSche Regel	23
1.3.1.3 Bildung der inversen Matrix	26
1.3.1.4 LU-Zerlegung	28

1.3.1.5	CHOLESKY-Verfahren	33
1.3.1.6	Aufgaben zur Lösung von Gleichungssystemen nach den Gesamtschrittverfahren	41
1.3.2	Iterative Verfahren	42
1.3.3	Überbestimmte Gleichungssysteme ($m > n$)	43
2	Vektoralgebra und -analysis	45
2.1	Einheitsvektoren	46
2.2	Rechenregeln	48
2.3	Beispiele zur Vektorrechnung	56
2.4	Aufgaben zur Vektorrechnung	60
3	Interpolationsverfahren	63
3.1	Polynominterpolation	68
3.1.1	Analytische Potenzfunktionen	69
3.1.2	Interpolationsformel von LAGRANGE	72
3.1.3	NEWTONSche Interpolationsformel	76
3.1.3.1	Beliebige Stützstellen	76
3.1.3.2	Äquidistante Stützstellenverteilung	79
3.1.3.3	Beispiele zur Anwendung des Newtonschen Verfahren	82
3.2	Interpolierende Polynomteilstücke (Spline)	86
3.3	Kriging-Verfahren	95
3.3.1	Aufgaben zur Anwendung von Interpolationsverfahren	100
4	Optimierungsprobleme	101
4.1	Analytische Lösung von Extremwertaufgaben	102

4.2	Iterative Optimumsuche	102
4.3	Methode der kleinsten Fehlerquadrate (MKQ-Methode)	102
4.4	Suchstrategien	103
4.4.1	Spiralverfahren nach JONES	106
5	Gewöhnliche Differentialgleichungen	109
5.1	Aufstellen von Gleichungen	112
5.2	Analytische Lösungsmethoden	117
5.2.1	Gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung	117
5.2.1.1	Lösung homogener Differentialgleichung	117
5.2.1.2	Lösung der inhomogenen Differentialgleichung	121
5.2.1.3	Aufgaben zur Lösung von DGL erster Ordnung	126
5.2.2	Gewöhnliche Differentialgleichungen höherer Ordnung	129
5.2.2.1	DGL vom Typ a	129
5.2.2.2	DGL vom Typ b	131
5.2.2.3	DGL vom Typ c	137
5.2.2.4	Aufgaben zur Lösung von DGL höherer Ordnung	138
5.3	Integraltransformationen	139
5.3.1	Zeit- und Frequenzbereich	139
5.3.2	LAPLACE-Transformation	142
5.3.2.1	Wichtige Rechenregeln	143
5.3.2.2	Korrespondenztafel	146
5.3.3	Lösung von Differentialgleichungen mittels LAPLACE-Transformation	148
5.3.3.1	Lösungsweg	148

5.3.3.2	Beispiele	148
5.3.3.3	Beispiel von Systemen von DGL	151
5.3.3.4	Aufgaben zur Anwendung der LAPLACE-Transformation	153
5.4	Numerische Methoden	156
5.4.1	Integration	156
5.4.1.1	Rechteckregel	157
5.4.1.2	Trapezregel	160
5.4.1.3	SIMPSONSche Regel	161
5.4.1.4	NEWTONSche Formel	161
5.4.1.5	Beispiel zur Anwendung der numerischen Integration	162
5.4.1.6	Aufgaben zur Anwendung der numerischen Integration	164
5.4.2	Lösung von Differentialgleichungen	167
5.4.2.1	EULER-Verfahren	169
5.4.2.2	RUNGE-KUTTA-Verfahren	172
5.4.2.3	Predictor-Corrector-Verfahren	175
5.4.2.4	Aufgaben zur numerischen Lösung von DGL	179

II Partielle Differentialgleichungen der unterirdischen Prozesse 181

6 Überblick 183

6.1 Eindimensionale Strömungsgleichung 186

6.2 Horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung 187

6.3 Eindimensionaler Stofftransport 187

6.4 Mehrphasenströmung 188

7	Horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung	191
7.1	DUPUIT-Annahmen und Bilanzgleichung	192
7.2	Potentialdarstellung	195
7.3	Grenzbedingungen	199
7.3.1	Anfangsbedingungen	199
7.3.2	Randbedingungen	200
8	Analytische Lösungen	203
8.1	THEISSche Brunnengleichung (Rotationssymmetrische Strömung)	204
8.1.1	Allgemeine Lösung	204
8.1.2	Berücksichtigung spezieller Effekte	213
8.1.2.1	Unvollkommener Brunnen	213
8.1.2.2	Mehrbrunnenanlagen	215
8.1.2.3	Veränderliche Förderganglinie des Brunnens	217
8.1.2.4	Begrenzung	221
8.1.2.5	Mehrseitige Berandung	227
8.1.3	Speisung aus benachbarten Schichten	230
8.2	Aufgaben zur analytischen Berechnung	234
9	Numerische Methoden	241
9.1	Methoden der Ortsquantisierung	244
9.1.1	Finite Differenzen Methode	247
9.1.1.1	Bilanzgleichung	247
9.1.1.2	Berücksichtigung der Randbedingungen	261
9.1.2	Finite Elemente Methode	266

9.2	Methoden der Zeitquantisierung	269
9.2.1	Rückwärtsdifferenz - Implizite Verfahren	272
9.2.2	Gemischte Verfahren	277
9.2.3	Extrapolationsverfahren	279
9.3	Aufgaben zur numerischen Berechnung	281
10	Simulationsprogrammssystem ASM	285
III	Systemtheorie und Modellierung	291
11	Grundlagen	293
11.1	Modellklassifizierung	294
11.2	Methoden der Prozessanalyse	301
11.2.1	Theoretische Prozessanalyse	301
11.2.2	Experimentelle Prozessanalyse	302
11.3	Signaldarstellung	304
11.3.1	Grundsignalformen	305
11.3.2	Anwendung ausgewählter Testsignale	306
11.3.2.1	Impulsfunktion	306
11.3.2.2	Sprungfunktion	307
11.3.2.3	Rampenfunktion	308
11.3.3	Signalsynthese	311
11.3.4	Signalanalyse	311
11.3.5	Quantisierung	314
11.4	Übertragungssysteme	317

11.4.1	Mathematische Beschreibung	318
11.4.2	Grundübertragungsverhalten	321
11.4.2.1	Proportionales Verhalten \implies P -Glieder	322
11.4.2.2	Integrales Verhalten \implies I -Glieder	323
11.4.2.3	Differentielles Verhalten \implies D -Glieder	326
11.4.2.4	Verzögerung 1. Ordnung \implies PT ₁ -Glieder	327
11.4.2.5	Verzögerung 2. Ordnung \implies PT ₂ -Glieder	330
11.4.2.6	Laufzeitverhalten \implies PT _L -Glieder	332
11.4.2.7	Übersicht über Grundübertragungsverhalten	333
11.4.3	Kombiniertes Übertragungsverhalten	336
12	Modellbestimmung an Hand von Kenngrößen	343
12.1	Übertragungsverhalten mit Verzögerung erster Ordnung	344
12.1.1	Mathematische Beschreibung	344
12.1.2	Zeitkonstante aus ganzzahligem Vielfachen	348
12.1.3	Zeitkonstante aus Anstieg	349
12.2	Übertragungsverhalten mit Verzögerung zweiter Ordnung	350
12.2.1	Mathematische Beschreibung	350
12.2.2	Einheitssprung als Eingangssignal (Übergangsfunktion $h(t)$)	353
12.2.2.1	Modelltyp I	356
12.2.2.2	Modelltyp II	358
12.2.3	DIRAC-Impuls als Eingangssignal (Gewichtsfunktion $g(t)$)	359

12.2.4	Aufgaben zur experimentellen Prozessanalyse	361
12.3	Beliebiges Übertragungsverhalten und beliebige Eingangssignale	365
12.3.1	Vorbemerkung	365
12.3.2	Zerlegung beliebiger Eingangsfunktionen (Signalanalyse)	367
12.3.3	Zusammensetzung der Ausgangsfunktion (Signalsynthese)	369
12.3.4	Bestimmung der Gewichtsfunktionen $g(t)$ für den allgemeinen Fall	373
12.3.5	Prognosemodelle	376
12.3.6	Aufgaben zur Anwendung des Faltungsintegrals:	378
IV	Indirekte Parameteridentifikation	381
13	Schätzverfahren	385
14	Strömungsparameter	389
14.1	Pumpversuchsauswertung	390
14.1.1	Grundlagen	390
14.1.2	Praktische Realisierung	392
14.2	Pumpversuchssimulator	398
15	Saugspannungsverteilung	403
	LITERATURVERZEICHNIS	405

Tabellenverzeichnis

2.1	Koordinatensysteme zur Darstellung von Vektoren	46
2.2	Beschreibung des NABLA-Operators in verschiedenen Koordinatensystemen	51
2.3	Koordinatensysteme	55
4.1	Iterative Schätzverfahren (nach WERNSTEDT)	105
5.1	Darstellung der Differentialgleichungen	110
5.2	Bezeichnungen der Differentialgleichungen	111
5.3	Sonderfälle bei stetigen Integraltransformationen	140
5.4	Sonderfälle bei diskreten Transformationen	141
5.5	Korrespondenztafel	146
5.6	Korrespondenztafel - Fortsetzung	147
8.1	Brunnenfunktion $W(\sigma)$ für den Bereich $1 \cdot 10^{-12} \leq \sigma \leq 9$	208
8.2	Fehler der Formel von COOPER und JACOB in Abhängigkeit von σ	211
9.1	Einteilung von Netzformen	244
9.2	Gleichungssystem für die Quantisierung eines zweidimensionalen GWL	251
9.3	Gleichungssystem in Diagonalengestalt	252
9.4	Fortsetzung 1	253
9.5	Fortsetzung 2	254
9.6	Fortsetzung 3	255
11.1	Gegenüberstellung von theoretischer und experimenteller Prozessanalyse	303

11.2 Zuordnung von Informationsparameter und Signalträger	304
11.3 Zusammenhang zwischen verschiedenen Grundsignalen	309
11.4 Messgeräte und -verfahren und deren Signalformen	316
11.5 Zusammenhang zwischen den verschiedenen Funktionen des Übertragungs- verhaltens	320
11.6 Übertragungsverhalten	321
11.7 Grundübertragungsverhalten mit mathematischer Beschreibung	335
11.8 Zusammengesetzte Übertragungsglieder	337
12.1 Einteilung der Modelltypen nach STREJC	354
12.2 Verhältnis der Zeitkonstanten in Abhängigkeit von der Sprungantwort	357
12.3 Kenngrößenbestimmung für Modelltyp II	358
12.4 Kennwerte der Impulsantwortfunktion für Verzögerung 2. Ordnung	360
12.5 Vergleich verwendeter Abkürzungen	366
14.1 Unterschiede zwischen Pumpversuchsauswertung und Labormethoden	390
14.2 Realisierte Programmversionen mit geohydraulischem Schema	393

Abbildungsverzeichnis

2.1	Vektordarstellung im kartesischen Koordinatensystem	46
2.2	Vektordarstellung im sphärischen Koordinatensystem	47
2.3	Vektordarstellung im zweidimensionalen Raum	47
3.1	Darstellung der diskontinuierlichen Messwerterfassung	65
3.2	Darstellung eines Interpolationsproblems	66
3.3	Darstellung der Messwerte und des interpolierten Wertes	85
3.4	Darstellung von linearen Spline-Kurven	86
3.5	Darstellung von Spline-Kurven für ein kubisches System	87
3.6	Interpolierte Spline-Funktion	94
3.7	Darstellung des Kriging-Problems	97
4.1	Iterative Modellanpassung	103
4.2	Spiralalgorithmus nach JONES	107
5.1	Füllvorgang eines Restloches mit konstantem Volumenstrom	114
5.2	Füllvorgang eines Restloches mit variablem Volumenstrom	114
5.3	Gekoppelte Speicherkaskade	115
5.4	Schematische Darstellung des Grundwasserspiegels mit Blockschaltbild . .	115
5.5	Wasserstandsregelung eines Bewässerungsgrabens	116
5.6	Prinzip des Batchversuches	116
5.7	Schematische Darstellung des Grundwasserspiegels	127
5.8	Füllvorgang eines Restloches	128

5.9	Zusammenhang zwischen Original- und Bildbereich	139
5.10	Schematische Darstellung des Grundwasserspiegels	154
5.11	Füllvorgang eines Restloches	154
5.12	Bildung von Rechtecken zur numerischen Integration	157
5.13	Numerische Integration mittels Trapezregel	160
5.14	Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius	166
5.15	Berechnung des Funktionswertes $y(b)$ aus dem Anfangswert $y(a)$	168
5.16	Schrittweise Lösung der Differentialgleichung	168
5.17	Entwicklung des Ergebnisses beim EULER-Verfahren	171
5.18	Füllvorgang eines Restloches	179
7.1	Wirkung von Randbedingungen auf einen Grundwasserleiter	202
8.1	Koordinatensystem für rotationssymmetrische Brunnenanordnung	204
8.2	Unendlich ausgedehnter Grundwasserleiter	205
8.3	Unvollkommene Brunnen mit Filter im a) oberen, b) unteren, c) mittleren Teil des GWL	214
8.4	Mehrbrunnenanlage	215
8.5	Superposition der Absenkungspotentiale	216
8.6	Virtuelle Förderströme bei zeitabhängiger Förderganglinie	217
8.7	Zusammengesetzte Förderganglinie	218
8.8	Absenkungspotential	219
8.9	Grundwasserwiederanstieg	219
8.10	Approximation einer stetigen Förderganglinie	220
8.11	Modellierung einer Randbedingung 1. Art durch einen virtuellen Brunnen	222

8.12	Berücksichtigung einer einseitigen Randbedingung 1. Art	222
8.13	Modellierung einer Randbedingung 2. Art durch einen virtuellen Brunnen	223
8.14	Berücksichtigung einer einseitigen Randbedingung 2. Art	223
8.15	Berücksichtigung einer einseitigen Randbedingung 3. Art	225
8.16	Abhängigkeit der Zusatzlänge von der normierten Flussbreite	226
8.17	Mehrfache Randbedingungen mit dazugehörigen virtuellen Brunnen	229
8.18	Funktion r/B in Abhängigkeit von σ	233
8.19	Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius	236
9.1	Netzformen	245
9.2	Übergang zwischen Kontinuum und Widerstandsnetz	248
9.3	Bilanz für den Knoten n,m	249
9.4	4 x 4-Gitternetz	250
9.5	Zuordnung hydraulischer Parameter zu Ersatzleitwerten	256
9.6	Berücksichtigung einer Randbedingung 2. Art	261
9.7	Berücksichtigung einer Randbedingung 3. Art	262
9.8	Außerhalb des Knotens liegenden Randbedingung	265
9.9	Verhältnis von Tangente zu Sekante bei einem typischen Absenkungsvorgang	269
9.10	Parameterzuordnung bei Zeitquantisierung eines 1-D-Feldproblems	271
9.11	Berücksichtigung der Zeitquantisierung	273
9.12	Zeitquantisiert berechnete Grundwasserabsenkung einer Grabenanströmung	275
9.13	Zeitquantisiert berechneter Grundwasseranstieges einer Grabenströmung	275
9.14	Abhängigkeit des Zeitquantisierungsfehlers von der Zeitschrittweite	276
9.15	Ersatzschaltbild des Ortspunktes $P_{n,m}$	279

10.1 Grundwasserleiter mit Brunnen und Baugrube	287
10.2 Geschichteter Grundwasserleiter mit stationärem Strömungsregime	287
10.3 Geschichteter Grundwasserleiter mit instationärem Strömungsregime	288
10.4 Einbau eines Tunnelbauwerkes in einem Grundwasserleiter	288
10.5 Deichbauwerk mit Kerndichtung	289
11.1 Kopplung der Migrations- und Simulatormodelle	295
11.2 Modellklassen/ -unterklassen nach KRUG	296
11.3 Geräte- und programmtechnische Realisierung	299
11.4 Prozesscharakter der Modellbildung und Simulation	300
11.5 Grundsignalformen	305
11.6 Testsignale	310
11.7 Signalsynthese	312
11.8 Approximation beliebiger Signale durch Sprungsignale	313
11.9 Darstellungsformen von Signalen	315
11.10 System mit seiner Beziehung zur Umgebung	317
11.11 Übertragungsglied	318
11.12 Zusammenhang zwischen Zeit- und Bildbereich	319
11.13 Füllvorgang eines Behälters mit konstantem Volumenstrom	323
11.14 Füllvorgang eines Behälters mit variablem Volumenstrom	328
11.15 Gekoppelte Speicherkaskade	330
11.16 Grundformen des Übertragungsverhaltens	334
11.17 Zusammenschaltung linearer Übertragungsglieder	336
11.18 Reihenschaltung zweier PT_1 -Glieder	338

11.19	Realisierung eines PI-Gliedes	339
11.20	Realisierung eines PID-Gliedes	340
11.21	Rückkopplungssystem zur Wasserstandsregelung	341
12.1	Ersatzschaltbild eines Übertragungsgliedes mit Verzögerung 1. Ordnung . .	344
12.2	Übertragungsverhalten und Schaltung eines PT_1 -Gliedes	346
12.3	Bestimmung der Zeitkonstanten aus ihren Vielfachen	348
12.4	Tangentenschnittpunkt und Zeitkonstante	349
12.5	Ersatzschaltbild eines Übertragungsgliedes mit Verzögerung 2. Ordnung . .	350
12.6	Sprungantwortfunktion und Ersatzschaltung eines PT_2T_L -Gliedes	353
12.7	Kenngrößen der Sprungantwort	355
12.8	Bestimmung der Kenngrößen T_1 und T_2	356
12.9	Übertragungsglied 2. Ordnung (PT_2T_L)	359
12.10	Impulsantwortfunktion $g(t)$ für ein Verzögerungsglied 2. Ordnung	360
12.11	Impulsantwort eines Säulen-Durchlaufversuches	363
12.12	Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius	364
12.13	Approximation einer Funktion durch Impulse	367
12.14	Impulsantwortfunktion $g(t)$ für ein Verzögerungsglied 2. Ordnung	368
12.15	Überlagerung der einzelnen Sprungantwortfunktionen	370
12.16	Bildung des diskontinuierlichen Antwortsignals aus den Messwerten	375
12.17	Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius	378
13.1	Iterative Modellanpassung	387
14.1	Iterative Modellanpassung bei einem Pumpversuch	391
14.2	Programmsystem zur Pumpversuchsauswertung nach BEIMS/GRÄBER	393

14.3 Gütegebirge bei einer Pumpversuchsauswertung mit dem Suchverlauf von unterschiedlichen Startpunkten	396
14.4 Iterationsverhalten bei der Pumpversuchsauswertung	397
14.5 Strukturschema des Pumpversuchssimulators (BEIMS/MUCHA/GRÄBER)	402

Abkürzungen und Formelzeichen

Symbol	Einheit	Bedeutung
A	m^2	Fläche
a	$s \cdot m^{-2}$	geohydraulische Zeitkonstante
a	m	Lage des Grundwasserstauers
B	m	Speisungsfaktor
b	m	Breite
C	$g \cdot l^{-1}; \%$	Konzentration
DGL		Differentialgleichung
D	m	durchströmte Mächtigkeit
d	m	Schichtdicke, Abstand
E	V	Elektrodenpotential, Spannungsquelle
e^-	C	Elektron, elektrische Elementarladung, $e^- = -1,60210 \cdot 10^{-19}C$
F	C	FARADAYSche Konstante, $F = 96491,6C$
F		FOURIER-Transformierte
G	S	elektrischer Leitwert
g	$m \cdot s^{-2}$	Erdbeschleunigung, $g \approx 9,832m \cdot s^{-2}$ (Pol), $g \approx 9,780m \cdot s^{-2}$ (Äquator)
g		Gewichtsfunktion
GF		Gütefunktion

Symbol	Einheit	Bedeutung
GW		Grundwasser
GWBR		Grundwasserbeobachtungsrohr
GWL		Grundwasserleiter, Aquifer
GWÜ		Grundwasserüberwachung
GWPN		Grundwasserprobenahme
GWR		Grundwasserressource
H	m	Wasserstand, allgemein
H	m^2	Ersatzpotential
h	m	Grundwasserstand, überstauter Wasserstand
h	m, s	Schrittweite
h		Übergangsfunktion
I	A	elektrischer Strom
k	$m \cdot s^{-1}$	k_f -Wert, Durchlässigkeitsbeiwert
L	–	LAPLACE-Transformierte
LGS		Lineares Gleichungssystem
l	m	Länge
LF	$S \cdot cm^{-1}$	elektrische Leitfähigkeit von Flüssigkeiten
M	–	Häufigkeit

Symbol	Einheit	Bedeutung
ODE		Gewöhnliche Differentialgleichung
PDE		Partielle Differentialgleichung
p	$N \cdot m^{-2}$	Druck
Q	C	elektrische Ladung
Q	$m^3 \cdot s^{-1}$	Volumenstrom
R	Ω	elektrischer Widerstand
R		Regelstrecke
Re	–	REYNOLDS-Zahl
REV		Repräsentatives Einheitsvolumen
S	–	Speicherkoeffizient
S		Steuerstrecke
s	m	Weg
T	K	Temperatur, $\delta[^\circ C] = T[K] - 273,15K$
T	$m^2 \cdot s^{-1}$	Transmissibilität
t	s	Zeit
U	V	elektrische Spannung

Symbol	Einheit	Bedeutung
V	m^3	Volumen
\dot{V}	$m^3 \cdot s^{-1}$	Volumenstrom
v	$m \cdot s^{-1}$	Geschwindigkeit
$W(\sigma)$		THEISSchen Brunnenformel, Potenzreihe
w	—	Führungsgröße
x	m	Ortskoordinate
x	—	allgemeine Signalgröße
x	—	Regelgröße, Steuergröße
y	m	Ortskoordinate
y	—	Stellgröße
Z	m^2	Potentialdifferenz (Grundwasser)
z	m	Ortskoordinate, Höhe
z	—	Störgröße

Symbol	Einheit	Bedeutung
α	<i>Grad</i>	Winkelgrad
γ	–	EULER-Konstante, $\gamma \approx 0,5772156649$
δ	$^{\circ}C$	Temperatur, $\delta/^{\circ}C = T/K - 273,15K$
δ	–	DIRAC-Impuls
ε	$F \cdot m^{-1}$	Dielektrizitätskonstante
ε_0	$F \cdot m^{-1}$	Dielektrizitätskonstante des Vakuums, $\varepsilon_0 = 8,855 \cdot 10^{-12} F \cdot m^{-1}$
ε	–	allgemeine Fehlergröße
λ	<i>m</i>	Wellenlänge
λ^*	<i>m</i>	wirksame Randbedingungsentfernung
μ	$H \cdot m^{-1}$	Permeabilität
μ_0	$H \cdot m^{-1}$	Permeabilität des Vakuums, $\mu_0 = 1,2566 \cdot 10^{-6} H \cdot m^{-1}$
ρ	$g \cdot m^{-3}$	Dichte
ρ	$\Omega \cdot m^{-1}$	spezifischer elektrischer Widerstand
σ	–	Argument der THEISSchen Brunnenformel $W(\sigma)$
τ	<i>s</i>	Verzögerungszeit
Φ	m^2	GIRINSKIJ-Potential (Grundwasser)
φ	<i>V</i>	elektrisches Potential
\varkappa	$S \cdot m^2 \cdot m^{-1}$	spezifische elektrische Leitfähigkeit
\varkappa	$S \cdot cm^{-1}$	elektrische Leitfähigkeit von Flüssigkeiten
1		Einheitssprung

Teil I

Mathematische Grundlagen

Das Kapitel **Mathematische Grundlagen** baut unmittelbar auf die Grundlagen der Ausbildung Mathematik im Grundstudium auf und stellt im Wesentlichen eine Wiederholung ausgewählter, für die Lösung wasserwirtschaftlicher Aufgabenstellungen wichtiger Themen dar. Nach der Darstellung des bekannten Stoffes werden spezielle, weiterführende Themen behandelt.



Kapitel 1

Algebraische Grundlagen

1.1 Exponential- und logarithmische Ausdrücke

Die wichtigsten Umformungen von **Exponentialausdrücken** sind:

$$x^a \cdot x^b = x^{a+b} \quad (1.1)$$

$$\frac{x^a}{x^b} = x^{a-b}$$

$$(x^a)^b = x^{a \cdot b}$$

$$\sqrt[b]{x^a} = x^{\frac{a}{b}}$$

$$x^0 = 1$$

Exponentialausdrücke, in denen mehrere solcher Ausdrücke vorkommen, lassen sich durch Verwendung der Identität

$$x = a^{\log_a(x)} \quad \text{speziell gilt: } x = e^{\ln(x)} \quad (1.2)$$

zu Ausdrücken gleicher Basis umgestalten.

Für **logarithmische Ausdrücke** kann man folgende Regeln zur Umformung vorteilhaft einsetzen:

$$\ln(a \cdot b) = \ln(a) + \ln(b) \quad (1.3)$$

$$\ln\left(\frac{a}{b}\right) = \ln(a) - \ln(b)$$

$$\ln(x^b) = b \cdot \ln(x) \quad \text{speziell gilt: } \ln(e^b) = b \cdot \ln(e) = b, \text{ da: } \ln(e) = 1$$

$$\ln(\sqrt[b]{x}) = \frac{1}{b} \ln(x)$$

$$\log_x(1) = 0$$

$$\log_x(x) = 1 \quad \text{speziell gilt: } \lg(10) = 1, \ln(e) = 1$$

$$x^{\log_a y} = y^{\log_a x}$$

Aufgaben:

Vereinfachen Sie folgende Ausdrücke:

a)
$$\frac{(18a^2x)^4}{(27ax^2)^5} \cdot \frac{(15ax^2)^4}{(20a^3x)^2}$$

b)
$$\frac{0,004 \cdot 10^2 \cdot 0,2^3}{0,2 \cdot 10^{-3} \cdot 16}$$

c)
$$\frac{\sqrt{x} \cdot \sqrt[3]{x^2} \cdot \sqrt[10]{x}}{\sqrt[5]{x^3}}$$

d)
$$2 \log_{10} x^3 - 3 \log_{10} y^2$$

e)
$$(\ln u + 4 \ln v)$$

Stellen Sie folgende Formeln nach t um:

a)
$$I = I_0 \left(\exp \left(-\frac{t}{T} \right) \right)$$

b)
$$I = I_0 \left(1 + 9 \log 9 \frac{t}{T} \right)$$

c)
$$I = I_0 (e^{\mu t} - 1)$$

1.2 Matrizen

1.2.1 Grundlagen

Im Folgenden sollen die wichtigsten Rechenregeln für Matrizen aufgeführt werden:

- **Allgemeine Matrix**

Ein System von m mal n Elementen (z.B. Zahlen, Funktionen), die in m Zeilen und n Spalten angeordnet sind, heißt **Matrix** vom Typ (m, n) :

$$A = [a_{ij}] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mj} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \leftarrow i\text{-te Zeile} \quad (1.4)$$

↑
 j -te Spalte

- **Quadratische Matrix**

Sind in einer Matrix die Anzahl der Zeilen m und Spalten n gleich groß, d.h. gilt $m = n$, so ist die Matrix quadratisch. Die Elemente $a_{11}, a_{22} \cdots a_{nn}$ bilden die **Hauptdiagonale** und $a_{1n}, a_{2n-1}, a_{3n-2} \cdots a_{n1}$ entsprechend die **Nebendiagonale**.

- **Transponierte einer Matrix**

Wenn man Zeilen und Spalten einer Matrix \mathbf{A} vertauscht, nennt man die resultierende Matrix die **Transponierte** von \mathbf{A} und bezeichnet sie mit \mathbf{A}^T .

Allgemein kann geschrieben werden:

$$\mathbf{A} = [a_{jk}] \quad (1.5)$$

$$\mathbf{A}^T = [a_{jk}]^T = [a_{kj}]$$

speziell gilt $[a_{jj}] = [a_{kk}]$

Die Transponierte einer quadratischen Matrix entsteht, wenn die Elemente an der Diagonalen gespiegelt werden.

Bei einer **symmetrischen Matrix** ist die Transponierte gleich der Originalmatrix.

$$\mathbf{A}_s = \mathbf{A}_s^T \quad (1.6)$$

Bei einer **schief-symmetrischen** bzw. **antimetrischen** Matrix gilt:

$$\mathbf{A}_a = -\mathbf{A}_a^T \quad (1.7)$$

$$[a_{jk}] = -[a_{kj}]$$

$$[a_{jj}] = 0$$

Jede quadratische Matrix (\mathbf{A}_q) lässt sich in die Summe aus einer symmetrischen (\mathbf{A}_s) und einer antimetrischen (\mathbf{A}_a) Matrix zerlegen.

$$\mathbf{A}_q = \mathbf{A}_s + \mathbf{A}_a \quad (1.8)$$

$$\mathbf{A}_s = \frac{1}{2} \cdot (\mathbf{A}_q + \mathbf{A}_q^T)$$

$$\mathbf{A}_a = \frac{1}{2} \cdot (\mathbf{A}_q - \mathbf{A}_q^T)$$

Beispiele zur Berechnung einer transponierten Matrix:

1.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 4 \\ -3 & 0 & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 2 & -3 \\ 1 & 0 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 5 \\ 7 & 2 & 6 \\ 8 & 9 & 3 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 1 & 7 & 8 \\ 4 & 2 & 9 \\ 5 & 6 & 3 \end{bmatrix}$$

2.

$$\mathbf{A}_{sym} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 5 \\ 4 & 2 & 6 \\ 5 & 6 & 3 \end{bmatrix} = \mathbf{A}_{sym}^T$$

3.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 4 \\ 5 & 7 & 8 \\ -4 & 0 & 5 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 3 & 5 & -4 \\ -1 & 7 & 0 \\ 4 & 8 & 5 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_s + \mathbf{A}_a$$

$$\mathbf{A}_s = \frac{1}{2} \cdot \left(\begin{bmatrix} 3 & -1 & 4 \\ 5 & 7 & 8 \\ -4 & 0 & 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3 & 5 & -4 \\ -1 & 7 & 0 \\ 4 & 8 & 5 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 7 & 4 \\ 0 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}_a = \frac{1}{2} \cdot (\mathbf{A}_q - \mathbf{A}_q^T)$$

$$\mathbf{A}_a = \frac{1}{2} \cdot \left(\begin{bmatrix} 3 & -1 & 4 \\ 5 & 7 & 8 \\ -4 & 0 & 5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 & 5 & -4 \\ -1 & 7 & 0 \\ 4 & 8 & 5 \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} 0 & -3 & 4 \\ 3 & 0 & 4 \\ -4 & -4 & 0 \end{bmatrix}$$

• **Die Einheitsmatrix**

Eine quadratische Matrix, in der alle Elemente der Hauptdiagonalen gleich Eins und alle anderen Elemente Null sind, heißt Einheitsmatrix und wird mit \mathbf{E} bezeichnet. Es gilt:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.9)$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \quad (1.10)$$

$$\mathbf{E}^n = \mathbf{E}$$

- **Diagonalmatrix**

Eine Matrix, in der alle Elemente außer den Elementen der Hauptdiagonalen gleich Null sind, heißt **Diagonalmatrix**.

$$[a_{ii}] = \forall \neq 0 \quad (1.11)$$

Die Elemente der Hauptdiagonalen $[a_{ii}]$ können gleich oder ungleich Null sein. Damit gehören die Diagonalmatrizen zur Klasse der symmetrischen Matrizen.

- **Tridiagonalmatrix**

Besitzt eine quadratische Matrix die Eigenschaft, dass die Elemente der Hauptdiagonale und der beiden direkt benachbarten Diagonalen gleich oder ungleich Null sein können, dann spricht man von einer **tridiagonalen Matrix**.

$$[a_{ii}] = \forall \neq 0 \quad (1.12)$$

$$[a_{i-1j}] = \forall \neq 0$$

$$[a_{ij-1}] = \forall \neq 0$$

Im Allgemeinen gilt, dass tridiagonale Matrizen auch symmetrisch sind.

- **Die Bandmatrix**

In einer Bandmatrix ist eine große Anzahl von Nullelementen enthalten. Die Diagonale und ausgewählte Parallelen zur Diagonalen enthalten Elemente, die von Null verschieden sind. Die Erweiterung auf beliebig viele ($\leq n - 1$) benachbarte Diagonalen führt zu **Bandmatrizen**. Die Elemente der Matrix

$$[a_{ii}] = \forall \neq 0$$

$$[a_{i-1j}] = [a_{ij-1}] = \forall \neq 0$$

$$[a_{ki}] = [a_{ik}] = \forall \neq 0$$

sind alle auf einem diagonalen Band angeordnet.

Die **Bandbreite** charakterisiert die Breite des besetzten Bandes. Die "weiteste Entfernung" eines Elementes von der Hauptdiagonalen ist die Bandbreite, wobei die Hauptdiagonale mit gezählt wird.

Beispiel einer Bandmatrix:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & a_{1k} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & 0 & a_{2k+1} & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \cdots & 0 & a_{3k+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & 0 & 0 & a_{ij-1} & a_{ij} & a_{ij+1} & 0 \\ 0 & a_{k+12} & 0 & 0 & \ddots & \ddots & a_{m-1n} \\ 0 & 0 & a_{k+23} & 0 & \cdots & a_{mn-1} & a_{mn} \end{bmatrix}$$

In diesem Beispiel ist die Bandbreite gleich k .

1.2.2 Rechenregeln

- **Addition und Subtraktion von Matrizen**

Wenn $\mathbf{A} = [a_{jk}]$ und $\mathbf{B} = [b_{jk}]$ dieselbe Ordnung haben, d.h. gleiche Anzahl von Zeilen und Spalten, dann ist:

$$\mathbf{A} \pm \mathbf{B} = [a_{jk}] \pm [b_{jk}] \tag{1.13}$$

Beispiel der Addition von Matrizen:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 9 \end{bmatrix} \\ \mathbf{B} &= \begin{bmatrix} 3 & -15 \\ -2 & 10 \end{bmatrix} \\ \mathbf{A} + \mathbf{B} &= \begin{bmatrix} 4 + 3 & 6 - 15 \\ 6 - 2 & 9 - 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 & -9 \\ -4 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

- **Multiplikation und Division von Matrizen**

Wenn $\mathbf{A} = [a_{jk}]$ eine $m \times p$ Matrix und $\mathbf{B} = [b_{jk}]$ eine $p \times n$ Matrix sind, dann definiert man das Produkt $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ als die Matrix $\mathbf{C} = [c_{jk}]$, wobei \mathbf{C} von der Ordnung $m \times n$

ist, d. h. die Matrix **C** hat die gleiche **Anzahl von Zeilen wie die Matrix A** und die gleiche **Anzahl von Spalten wie die Matrix B**. Das Produkt $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ ist nur definiert, wenn die **Anzahl der Spalten von A** (p der $m \times p$ Matrix) mit der **Anzahl der Zeilen von B** (p der $p \times n$ Matrix) übereinstimmt.

Man spricht von einer Multiplikation von "Zeile mal Spalte". Die Zeilen von **A** werden mit den Spalten von **B** multipliziert. Nach dem FALKSchen Schema ergibt sich $\mathbf{C} = [c_{jk}] = \sum [a_{jl}] \cdot [b_{lk}]$ mit $j = 1 \cdots m$ und $k = 1 \cdots n$.

Bei der Multiplikation von $\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$ entsteht eine Matrix **C** mit einer Ordnung von $p \times p$. Dabei ist zu beachten, dass das **kommutative Gesetz nicht** gilt ($\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \neq \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$).

Bei **quadratischen Matrizen** sind **A, B** und **C** derselben Ordnung $m \times m$.

Die **Division** wird auf die Multiplikation zurückgeführt, indem von der Devisormatrix die **inverse Matrix** (siehe Seite 10) gebildet wird.

Beispiele der Multiplikation von Matrizen:

Gegeben:
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ -1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Gesucht: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ und $\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 \cdot 2 + 2 \cdot 0 + (4 \cdot (-1)) & 1 \cdot 1 + 2 \cdot 3 + 4 \cdot 2 \\ (-1 \cdot 2) + 0 \cdot 0 + (3 \cdot (-1)) & (-1 \cdot 1) + 0 \cdot 3 + 3 \cdot 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 15 \\ -5 & 5 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 \cdot 1 + (1 \cdot (-1)) & 2 \cdot 2 + 1 \cdot 0 & 2 \cdot 4 + 1 \cdot 3 \\ 0 \cdot 1 + (3 \cdot (-1)) & 0 \cdot 2 + 3 \cdot 0 & 0 \cdot 4 + 3 \cdot 3 \\ ((-1) \cdot 1) + (2 \cdot (-1)) & ((-1) \cdot 2) + 2 \cdot 0 & ((-1) \cdot 4) + (2 \cdot 3) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 4 & 11 \\ -3 & 0 & 9 \\ -3 & -2 & 2 \end{bmatrix} \neq \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$$

Gegeben: $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 9 \end{bmatrix}$ und $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 3 & -15 \\ -2 & 10 \end{bmatrix}$

Gesucht: $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} &= \begin{bmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 9 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 & -15 \\ -2 & 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (3 \cdot 4 - 2 \cdot 6) & (4 \cdot (-15) + 6 \cdot 10) \\ (3 \cdot 6 - 2 \cdot 9) & (6 \cdot (-15) + 9 \cdot 10) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Beachte:

Im Gegensatz zur Algebra der reellen Zahlen gilt bei der Matrizenmultiplikation das **kommutative Gesetz nicht**. $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \neq \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$.

Das **assoziative Gesetz** $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}$ und das **distributive Gesetz** $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}$ besitzen demgegenüber auch bei Matrizen ihre Gültigkeit.

Eine quadratische Matrix \mathbf{A} kann mit sich selbst multipliziert werden. Dann schreibt man: $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$. Damit erhält man die Potenzierung von Matrizen.

• **Die inverse Matrix**

Zwei quadratische Matrizen heißen zueinander invers, wenn ihr Produkt gleich der Einheitsmatrix ist:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{E} \tag{1.14}$$

Die inverse Matrix \mathbf{A}^{-1} kann genau dann gebildet werden, wenn die Determinante $D = \det \mathbf{A}$ (Kapitel 1.2.3 Determinante einer Matrix, Seite 13ff) der Matrix \mathbf{A} ungleich Null ($D \neq 0$) ist. Die inverse Matrix \mathbf{A}^{-1} wird gebildet, indem die Unterdeterminante U_{ij} zum Element a_{ij} durch die Determinante der Matrix $D = \det(\mathbf{A})$ dividiert wird. Mit der Unterdeterminante U_{ji} , zum Element a_{ji} gehörend, ergibt sich:

$$a_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{U_{ji}}{D} \tag{1.15}$$

Dabei muss der Wechsel zwischen Zeile und Spalte beachtet werden. Die Matrix der Unterdeterminanten wird transponiert. Weiterhin erfolgt ein Vorzeichenwechsel in Abhängigkeit vom Abstand zur Hauptdiagonalen a_{ii} der Matrix, d.h., ist die Summe zwischen i und j ungeradzahlig, so wird die Unterdeterminante mit -1 multipliziert.

An Hand einer zwei- und einer dreireihigen Matrix soll die Bildung der Inversen beispielhaft gezeigt werden.

Für eine zweireihige Matrix gilt:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad (1.16)$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{a_{22}}{D} & -\frac{a_{12}}{D} \\ -\frac{a_{21}}{D} & \frac{a_{11}}{D} \end{bmatrix} = \frac{1}{D} \begin{bmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$$

$$D = \det \mathbf{A} = a_{11} \cdot a_{22} - a_{21} \cdot a_{12}$$

Für eine dreireihige Matrix erhält man entsprechend:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad (1.17)$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{U_{11}}{D} & -\frac{U_{21}}{D} & \frac{U_{31}}{D} \\ -\frac{U_{12}}{D} & \frac{U_{22}}{D} & -\frac{U_{32}}{D} \\ \frac{U_{13}}{D} & -\frac{U_{23}}{D} & \frac{U_{33}}{D} \end{bmatrix} = \frac{1}{D} \begin{bmatrix} U_{11} & -U_{21} & U_{31} \\ -U_{12} & U_{22} & -U_{32} \\ U_{13} & -U_{23} & U_{33} \end{bmatrix}$$

$$D = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{31}a_{22}a_{13} - a_{32}a_{23}a_{11} - a_{33}a_{21}a_{12}$$

Beispiele zur Berechnung von inversen Matrizen:

1. Wenn $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$ ist, dann ist $D = 5 \cdot 2 - 2 \cdot 4 = 2$ und

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & -4 \\ -2 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -1 & 2,5 \end{bmatrix}$$

2. Gesucht ist die inverse Matrix von

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Die Determinante von \mathbf{A} kann beispielsweise nach der zweiten Zeile entwickelt werden:

$$\begin{aligned} D &= -5 \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} + 2 \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} - 0 \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} \\ &= -5(-2 + 1) + 2(-4 + 1) = -1 \end{aligned}$$

Die Unterdeterminanten sind:

$$U_{11} = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = -4; \quad U_{12} = \begin{vmatrix} 5 & 0 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = -10; \quad U_{13} = \begin{vmatrix} 5 & 2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 3$$

$$U_{21} = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = -1; \quad U_{22} = \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = -3; \quad U_{23} = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 1$$

$$U_{31} = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 0 \end{vmatrix} = 2; \quad U_{32} = \begin{vmatrix} -2 & 1 \\ 5 & 0 \end{vmatrix} = 5; \quad U_{33} = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 5 & 2 \end{vmatrix} = -1$$

$$\text{Dann ist: } \mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -2 \\ -10 & 3 & 5 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

1.2.3 Determinante einer Matrix

Einer quadratischen Matrix \mathbf{A} kann eine Zahl, der Wert ihrer Determinanten $D = \det \mathbf{A}$, zugeordnet werden. Die Determinante n -ter Ordnung

$$D = \det \mathbf{A} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \quad (1.18)$$

wird mit Hilfe des **Entwicklungssatzes** von LAPLACE rekursiv definiert. Dabei kann die Entwicklung nach den Elementen der Zeilen oder Spalten erfolgen.

1. Entwicklung nach den Elementen der i -ten Zeile

$$D = \det \mathbf{A} = \sum_{\nu=1}^n a_{i\nu} A_{i\nu} \quad i \text{ fest} \quad (1.19)$$

2. Entwicklung nach den Elementen der k -ten Spalte

$$D = \det \mathbf{A} = \sum_{\mu=1}^n a_{\mu k} A_{\mu k} \quad k \text{ fest} \quad (1.20)$$

Hierbei bedeutet A_{ik} die zum Element a_{ik} gehörende **Adjunkte**, d.h. die mit dem Faktor $(-1)^{i+k}$ (SSchachbrettregel") multiplizierte **Unterdeterminante** U_{ik} des Elementes a_{ik} . Die Unterdeterminante U_{ik} des Elementes a_{ik} erhält man aus der Determinante n -ter Ordnung durch Streichen der i -ten Zeile und k -ten Spalte; sie hat die Ordnung $n - 1$. Damit ist die Unterdeterminante stets um einen Rang niedriger als die zugehörige Determinante. Der **Rang** einer Matrix wird durch die höchste Ordnung bestimmt, die deren nicht verschwindende Unterdeterminante haben kann.

Für eine dreireihige Matrix \mathbf{A} gilt:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad (1.21)$$

dann ist z.B. für das Element a_{11} die Unterdeterminante:

$$U_{11} = \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32} \quad (1.22)$$

Für dreireihige Determinanten kann auch die **Regel von SARRUS** vorteilhafter Weise angewendet werden. Dabei werden die beiden ersten Spalten fiktiv rechts neben die Determinante geschrieben und anschließend die Summe der Diagonalprodukte der "Nebendiagonalen" von der der "Hauptdiagonalen" abgezogen.

$$\begin{aligned}
 A = \det A &= \begin{array}{ccc|cc}
 a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{11} & a_{12} \\
 a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{21} & a_{22} \\
 a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{31} & a_{32}
 \end{array} \\
 &= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33}
 \end{aligned}$$

Hinweis:

Zur Entwicklung der Determinanten ist es immer günstig, die Zeile bzw. die Spalte mit den meisten Null-Elementen auszuwählen.

Besteht die Matrix nur aus einem Element, $\mathbf{A}=[a]$, so gilt: $\det \mathbf{A} = a$.

1.2.4 Aufgaben zur Berechnung von Matrizen

1. Bilden Sie mit

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ -2 & -1 \end{bmatrix}$$

folgende Ausdrücke:

- a) $2\mathbf{A} + 3\mathbf{B}$ b) $\mathbf{A} - 2\mathbf{B} - 3\mathbf{C}$ c) $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$
 d) $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^T$ e) $\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$ f) $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}$
 g) $(\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{C}$ h) $\mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$ i) $\mathbf{A}^T + \mathbf{B}^T$

2. Bilden Sie für die folgenden Matrizen $\mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}^T$:

a) $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 & 3 \end{bmatrix}$

b) $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ -2 & 1 \end{bmatrix}$ $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & -3 \\ 3 & -8 \end{bmatrix}$

3. Bilden Sie die inverse Matrix \mathbf{A}^{-1} :

$$\text{a) } \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 5 \\ 2 & 7 \end{bmatrix}$$

$$\text{b) } \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{c) } \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 \\ -4 & -2 & 3 \\ 4 & 3 & 2 \end{bmatrix}$$

1.3 Lineare Gleichungssysteme (LGS)

Lineare Gleichungssysteme spielen in der mathematischen Behandlung von ein-, zwei- oder dreidimensionalen Feldproblemen, so auch solcher der Hydrologie und Hydrogeologie, eine große Rolle. Solche Gleichungssysteme mit einer sehr großen Anzahl von Unbekannten und Gleichungen, die in die Größenordnung von Millionen gehen können, entstehen u.a. durch Quantisierungsmethoden. Dabei werden die kontinuierlichen Feldprobleme, im Allgemeinen Potentialfelder, in diskontinuierliche Teilprozesse zerlegt. Diese können dann durch lineare, nichtlineare oder linearisierte Gleichungen beschrieben werden. Die Gleichungssysteme haben folgende Gestalt:

$$\begin{array}{cccccc}
 a_{11}x_1 & +a_{12}x_2 & +a_{13}x_3 & +\cdots a_{1j}x_j & \cdots + a_{1n}x_n & = r_1 \\
 a_{21}x_1 & +a_{22}x_2 & +a_{23}x_3 & +\cdots a_{2j}x_j & \cdots + a_{2n}x_n & = r_2 \\
 a_{31}x_1 & +a_{32}x_2 & +a_{33}x_3 & +\cdots a_{3j}x_j & \cdots + a_{3n}x_n & = r_3 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 a_{i1}x_1 & +a_{i2}x_2 & +a_{i3}x_3 & +\cdots a_{ij}x_j & \cdots + a_{in}x_n & = r_i \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 a_{m1}x_1 & +a_{m2}x_2 & +a_{m3}x_3 & +\cdots a_{mj}x_j & \cdots + a_{mn}x_n & = r_m
 \end{array} \tag{1.23}$$

In diesem Gleichungssystem sind x_j , mit $j = 1, \dots, n$, die n Unbekannten und r_i , mit $i = 1, \dots, m$, die m Bekannten der rechten Seite. Die a_{ij} mit $i = 1, \dots, m$ und $j = 1, \dots, n$ werden als Koeffizienten bezeichnet. Damit hat man für n Unbekannte m Gleichungen.

Ist $n = m$, so ist das Gleichungssystem eindeutig lösbar, es ist **bestimmt**. Für $n < m$ liegt ein so genanntes **überbestimmtes Gleichungssystem** vor, wofür es meist eine Näherungslösung gibt, die alle Gleichungen bestmöglichst erfüllt. Im Fall $n > m$ existieren mehrere Lösungen, d.h. das Gleichungssystem ist nicht eindeutig lösbar, es ist **unbestimmt**.

Durch die Einführung der Matrixschreibweise kann man sich Schreibarbeit ersparen und gleichzeitig die Regeln der Matrizenrechnung zunutze machen.

Damit kann obiges Gleichungssystem in folgender Form notiert werden:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R} \tag{1.24}$$

Darin bedeutet \mathbf{A} die Koeffizientenmatrix, \mathbf{X} der Lösungsvektor und \mathbf{R} die rechte Seite als Spaltenvektor:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_n \end{bmatrix}$$

Zur Lösung derartiger Matrizengleichungen bzw. Gleichungssysteme werden verschiedene Methoden benutzt.

Die relativ einfachen direkten Lösungsmethoden sind meistens nicht trivial behandelbar, da sich die Bildung der inversen Koeffizientenmatrix bei höherem Rang als kompliziert erweisen kann. Bei den Lösungsmethoden unterscheidet man zwischen den direkten Gesamtschrittverfahren und den iterativen Gleichungslösern. Die Verfahren erklären sich aus ihren Begriffen. Bei den Gesamtschrittverfahren wird auf der Basis algebraischer Umformungen das Gleichungssystem so weit separiert, dass zum Schluss eine Gleichung mit nur einer Unbekannten übrig bleibt. Im Folgenden werden einige gängige Vertreter beider Methoden aufgezeigt.

1.3.1 Gesamtschrittverfahren

1.3.1.1 Eliminationsverfahren nach GAUSS

Bei dem **Eliminationsverfahren nach GAUSS** wird versucht, durch sukzessives Einsetzen auf eine Gleichung mit einer Unbekannten zu kommen.

Im Ergebnis der Elimination ist das Gleichungssystem

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

in ein Gleichungssystem

$$\mathbf{A}' \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}'$$

mit einer oberen Dreiecksmatrix \mathbf{A}' und \mathbf{R}'

$$\mathbf{A}' = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2j} & \cdots & a'_{2n} \\ 0 & 0 & a'_{33} & a'_{34} & a'_{3j} & \cdots & a'_{3n} \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a'_{ij} & a'_{ij+1} & a'_{in} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & a'_{m-1n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a'_{mn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{R}' = \begin{bmatrix} r_1 \\ r'_2 \\ r'_3 \\ \vdots \\ r'_j \\ r'_{n-1} \\ r'_n \end{bmatrix} \quad (1.25)$$

übergegangen. Die oberste Zeile, bzw. oberste Gleichung bleibt unverändert. Die darunter liegenden entstehen, indem die $(j - 1)$ -Gleichung mit einem Faktor fak_j multipliziert und von der j -Gleichung subtrahiert wird. Für die zweite Zeile bzw. die zweite Gleichung gilt:

$$fak_2 = \frac{a_{i2}}{a_{i1}} \quad (1.26)$$

bzw. allgemein

$$fak_j = \frac{a'_{ij}}{a'_{ij-1}} \quad (1.27)$$

Damit kann die unterste Zeile/Gleichung gelöst werden. Diese Lösung wird rückführend in alle anderen Gleichungen eingesetzt. Diese Rücksubstitution liefert allgemein für den Wert x_i :

$$x_n = \frac{r'_n}{a'_{mn}} \quad (1.28)$$

$$x_i = \frac{1}{a'_{ii}} \left(r'_i - \sum_{j=i+1}^n a'_{ij} x_j \right)$$

Damit lässt sich die Berechnung des Lösungsvektors \mathbf{X} gut algorithmieren.

Beispiel zur Anwendung des GAUSSschen Eliminationsverfahrens:

Zu lösen ist das System:

$$2x - 3y + 4z = 19$$

$$4x - 4y + 3z = 22$$

$$-6x - y + 5z = 7$$

Die Koeffizienten und absoluten Glieder sind in folgendem Schema wiedergegeben:

x	y	z	1
2	-3	4	19
4	-4	3	22
-6	-1	5	7

Die zur Elimination dienende Zeile (im Beispiel - erste Zeile) wird durch den Buchstaben E gekennzeichnet. Vor den Zeilen, in denen mit Hilfe von E eine Variable eliminiert werden soll, ist anzugeben, mit welchem Faktor die E -Zeile zu multiplizieren und zur entsprechenden Zeile zu addieren ist, damit sich als neuer Koeffizient der betreffenden Variable eine Null ergibt. Die zu addierenden Vielfachen von E können noch neben den betreffenden Elementen vermerkt werden:

	x	y	z	1
E	2	-3	4	19
-2	$4 - 4$	$-4 + 6$	$3 - 8$	$22 - 38$
3	$-6 + 6$	$-1 - 9$	$5 + 12$	$7 + 57$

Mit der so veränderten 2. und 3. Zeile

x	y	z	1
0	2	-5	-16
0	-10	17	64

ist analog zu verfahren:

	x	y	z	1
E	0	2	-5	-16
5	0	$-10 + 10$	$17 - 25$	$64 - 80$

Die beiden E -Zeilen und die letzte Zeile enthalten die Koeffizienten und Absolutglieder des neuen Systems:

$$\begin{bmatrix} 2 & -3 & 4 \\ 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & -8 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 19 \\ -16 \\ -16 \end{bmatrix}$$

$$2x - 3y + 4z = 19$$

$$2y - 5z = 16$$

$$8z = 16$$

Daraus folgt durch sukzessives Einsetzen die Lösung:

$$z = 2, \quad y = -3, \quad x = 1$$

Grundsätzlich sollte nach jeder Lösung die Probe gemacht werden, ob die Lösung auch das Gleichungssystem, der Aufgabenstellung erfüllt.

$$2x - 3y + 4z = 19$$

$$4x - 4y + 3z = 22$$

$$-6x - y + 5z = 7$$

$$2 \cdot 1 - 3 \cdot (-3) + 4 \cdot 2 \stackrel{?}{=} 19$$

$$19 = 19$$

$$4 \cdot 1 - 4 \cdot (-3) + 3 \cdot 2 \stackrel{?}{=} 22$$

$$22 = 22$$

$$-6 \cdot 1 - (-3) + 5 \cdot 2 \stackrel{?}{=} 7$$

$$7 = 7$$

Damit sind die gefundenen Werte der Lösung richtig.

1.3.1.2 CRAMERSche Regel

Bei dem Verfahren nach der CRAMERSchen Regel wird die Lösung der Matrixgleichung durch die Berechnung von Determinanten herbeigeführt. Die Elemente des Lösungsvektors \mathbf{X} ergeben sich zu:

$$x_i = \frac{D_i}{D} \quad (1.29)$$

$D = \det \mathbf{A}$ ist die Koeffizientendeterminante der Koeffizienten Matrix \mathbf{A} . D_i steht für die CRAMERSche Determinante. Diese entsteht aus der Determinante $D = \det \mathbf{A}$ der Matrix \mathbf{A} in Folge des Ersetzens der i -ten Spalte durch die rechte Seite, den Vektor \mathbf{R} . Dieses Verfahren hat nur praktische Bedeutung für kleine Matrizen bzw. für Matrizen, die sehr viele Nullstellen enthalten.

Beispiel zur Anwendung der CRAMERSchen Regel:

Gesucht ist die Lösung des linearen Gleichungssystems (LGS) unter Benutzung der CRAMERSchen Regel:

$$2x + y - z = 0$$

$$5x + 2y = 8$$

$$x + y - 2z = -5$$

In Matrizenform wird dieses LGS folgendermaßen geschrieben:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 8 \\ -5 \end{bmatrix}$$

bzw.

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

mit

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Die Determinante $D = \det \mathbf{A}$ von der Matrix \mathbf{A} kann nach der zweiten Zeile entwickelt werden:

$$\begin{aligned}
 D &= \begin{vmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{vmatrix} \\
 &= -5 \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} + 2 \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} - 0 \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} \\
 &= -5(-2 + 1) + 2(-4 + 1)
 \end{aligned}$$

$$D = -1$$

Die CRAMERSche Determinanten sind:

$$D_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 8 & 2 & 0 \\ -5 & 1 & -2 \end{vmatrix} = -1 \begin{vmatrix} 8 & 0 \\ -5 & -2 \end{vmatrix} - 1 \begin{vmatrix} 8 & 2 \\ -5 & 1 \end{vmatrix} = -2$$

$$D_y = \begin{vmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 5 & 8 & 0 \\ 1 & -5 & -2 \end{vmatrix} = 2 \begin{vmatrix} 8 & 0 \\ -5 & -2 \end{vmatrix} - 1 \begin{vmatrix} 5 & 8 \\ 1 & -5 \end{vmatrix} = 1$$

$$D_z = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 5 & 2 & 8 \\ 1 & 1 & -5 \end{vmatrix} = 2 \begin{vmatrix} 2 & 8 \\ 1 & -5 \end{vmatrix} - 1 \begin{vmatrix} 5 & 8 \\ 1 & -5 \end{vmatrix} = -3$$

Damit ist die Lösung:

$$\begin{aligned}
 x &= \frac{D_x}{D} & y &= \frac{D_y}{D} & z &= \frac{D_z}{D} \\
 x &= 2 & y &= -1 & z &= 3
 \end{aligned}$$

Grundsätzlich sollte nach jeder Lösung die Probe gemacht werden, ob die Lösung auch das

Gleichungssystem, der Aufgabenstellung erfüllt.

$$2x + y - z = 0$$

$$5x + 2y = 8$$

$$x + y - 2z = -5$$

$$2 \cdot 2 + (-1) - 3 \stackrel{?}{=} 0$$

$$0 = 0$$

$$5 \cdot 2 + 2 \cdot (-1) \stackrel{?}{=} 8$$

$$8 = 8$$

$$2 + (-1) - 2 \cdot 3 \stackrel{?}{=} -5$$

$$-5 = -5$$

Damit sind die gefundenen Werte der Lösung richtig.

1.3.1.3 Bildung der inversen Matrix

Die Auflösung eines LGS in Matrixschreibweise nach dem Lösungsvektor \mathbf{X} lautet:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

$$(\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A}) \cdot \mathbf{X} = (\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{R})$$

$$\mathbf{X} = (\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{R}) \quad (1.30)$$

$$\text{mit } (\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A}) = \mathbf{E}$$

Beispiel zur Anwendung der inverser Koeffizientenmatrix \mathbf{A}^{-1} :

Gesucht ist die Lösung des gleichen LGS (siehe vorheriges Beispiel - LGS, Seite 23) mit Hilfe der inversen Matrix.

$$2x + y - z = 0$$

$$5x + 2y = 8$$

$$x + y - 2z = -5$$

In Matrizenform wird dieses LGS folgendermaßen geschrieben:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 8 \\ -5 \end{bmatrix}$$

bzw.

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

mit

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Die Determinante $D = \det \mathbf{A}$ von der Matrix \mathbf{A} kann nach der zweiten Zeile entwickelt werden:

$$\begin{aligned}
 D &= \begin{vmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 5 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \end{vmatrix} \\
 &= -5 \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} + 2 \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} - 0 \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} \\
 &= -5(-2 + 1) + 2(-4 + 1) \\
 D &= -1
 \end{aligned}$$

Die inverse Matrix von \mathbf{A} ist (siehe Beispiel - Bildung der inversen Matrix, Seite 11):

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -2 \\ -10 & 3 & 5 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Dann ist:

$$\mathbf{X} = (\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{R})$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{X} &= \begin{bmatrix} 4 & -1 & -2 \\ -10 & 3 & 5 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 8 \\ -5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} \\
 x &= 2, \quad y = -1, \quad z = 3
 \end{aligned}$$

Grundsätzlich sollte nach jeder Lösung die Probe gemacht werden, ob die Lösung auch das Gleichungssystem, der Aufgabenstellung erfüllt. Die gefundenen Werte sind die selben wie beim Beispiel zur Anwendung der CRAMER-Methode. Damit kann auf eine explizite Probe verzichtet werden.

1.3.1.4 LU-Zerlegung

Die Methode der so genannten **LU-Zerlegung** geht davon aus, dass die quadratische Matrix **A** des Gleichungssystems

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

als Produkt zweier Matrizen **L** und **U** geschrieben werden kann:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{A} \tag{1.31}$$

Dabei ist **L** (lower) die untere Dreiecksmatrix und **U** (upper) die obere.

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m1} & l_{m2} & \cdots & l_{mn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Unter der Bedingung, dass die Matrix **A** quadratisch ist, ist $m = n$.

Damit erhält die Matrizengleichung folgende Gestalt:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = (\mathbf{L} \cdot \mathbf{U}) \cdot \mathbf{X} = \mathbf{L} \cdot (\mathbf{U} \cdot \mathbf{X}) = \mathbf{L} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{R} \tag{1.32}$$

So kann die Ausgangsgleichung in zwei Gleichungen zerlegt werden, die einfache lösbare Dreiecksmatrizen enthalten. Zuerst wird eine Gleichung nach **Y** gelöst. Dieser Lösungsvektor **Y** dient dann als rechte Seite für die Bestimmung des ursprünglichen Lösungsvektors **X**.

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{R} \tag{1.33}$$

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{Y}$$

Für die erste Lösung wird die Vorwärtssubstitution benutzt:

$$y_1 = \frac{r_1}{l_{11}} \tag{1.34}$$

$$y_i = \frac{1}{l_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \right) \text{ mit } i = 2, 3, \dots, n$$

Die zweite Lösung, den gesuchten Vektor **X**, erhält man durch die Rückwärtssubstitution:

$$x_n = \frac{y_n}{u_{nn}} \tag{1.35}$$

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j \right) \text{ mit } i = n-1, n-2, \dots, 1$$

Bei der Bestimmung der Elemente der L- und U-Matrix geht man von der Definitionsgleichung aus:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{A} \quad \text{bzw.} \quad (1.36)$$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m1} & l_{m2} & \cdots & l_{mn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad (1.37)$$

Wenn diese beiden Matrizen multipliziert werden und ein Elementevergleich gemacht wird, ergibt sich ein kompliziertes Gleichungssystem mit $m \cdot n$ Unbekannten. Diese Schwierigkeit wird umgangen, indem die Hauptdiagonalelemente l_{ii} der L-Matrix zu Eins gesetzt werden.

$$[l_{ii}] = 1 \quad (1.38)$$

Damit erhält man folgendes einfache Berechnungsschema für die Elemente:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m1} & l_{m2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad (1.39)$$

$$\begin{bmatrix} 1 \cdot u_{11} & 1 \cdot u_{12} & \cdots & 1 \cdot u_{1n} \\ l_{21} \cdot u_{11} & l_{21} \cdot u_{12} + 1 \cdot u_{22} & \cdots & l_{21} \cdot u_{1n} + 1 \cdot u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{m1} \cdot u_{11} & l_{m1} \cdot u_{12} + l_{m2} \cdot u_{22} & \cdots & l_{m1} \cdot u_{1n} + \cdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad (1.40)$$

Beispiel zur Lösung eines Gleichungssystems mittels der LU-Zerlegung:

$$-3x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 6$$

$$9x_1 - 2x_2 + 10x_3 = -10$$

$$6x_1 + 8x_2 + 14x_3 = 22$$

$$\implies \mathbf{A} = \begin{bmatrix} -3 & 2 & -3 \\ 9 & -2 & 10 \\ 6 & 8 & 14 \end{bmatrix}$$

Ansatz: $l_{ii} = 1$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{A}$$

Aus dem Elementevergleich erhält man:

$$1 \cdot u_{11} + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = -3 \implies u_{11} = -3$$

$$l_{21} \cdot u_{11} + 1 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = 9 \implies l_{21} = -3$$

$$l_{31} \cdot u_{11} + l_{32} \cdot 0 + 1 \cdot 0 = 6 \implies l_{31} = -2$$

$$1 \cdot u_{12} + 0 \cdot u_{22} + 0 \cdot 0 = 2 \implies u_{12} = 2$$

$$l_{21} \cdot u_{12} + 1 \cdot u_{22} + 0 \cdot 0 = -2 \implies u_{22} = 4$$

$$l_{31} \cdot u_{12} + l_{32} \cdot u_{22} + 1 \cdot 0 = 8 \implies l_{32} = 3$$

Auf gleiche Art weiter findet man:

$$1 \cdot u_{13} + 0 \cdot u_{23} + 0 \cdot u_{33} = -3 \quad \implies \quad u_{13} = -3$$

$$l_{21} \cdot u_{13} + 1 \cdot u_{23} + 0 \cdot u_{33} = 10 \quad \implies \quad u_{23} = 1$$

$$\underbrace{l_{31} \cdot u_{13}}_6 + l_{32} \cdot u_{23} + 1 \cdot u_{33} = 14 \quad \implies \quad u_{33} = 5$$

Damit erhalten die Dreiecksmatrizen folgende Gestalt:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -3 & 1 & 0 \\ -2 & 3 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} -3 & 2 & -3 \\ 0 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

Über die Zwischenlösung \mathbf{Y} lässt sich der Lösungsvektor \mathbf{X} berechnen:
Allgemein gilt:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$$

$$\mathbf{L} \cdot \underbrace{\mathbf{U} \cdot \mathbf{X}}_{\mathbf{Y}} = \mathbf{R} \quad \text{mit} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{R}$$

$$1 \cdot y_1 + 0 \cdot y_2 + 0 \cdot y_3 = 6$$

$$-3 \cdot y_1 + 1 \cdot y_2 + 0 \cdot y_3 = -10$$

$$-2 \cdot y_1 + 3 \cdot y_2 + 1 \cdot y_3 = 22$$

$$\begin{aligned} y_1 &= 6 \\ y_2 &= 8 \\ y_3 &= 10 \end{aligned} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 6 \\ 8 \\ 10 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{Y}$$

$$-3 \cdot x_1 + 2 \cdot x_2 - 3 \cdot x_3 = 6$$

$$0 \cdot x_1 + 4 \cdot x_2 + 1 \cdot x_3 = 8$$

$$0 \cdot x_1 + 0 \cdot x_2 + 5 \cdot x_3 = 10$$

$$\begin{array}{l} x_1 = -3 \\ x_2 = \frac{3}{2} \\ x_3 = 2 \end{array} \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} -3 \\ \frac{3}{2} \\ 2 \end{bmatrix}$$

Probe:

$$-3x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 6$$

$$9x_1 - 2x_2 + 10x_3 = -10$$

$$6x_1 + 8x_2 + 14x_3 = 22$$

$$-3 \cdot (-3) + 2 \cdot \frac{3}{2} - 3 \cdot 2 \stackrel{?}{=} 6$$

$$6 = 6$$

$$9 \cdot (-3) - 2 \cdot \frac{3}{2} + 10 \cdot 2 \stackrel{?}{=} -10$$

$$-10 = -10$$

$$6 \cdot (-3) + 8 \cdot \frac{3}{2} + 14 \cdot 2 \stackrel{?}{=} 22$$

$$22 = 22$$

1.3.1.5 CHOLESKY-Verfahren

Bei dem CHOLESKY-Verfahren wird für den Spezialfall der symmetrischen Koeffizientenmatrix die Lösung der Matrixgleichung zurückgeführt auf die Lösung zweier Teilsysteme, indem die Koeffizientenmatrix in eine obere und eine untere Dreiecksmatrix zerlegt wird. Diese Zerlegung wird auch als Dekomposition bezeichnet.

Das CHOLESKY-Verfahren ist nicht allgemein anwendbar, sondern setzt voraus, dass die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} des Gleichungssystems

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

symmetrisch, d.h. $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$, und **positiv definit** sein muss. Positiv definit bedeutet, dass alle Elemente der Hauptdiagonalen größer Null $a_{ii} > 0$ sein müssen. Für die Aufgaben z.B. zur Simulation der Grundwasserströmung nach den Quantisierungsverfahren (FDM, FEM oder FVM) ist dies gegeben.

Bei dem CHOLESKY-Verfahren wird die symmetrische Matrix \mathbf{A} des Gleichungssystems als Produkt zweier Matrizen, einer **unteren Dreiecksmatrix** \mathbf{B} und einer **oberen**, die gleich der **Transponierten** \mathbf{B}^T der unteren ist, geschrieben:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^T = \mathbf{A} \quad (1.41)$$

Dabei ist \mathbf{B} eine obere Dreiecksmatrix, die für alle Elemente $b_{ik} = 0; i > k$ belegt ist. Das Gleichungssystem lautet somit:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

Setzt man

$$\mathbf{B}^T \cdot \mathbf{X} = \mathbf{Y} \quad (1.42)$$

und bestimmt die Elemente von \mathbf{B} durch Elementevergleich aus der Beziehung:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^T = \mathbf{A}$$

so kann \mathbf{Y} berechnet werden zu:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{R} \quad (1.43)$$

Die gesuchte Lösung \mathbf{X} ergibt sich aus der Rückrechnung entsprechend Gleichung 1.42.

Allgemein kann folgender Algorithmus zur Berechnung der Elemente von \mathbf{B} angegeben

werden:

$$\begin{aligned}
 b_{kj} &= \begin{cases} \left(a_{kj} - \sum_{l=1}^{k-1} b_{lj} b_{lk} \right) \frac{1}{b_{kk}} & \text{für } k+1 < j < n, \quad j = 2 \text{ bis } n \\ 0 & \text{für } k > j \end{cases} & (1.44) \\
 b_{jj} &= \sqrt{a_{jj} - \sum_{l=1}^{j-1} b_{lj}^2} & \text{für } j = 1 \text{ bis } n \\
 y_j &= \left(r_j - \sum_{l=1}^{j-1} b_{lj} y_l \right) \frac{1}{b_{jj}} & \text{für } j = 1 \text{ bis } n
 \end{aligned}$$

Das Verfahren nach CHOLESKY besitzt einige **Vorteile** gegenüber dem GAUSSschen Verfahren. So zeichnet sich z.B. das Verfahren dadurch aus, dass es numerisch sehr stabil arbeitet, da die Dominanz der Hauptdiagonalen durch das Ziehen der Quadratwurzel aus sehr kleinen Elementen, wodurch wieder größere entstehen, verstärkt wird. Besitzt die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} eine Bandstruktur, überträgt sich diese auch auf die Dreiecksmatrix. Der Algorithmus ist unabhängig von den Werten der rechten Seite. Damit kann die Lösung des Gleichungssystems mit geringem Aufwand für verschiedene Werte der rechten Seite (Rand- und Anfangswerte) wiederholt werden. Dies macht Variantenrechnungen sehr effektiv.

Für ein Gleichungssystem mit drei Gleichungen und drei Unbekannten ergibt sich folgendes Schema:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = r_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = r_2$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = r_3$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix}$$

Damit das CHOLESKY-Verfahren angewendet werden darf, muss geprüft werden, ob die Voraussetzungen, die symmetrische Koeffizientenmatrix ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$) und positive Definitheit ($a_{ii} > 0$), gegeben sind. Somit kann das Gleichungssystem auch in der Form geschrieben

werden:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix}$$

Laut Vorschrift für das CHOLESKY-Verfahren wird die Dreiecksmatrix \mathbf{B} eingeführt und die dazugehörige Transponierte gebildet:

$$\mathbf{B}^T = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & 0 & b_{33} \end{bmatrix} \tag{1.45}$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & 0 \\ b_{12} & b_{22} & 0 \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix}$$

Nach Gleichung 1.41 muss gelten:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & 0 \\ b_{12} & b_{22} & 0 \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & 0 & b_{33} \end{bmatrix}$$

Die Bestimmung der Elemente der Matrix \mathbf{B} erfolgt nach Multiplikation von \mathbf{B} mit \mathbf{B}^T durch einen Elementevergleich mit der Matrix \mathbf{A} :

$$\begin{aligned}
 b_{11} \cdot b_{11} &+ 0 \cdot 0 &+ 0 \cdot 0 &= a_{11} \\
 b_{11} \cdot b_{12} &+ 0 \cdot b_{12} &+ 0 \cdot 0 &= a_{12} \\
 b_{11} \cdot b_{13} &+ 0 \cdot b_{23} &+ 0 \cdot b_{33} &= a_{13} \\
 b_{12} \cdot b_{11} &+ b_{22} \cdot 0 &+ 0 \cdot 0 &= a_{12} \\
 b_{12} \cdot b_{12} &+ b_{22} \cdot b_{22} &+ 0 \cdot 0 &= a_{22} \\
 b_{12} \cdot b_{13} &+ b_{22} \cdot b_{23} &+ 0 \cdot b_{33} &= a_{23} \\
 b_{13} \cdot b_{11} &+ b_{23} \cdot 0 &+ b_{33} \cdot 0 &= a_{13} \\
 b_{23} \cdot b_{12} &+ b_{23} \cdot b_{22} &+ b_{33} \cdot 0 &= a_{23} \\
 b_{33} \cdot b_{13} &+ b_{23} \cdot b_{23} &+ b_{33} \cdot b_{33} &= a_{33}
 \end{aligned}$$

Man erkennt, dass in dem entstandenen Gleichungssystem auf Grund der Symmetrieeigenschaften der Koeffizientenmatrix einige Gleichungen redundant sind. Damit werden nur sechs dieser Gleichungen für die Bestimmung der Matrix \mathbf{B} benötigt.

$$\begin{aligned}
 a_{11} = b_{11} \cdot b_{11} &\implies b_{11} = \sqrt{a_{11}} \\
 a_{12} = b_{11} \cdot b_{12} &\implies b_{12} = \frac{a_{12}}{b_{11}} = \frac{a_{12}}{\sqrt{a_{11}}} \\
 a_{13} = b_{11} \cdot b_{13} &\implies b_{13} = \frac{a_{13}}{b_{11}} = \frac{a_{13}}{\sqrt{a_{11}}} \\
 a_{22} = b_{12}^2 + b_{22}^2 &\implies b_{22} = \sqrt{a_{22} - b_{12}^2} = \sqrt{a_{22} - \frac{a_{12}^2}{a_{11}}} \\
 a_{23} = b_{12} \cdot b_{13} + b_{22} \cdot b_{23} &\implies b_{23} = \frac{a_{23} - b_{12} \cdot b_{13}}{b_{22}} = \frac{a_{23} - \frac{a_{12} \cdot a_{13}}{a_{11}}}{\sqrt{a_{22} - \frac{a_{12}^2}{a_{11}}}} \\
 a_{33} = b_{13}^2 + b_{23}^2 + b_{33}^2 &\implies \left\{ \begin{aligned} b_{33} &= \sqrt{a_{33} - b_{13}^2 - b_{23}^2} \\ &= \sqrt{a_{33} - \frac{a_{13}^2}{a_{11}} - \frac{\left(a_{23} - \frac{a_{12} \cdot a_{13}}{a_{11}}\right)^2}{a_{22} - \frac{a_{12}^2}{a_{11}}}} \end{aligned} \right. \tag{1.46}
 \end{aligned}$$

Nachdem die Matrix \mathbf{B} und ihre Transponierte \mathbf{B}^T bestimmt wurden, kann die Hilfsmatrix \mathbf{Y} aus der Gleichung 1.43 berechnet werden:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{R}$$

$$\begin{bmatrix} b_{11} & 0 & 0 \\ b_{12} & b_{22} & 0 \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} b_{11} \cdot y_1 &= r_1 & \implies & y_1 = \frac{r_1}{b_{11}} \\ b_{12} \cdot y_1 + b_{22} \cdot y_2 &= r_2 & \implies & y_2 = \frac{r_2 - b_{12} \cdot y_1}{b_{22}} \\ b_{13} \cdot y_1 + b_{23} \cdot y_2 + b_{33} \cdot y_3 &= r_3 & \implies & y_3 = \frac{r_3 - b_{13} \cdot y_1 - b_{23} \cdot y_2}{b_{33}} \end{aligned} \quad (1.47)$$

Mit der bekannten \mathbf{B} Matrix und der Hilfsmatrix \mathbf{Y} kann jetzt mittels Gleichung 1.42 die Lösung des Gleichungssystems \mathbf{X} berechnet werden:

$$\mathbf{B}^T \cdot \mathbf{X} = \mathbf{Y}$$

$$\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & 0 & b_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} b_{33} \cdot x_3 &= y_3 & \implies & x_3 = \frac{y_3}{b_{33}} \\ b_{22} \cdot x_2 + b_{23} \cdot x_3 &= y_2 & \implies & x_2 = \frac{y_2 - b_{23} \cdot x_3}{b_{22}} \\ b_{11} \cdot x_1 + b_{12} \cdot x_2 + b_{13} \cdot x_3 &= y_1 & \implies & x_1 = \frac{y_1 - b_{12} \cdot x_2 - b_{13} \cdot x_3}{b_{11}} \end{aligned} \quad (1.48)$$

Beachte:

Die Gleichungen 1.46 bis 1.48 sowohl zur Bestimmung der Elemente der Matrix \mathbf{B} , als auch der Hilfsmatrix \mathbf{Y} , als auch des Lösungsvektor \mathbf{X} gelten entsprechend für alle Gleichungssysteme mit drei Zeilen und drei Unbekannten, wenn sie die Voraussetzungen für das CHOLESKY-Verfahren erfüllen. Für den jeweils aktuellen Fall müssen die Elemente der Koeffizientenmatrix und die der rechten Seite entsprechend eingesetzt werden. Diese Algorithmen lassen sich leicht auf beliebig große Gleichungssysteme erweitern.

Beispiele zur Anwendung des CHOLESKY-Verfahrens:

1. Das Verfahren soll exemplarisch an dem Gleichungssystem demonstriert werden, welches auch bei den anderen Verfahren benutzt wurde:

$$2x + y - z = 0$$

$$5x + 2y = 8$$

$$x + y - 2z = -5$$

Hier sind aber die Voraussetzungen zur Anwendung des CHOLESKY-Verfahrens, die positive Definitheit ($a_{ii} > 0$) und die Symmetrie ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$) nicht gegeben, und damit ist das Verfahren nicht anwendbar. ($a_{33} = -2$) und $\mathbf{A} \neq \mathbf{A}^T$

2. Als zweites Beispiel soll folgendes Gleichungssystem dienen:

$$9x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 6$$

$$2x_1 + 8x_2 + 4x_3 = -10$$

$$3x_1 + 4x_2 + 10x_3 = 22$$

Mit $\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$ ergibt sich:

$$\begin{bmatrix} 9 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 10 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -10 \\ 22 \end{bmatrix}$$

Nach Gleichung 1.41 muss gelten:

$$\begin{bmatrix} 9 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & 0 \\ b_{12} & b_{22} & 0 \\ b_{13} & b_{23} & b_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & 0 & b_{33} \end{bmatrix}$$

Die Bestimmung der Elemente der Matrix \mathbf{B} erfolgt durch einen Elementevergleich nach der Multiplikation von $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}^T$. Da nur sechs unbekannte Elemente bestimmt

werden müssen, werden nur sechs dieser Gleichungen für die Bestimmung der Matrix **B** benötigt.:

$$9 = b_{11} \cdot b_{11} \quad \Rightarrow \quad b_{11} = 3$$

$$2 = b_{11} \cdot b_{12} \quad \Rightarrow \quad b_{12} = \frac{2}{3}$$

$$3 = b_{11} \cdot b_{13} \quad \Rightarrow \quad b_{13} = 1$$

$$8 = b_{12}^2 + b_{22}^2 \quad \Rightarrow \quad b_{22} = \sqrt{8 - \frac{4}{9}} = \frac{\sqrt{60}}{3}$$

$$4 = b_{12} \cdot b_{13} + b_{22} \cdot b_{23} \quad \Rightarrow \quad b_{23} = \frac{4 - \frac{2}{3} \cdot 1}{\frac{\sqrt{60}}{3}} = \frac{10}{\sqrt{60}}$$

$$10 = b_{13}^2 + b_{23}^2 + b_{33}^2 \quad \Rightarrow \quad b_{33} = \sqrt{10 - 1 - \frac{100}{60}} = \frac{44}{6}$$

Nachdem die Matrix **B** und ihre Transponierte **B^T** bestimmt wurden, kann die Hilfsmatrix **Y** nach Gleichung 1.43 berechnet werden:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{R}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{\sqrt{60}}{3} & 0 \\ 1 & \frac{10}{\sqrt{60}} & \frac{44}{6} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -10 \\ 22 \end{bmatrix}$$

$$3 \cdot y_1 = 6 \quad \Rightarrow \quad y_1 = \frac{6}{3} = 2$$

$$\frac{2}{3} \cdot y_1 + \frac{\sqrt{60}}{3} \cdot y_2 = -10 \quad \Rightarrow \quad y_2 = \frac{-10 - \frac{2}{3} \cdot 2}{\frac{\sqrt{60}}{3}} = \frac{-34}{\sqrt{60}}$$

$$1 \cdot y_1 + \frac{10}{\sqrt{60}} \cdot y_2 + \frac{44}{6} \cdot y_3 = 22 \quad \Rightarrow \quad y_3 = \frac{22 - 1 \cdot 2 - \frac{10}{\sqrt{60}} \cdot \frac{-34}{\sqrt{60}}}{\frac{44}{6}} = \frac{558}{440} = \frac{297}{220}$$

Mit der bekannten Matrix **B** und der Hilfsmatrix **Y** kann jetzt mittels Gleichung 1.42 die Lösung des Gleichungssystems **X** berechnet werden:

$$\mathbf{B}^T \cdot \mathbf{X} = \mathbf{Y}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & \frac{2}{3} & 1 \\ 0 & \frac{\sqrt{60}}{3} & \frac{10}{\sqrt{60}} \\ 0 & 0 & \frac{44}{6} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ \frac{-34}{\sqrt{60}} \\ \frac{297}{220} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}\frac{44}{6} \cdot x_3 &= \frac{297}{220} \implies x_3 = \frac{\frac{297}{220}}{\frac{44}{6}} = \frac{837}{4840} \\ \frac{\sqrt{60}}{3} \cdot x_2 + \frac{10}{\sqrt{60}} \cdot x_3 &= \frac{-34}{\sqrt{60}} \implies x_2 = \frac{\frac{-34}{\sqrt{60}} - \frac{10}{\sqrt{60}} \cdot \frac{837}{4840}}{\frac{\sqrt{60}}{3}} \\ 3 \cdot x_1 + \frac{2}{3} \cdot x_2 + 1 \cdot x_3 &= 2 \implies x_1 = \frac{y_1 - b_{12} \cdot x_2 - b_{13} \cdot x_3}{b_{11}}\end{aligned}$$

1.3.1.6 Aufgaben zur Lösung von Gleichungssystemen nach den Gesamtschrittverfahren

Bestimmen Sie von den folgenden Gleichungssystemen ($\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R}$) den Lösungsvektor \mathbf{X} auf fünf Arten:

- Mittels des GAUSSSchen Eliminationsverfahrens,
- mit Hilfe der CRAMERSchen Regel,
- durch Bestimmung von $\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{R}$
- unter Verwendung der LU-Zerlegung und
- mittels des CHOLESKY-Verfahrens

$$\text{a) } \begin{aligned} \frac{x-2}{3} - \frac{y+2}{2} &= \frac{x-2y}{5} \\ \frac{x-y}{6} + \frac{3y+2}{4} &= \frac{x-2(y-1)}{3} \end{aligned}$$

$$\text{b) } \begin{aligned} 3x + y - z &= 2 \\ 2x - y + 4z &= 0 \\ x + 5y - 2z &= 1 \end{aligned}$$

$$\text{c) } \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 2 & 4 & -1 \\ -1 & 8 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\text{d) } \begin{aligned} x + y + z &= 3 \\ 2x + 4y + 8z &= 13 \\ 3x + 9y + 27z &= 34 \end{aligned}$$

$$\text{e) } \begin{aligned} 2x - 4y + 9w &= 25 \\ 3x - 3y - 3z + 11w &= 27 \\ 4x + 6y - 15z + 5w &= -5 \\ 3x + y - 4z + 12w &= 32 \end{aligned}$$

1.3.2 Iterative Verfahren

Bei den iterativen Verfahren wird für das Gleichungssystem zunächst eine Näherungslösung angenommen. Diese wird in das System eingesetzt, und mittels Optimierungsverfahren werden die Komponenten des Lösungsvektors bestmöglichst angepasst. Nach n Iterationsschritten wird sich die Näherung bis auf ein Residuum an die exakte Lösung angenähert haben. Die Iterationsverfahren spielen für große Gleichungssysteme die dominierende Rolle, da sie meist wesentlich schneller als die direkten Gleichungslöser sind.

Weit verbreitete Anwendungen sind die **CG-Verfahren (Conjugate Gradient Method)** und die **Mehrgitterverfahren**. Diese Verfahren sind vor allem im Zusammenhang mit Simulationsanwendungen auf Feldprobleme noch starken Weiterentwicklungen unterworfen. Bei den CG-Verfahren hat sich in den letzten Jahren die Verwendung von zusätzlichen Vorkonditionierungen (Preconditioning) durchgesetzt, mit der die Suchstrategie der iterativen Optimierungsschritte festgelegt wird. Im Allgemeinen bestimmt die Art der Vorkonditionierung wesentlich die Optimierungsgeschwindigkeit bzw. die Anzahl der Optimierungsschritte.

Geht man von der allgemeinen Matrizenschreibweise eines linearen Gleichungssystems aus, wobei \mathbf{X} als unbekannte Lösungsvektorbezeichnet wird,

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R} \quad (1.49)$$

so kann man eine bekannte Näherungslösung $\mathbf{X} + \delta\mathbf{X}$ in diese Gleichung einsetzen. Dies liefert eine rechte Seite, die von der vorgegebenen um den unbekanntem Wert $\delta\mathbf{R}$ abweicht.

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{X} + \delta\mathbf{X}) = \mathbf{R} + \delta\mathbf{R} \quad (1.50)$$

Subtrahiert man Gleichung 1.49 von Gleichung 1.50, so erhält man:

$$\mathbf{A} \cdot \delta\mathbf{X} = \delta\mathbf{R} \quad (1.51)$$

Bzw. mit obiger Gleichung 1.50:

$$\mathbf{A} \cdot \delta\mathbf{X} = \mathbf{A} \cdot (\mathbf{X} + \delta\mathbf{X}) - \mathbf{R} \quad (1.52)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist bekannt, da $\mathbf{X} + \delta\mathbf{X}$ die bekannte Näherungslösung ist. Das Ziel besteht jetzt darin, die rechte Seite zu Null zu machen, indem ein neues $\delta\mathbf{X}$ gefunden wird. Dies kann durch Lösen der Matrixgleichung (siehe Abschnitt 1.3.1, Seite 18) erfolgen oder mittels gezielter Optimierung, wie z. B. beim CG-Verfahren.

Das **CG-Verfahren** kann allgemein für lineare, quadratische, symmetrische Matrizen ($m = n$) sehr gut angewendet werden. Der Grundgedanke besteht darin, dass eine Funktion

$$f(x) = \frac{1}{2}\mathbf{X} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{X} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{X}$$

zu minimieren ist. Die Funktion besitzt dann ein Minimum, wenn der Gradient (siehe Abschnitt 2.2) gleich Null ist:

$$\nabla f(x) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{X} - \mathbf{R} \Rightarrow 0 \quad (1.53)$$

Dieses Minimum kann gefunden werden, wenn man mittels einer Suchrichtung \mathbf{p}_k eine Funktion $f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k)$ formuliert. Dabei bedeutet der Index k die Anzahl der durchlaufenen Suchschleifen.

1.3.3 Überbestimmte Gleichungssysteme ($m > n$)

Im Gegensatz zu den bisher beschriebenen Verfahren sollen hier Lösungsansätze für überbestimmte Gleichungssysteme beschrieben werden. In diesem Fall existieren mehr Gleichungen als Unbekannte, d.h., m ist größer als n ($m > n$). Dieser Fall tritt z. B. auf, wenn mathematische Modelle an Messwerte angepasst werden sollen. Ein typischer Fall ist dabei die Verwendung des quantisierten (diskreten) **Faltungintegrals** (siehe Abschnitt 12.3 Faltungintegral, Seite 365ff).

Eine gängige Methode ist, diese Aufgabe als Optimierung anzusehen, wobei versucht wird, die freien Parameter, d.h. den Lösungsvektor \mathbf{X} , an die Messwerte anzupassen. Die meisten Verfahren unterscheiden sich dabei in der Aufbereitung des Optimierungsproblems und in der Wahl der Optimierungsstrategie.

Die **SVD-Methode (Singular Value Decomposition)** geht dabei in folgender Weise vor. Gegeben ist die Matrixgleichung:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{R} \quad \text{bzw.} \quad [a_{ij}] \cdot [x_i] = [b_i] \quad m > n$$

In diesem Fall kann die Koeffizientenmatrix \mathbf{A} zerlegt werden in

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot [w_{ii}] \cdot \mathbf{V}^T \quad (1.54)$$

wobei die Matrix \mathbf{U} die gleiche Gestalt wie \mathbf{A} hat, w_{ii} eine quadratische Diagonalmatrix vom Rang n und \mathbf{V}^T eine Transponierte vom Rang n ist. Diese Zerlegung, auf obige Gleichung angewendet und nach dem Lösungsvektor aufgelöst, ergibt:

$$\mathbf{X} = \mathbf{V} \cdot \left[\text{diag} \left(\frac{1}{w_j} \right) \right] \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{R} \quad (1.55)$$

Diese Gleichung kann mit der HOUSEHOLDER-Routine gelöst werden.

Kapitel 2

Vektoralgebra und -analysis

Ausgehend von einfachen, bekannten Darstellungen der Vektorrechnung werden die Grundregeln der Vektoralgebra aufgeführt. Anschließend werden die Regeln für die Differenzierung im Zusammenhang mit Vektoren behandelt und mit anschaulichen Beispielen unterlegt.

2.1 Einheitsvektoren

Vektoren lassen sich in Abhängigkeit von dem verwendeten Koordinatensystem durch verschiedene Einheitsvektoren darstellen. Dabei ergibt sich der Vektor \vec{a} aus der Summe der Vielfachen (Komponenten) der Einheitsvektoren. Die Einheitsvektoren besitzen die Länge (Betrag) Eins $|e| = 1$, sie sind stets parallel zu den Koordinatensystemachsen gerichtet. Für die praktische Arbeit in der Wasserwirtschaft haben sich drei Koordinatensysteme, das kartesische, das zylindrische und das sphärische, durchgesetzt. Ein und derselbe Vektor \vec{a} lässt sich dann in den in Tabelle 2.1 dargestellten Arten beschreiben (siehe auch Abbildungen 2.2 und 2.1).

Tabelle 2.1: Koordinatensysteme zur Darstellung von Vektoren

Koordinatensystem	Einheitsvektoren	Vektor \vec{a}
Kartesisch	$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$	$\vec{a} = a_x \vec{i} + a_y \vec{j} + a_z \vec{k}$
Zylindrisch	$\vec{r}, \vec{\phi}, \vec{z}$	$\vec{a} = a_r \vec{r} + a_\phi \vec{\phi} + a_z \vec{z}$
Sphärisch	$\vec{r}, \vec{\theta}, \vec{\phi}$	$\vec{a} = a_r \vec{r} + a_\theta \vec{\theta} + a_\phi \vec{\phi}$

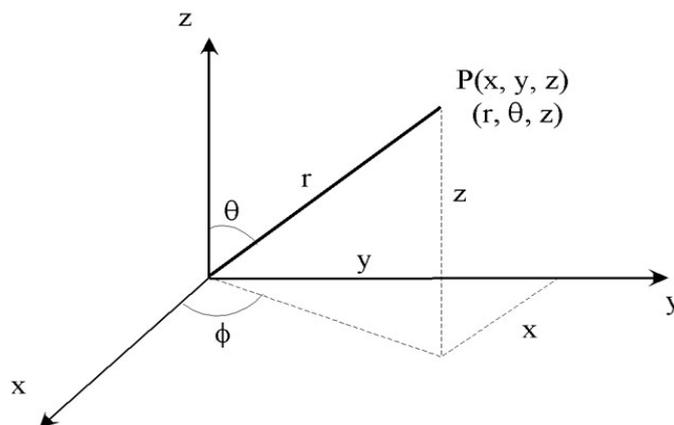


Abbildung 2.1: Vektordarstellung im kartesischen Koordinatensystem

Im zweidimensionalen Raum wird das Polarkoordinatensystem verwendet (siehe Abbildung 2.3).

Da der Vektor \vec{a} unabhängig vom verwendeten Koordinatensystem ist, gelten zwischen dem

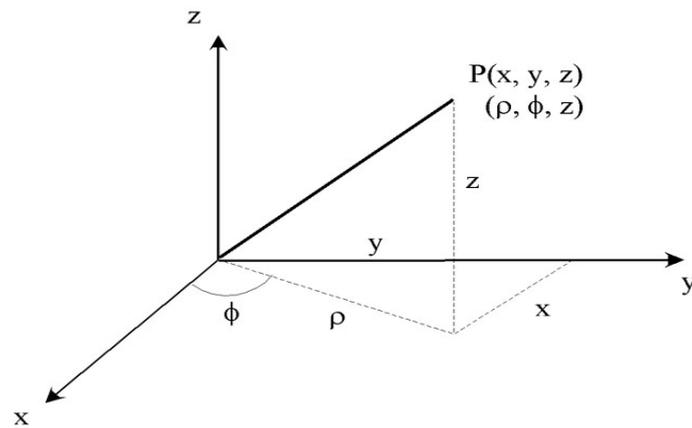


Abbildung 2.2: Vektordarstellung im sphärischen Koordinatensystem

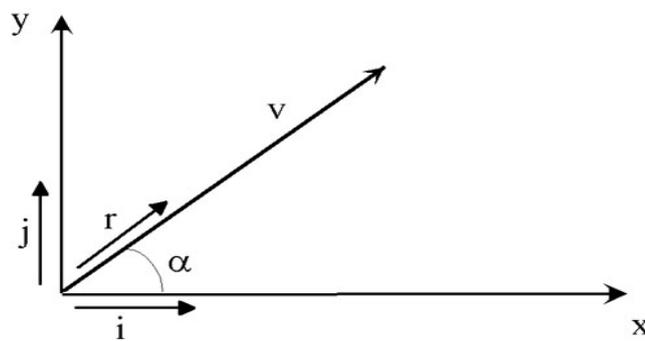


Abbildung 2.3: Vektordarstellung im zweidimensionalen Raum

kartesischen und dem Polarkoordinatensystem folgende Umrechnungen:

$$\begin{aligned}
 a_r &= \sqrt{a_x^2 + a_y^2} = |\vec{a}| \\
 a_\alpha &= \arctan\left(\frac{a_y}{a_x}\right) \\
 a_x &= \cot(a_\alpha) \cdot a_y \\
 a_x &= \cos(a_\alpha) \cdot |\vec{a}|
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

2.2 Rechenregeln

Im Folgenden sollen einige wichtige Grundrechenregeln für Vektoren am Beispiel der kartesischen Koordinatendarstellung gezeigt werden.

- **Addition**

Bei der Addition zweier Vektoren werden die Argumente der kartesischen Einheitsvektoren komponentenweise addiert:

$$\vec{a} + \vec{b} = (a_x + b_x) \vec{i} + (a_y + b_y) \vec{j} + (a_z + b_z) \vec{k} \quad (2.2)$$

Bemerkung:

Diese Beziehung gilt **nur** für das kartesische Koordinatensystem und kann auf die anderen Koordinatensysteme **nicht** übertragen werden.

In der Vektoralgebra gelten folgende Gesetze:

Kommutativgesetz $\vec{A} + \vec{B} = \vec{B} + \vec{A} \quad (2.3)$

Distributivgesetz $m(n\vec{A}) = (mn)\vec{A} = n(m\vec{A}) \quad (2.4)$

Distributivgesetz $(m+n)\vec{A} = m\vec{A} + n\vec{A} \quad (2.5)$

Distributivgesetz $m(\vec{A} + \vec{B}) = m\vec{A} + m\vec{B} \quad (2.6)$

Assoziativgesetz $\vec{A} + (\vec{B} + \vec{C}) = (\vec{A} + \vec{B}) + \vec{C} \quad (2.7)$

- **Betrag**

Der Betrag eines Vektors ist gleich seiner Länge und damit ein Skalar, der richtungsunabhängig ist:

$$|\vec{a}| = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \quad (2.8)$$

Insbesondere gilt, dass der Betrag der Einheitsvektoren gleich Eins ist:

$$|\vec{i}| = |\vec{j}| = |\vec{k}| = |\vec{r}| = |\vec{\alpha}| = |\vec{\delta}| = 1 \quad (2.9)$$

- **Produkt**

In der Vektoralgebra unterscheidet man zwei Arten von Produkten, das Skalarprodukt (Punktprodukt) und das Vektorprodukt (Kreuzprodukt).

Das **Skalarprodukt** zwischen zwei Vektoren ist definiert zu:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| \cdot \cos(\vec{a}; \vec{b}) \quad (2.10)$$

Daraus folgt, dass das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren gleich Null ist, wenn diese senkrecht zueinander stehen. Insbesondere gilt, dass das Skalarprodukt eines Vektors mit sich selbst, d.h. das Quadrat, gleich dem Quadrat des Betrages des Vektors ist:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \begin{cases} 0 & \vec{a} \perp \vec{b} \\ |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| & \vec{a} \uparrow \uparrow \vec{b} \\ -|\vec{a}| \cdot |\vec{b}| & \vec{a} \downarrow \downarrow \vec{b} \\ |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| \cdot \cos(\vec{a}; \vec{b}) & \text{beliebig} \end{cases} \quad (2.11)$$

Insbesondere gilt für die Einheitsvektoren:

$$\begin{aligned} \vec{i} \cdot \vec{j} = 0; \quad \vec{i} \cdot \vec{k} = 0; \quad \vec{j} \cdot \vec{k} = 0; \quad \vec{r} \cdot \vec{\alpha} = 0; \quad \vec{r} \cdot \vec{z} = 0; \\ \vec{i} \cdot \vec{i} = 1; \quad \vec{j} \cdot \vec{j} = 1; \quad \vec{k} \cdot \vec{k} = 1; \quad \vec{r} \cdot \vec{r} = 1; \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{\alpha} = 1; \quad \vec{z} \cdot \vec{z} = 1; \end{aligned} \quad (2.12)$$

Die Bildung des Skalarprodukts in kartesischer Koordinatenschreibweise lautet unter Berücksichtigung obiger Regeln:

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{b} &= (a_x \vec{i} + a_y \vec{j} + a_z \vec{k}) \cdot (b_x \vec{i} + b_y \vec{j} + b_z \vec{k}) \\ &= a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \end{aligned} \quad (2.13)$$

Aus dieser und der oben angeführten Gleichung ergibt sich der Winkel zwischen zwei Vektoren zu:

$$\cos(\vec{a}; \vec{b}) = \frac{a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z}{\sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \sqrt{b_x^2 + b_y^2 + b_z^2}} \quad (2.14)$$

Das **Vektorprodukt** zwischen zwei Vektoren:

$$\vec{a} \times \vec{b} = \vec{v} \quad (2.15)$$

liefert im Gegensatz dazu einen Vektor, dessen Betrag gleich dem von \vec{a} und \vec{b} aufgespannten Parallelogramm ist:

$$|\vec{v}| = |\vec{a} \times \vec{b}| = |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| \cdot \sin(\vec{a}; \vec{b})$$

und dessen Richtung senkrecht zu \vec{a} und senkrecht zu \vec{b} steht:

$$\vec{v} \perp \vec{a}$$

$$\vec{v} \perp \vec{b}$$

Allgemein gilt:

$$|\vec{a} \times \vec{b}| = \begin{cases} 0 & \vec{a} \parallel \vec{b} \\ |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| & \vec{a} \perp \vec{b} \\ -|\vec{a}| \cdot |\vec{b}| & \vec{b} \perp \vec{a} \\ |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| \cdot \sin(\vec{a}; \vec{b}) & \text{beliebig} \end{cases} \quad (2.16)$$

Für das kartesische Koordinatensystem gilt:

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

Insbesondere gilt für die Einheitsvektoren:

$$\begin{aligned} |\vec{i} \times \vec{j}| = 1; & \quad |\vec{i} \times \vec{k}| = 1; & \quad |\vec{j} \times \vec{k}| = 1; & \quad |\vec{r} \times \vec{\alpha}| = 1; & \quad |\vec{r} \times \vec{z}| = 1; \\ \vec{i} \times \vec{j} = \vec{k} & \quad \vec{i} \times \vec{k} = \vec{j} & \quad \vec{j} \times \vec{k} = \vec{i} & \quad \vec{r} \times \vec{\alpha} = \vec{z} & \quad \vec{r} \times \vec{z} = \vec{\alpha} \\ |\vec{i} \times \vec{i}| = 0; & \quad |\vec{j} \times \vec{j}| = 0; & \quad |\vec{k} \times \vec{k}| = 0; & \quad |\vec{r} \times \vec{r}| = 0; & \quad |\vec{\alpha} \times \vec{\alpha}| = 0; & \quad |\vec{z} \times \vec{z}| = 0; \end{aligned} \quad (2.18)$$

Beachte:

Für das **Vektorprodukt** gilt das **Kommutativgesetz nicht**, sondern es gilt:

$$\vec{a} \times \vec{b} = -\vec{b} \times \vec{a} \quad (2.19)$$

Demgegenüber gilt aber das **Distributivgesetz**.

$$\vec{a} \times (\vec{b} + \vec{c}) = \vec{a} \times \vec{b} + \vec{a} \times \vec{c} \quad (2.20)$$

- **Differentiation**

Im Zusammenhang mit der Vektorrechnung spricht man von drei verschiedenen Arten der Differentiation, der **Gradienten-** (grad), der **Divergenz-** (div) und der **Rotationsbildung** (rot). Für alle drei Verfahren gilt ein einheitlicher Differentialvektor, der **NABLA-Operator** ∇ (siehe Tabelle 2.2). Tabelle 2.3 zeigt im Überblick die Schreibweisen der verschiedenen Differentiationsarten in Abhängigkeit vom verwendeten Koordinatensystem. Zur weiteren Vereinfachung der Schreibweise kann auch der **LAPLACE-Differential-Operator** Δ verwendet werden. Dieser entspricht der zweifachen Anwendung des NABLA-Operators:

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla \quad (2.21)$$

Tabelle 2.2: Beschreibung des NABLA-Operators in verschiedenen Koordinatensystemen

Koordinatensystem		
kartesisch	zylindrisch	sphärisch
$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$	$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \vec{r} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{\varphi} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{z}$	$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \vec{r} + \frac{1}{r \cdot \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{\varphi} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{\theta}$

Bei der **Gradientenbildung**

$$\nabla \varphi = \text{grad } \varphi \quad (2.22)$$

Skalar $\varphi \implies$ Vektor $\nabla \varphi$

$$\nabla \varphi = \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \vec{k}$$

wird der NABLA-Operator auf ein skalares Potentialfeld φ angewendet. Das Ergebnis der Gradientenbildung ist ein Vektor. Die Gradientenbildung kann als die formale Multiplikation des NABLA-Operators mit einer skalaren Größe angesehen werden. Im Bereich der Hydrogeologie können dies Grundwasserstände h , Temperaturfelder T , Konzentrationsverteilungen C , Verdunstungs- oder Grundwasserneubildungsraten v_N und viele andere Größen sein. Diese skalaren Größen (Potentiale) sind nicht gerichtet und haben damit keinen Vektorcharakter. Sie besitzen aber eine Ortsabhängigkeit. Die wichtigste Anwendung der Gradientenbildung ist das DARCY-Gesetz zur Berechnung der Grundwasserströmungsgeschwindigkeit (siehe Abschnitt 7.1, Seite 192).

$$\vec{v} = -k \operatorname{grad} h \quad (2.23)$$

Beispiel zur Anwendung der Gradientenbildung:

Der Grundwasserstand eines Grundwasserleiters wird durch die Funktion

$$h = 2xy - 3x + 2$$

angegeben. Man berechne die Grundwasserströmungsgeschwindigkeit, wenn der Durchlässigkeitskoeffizient des Grundwasserleiters $k = 2 \cdot 10^{-3} \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ist.

Es gilt:

$$\begin{aligned} \vec{v} &= -k \operatorname{grad} (h) \\ &= -2 \cdot 10^{-3} \left(\frac{\partial (2xy - 3x + 2)}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial (2xy - 3x + 2)}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial (2xy - 3x + 2)}{\partial z} \vec{k} \right) \frac{\text{m}}{\text{s}} \\ &= (6 - 4y) 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot \vec{i} - 4 \cdot x \cdot 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot \vec{j} \end{aligned}$$

Daraus ist zu erkennen, dass

- es keine vertikale Strömung gibt und dass
- die Geschwindigkeit abhängig von den Koordinaten ist. Die Strömung im Grundwasserleiter ist also nicht konstant.

Unter **Divergenz** versteht man die Anwendung des NABLA-Operators auf einen Vektor:

$$\nabla \vec{v} = \text{div } \vec{v} \quad \text{Vektor } \vec{v} \implies \text{Skalar} \quad (2.24)$$

$$\nabla \vec{v} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \right) (v_x \vec{i} + v_y \vec{j} + v_z \vec{k}) = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

Das Ergebnis der Divergenzbildung ist eine skalare Größe. Die Divergenz kann als die formale Anwendung der Skalarproduktbildung zwischen dem NABLA-Operator und einem Vektor angesehen werden. Entsprechend der Regel zur Skalarproduktbildung ist die Divergenz eines Vektors eine skalare Größe. Die Divergenz, auch als Ergiebigkeit eines Gebietes G bezeichnet, gibt an, welche Quell- oder Senkenaktivitäten in diesem Gebiet vorhanden sind. Ist die Divergenz eines Vektorfeldes gleich Null ($\nabla \vec{v} = \text{div } \vec{v} = 0$), so ist das Gebiet quell- und senkenfrei.

Nach dem **Satz von GAUSS** lässt sich die gesamte Quell- und Senkenaktivität eines Gebietes G durch das Volumenintegral über die Divergenz berechnen. Gleichzeitig ist aus den Bilanzgesetzen bekannt, dass die Differenz zwischen den Quell- und den Senkenaktivitäten, d.h. der Volumenströme, über die Oberfläche abfließen muss:

$$\iiint_G \text{div } \vec{v} \, dV = \oint_S \vec{v} \cdot \vec{n} \, dS \quad (2.25)$$

Für den zweidimensionalen Raum gilt analog:

$$\iint_A \text{div } \vec{v} \, dA = \oint_L \vec{v} \cdot \vec{n} \, dL \quad (2.26)$$

\vec{n} ist ein normaler (senkrecht stehender) Einheitsvektor zur Oberfläche oder zum Umfang. Mit diesem Satz von GAUSS lassen sich Volumenintegrale in Integrale über die Oberfläche bzw. Flächenintegrale in Integrale über die Berandung umwandeln. Auch die Divergenz spielt in der Hydrogeologie eine fundamentale Rolle, da alle Prozesse bei ihrer mathematischen Beschreibung einer Bilanzierung unterzogen werden müssen. Insbesondere basiert auf folgender Relation eine grosse Anzahl weiterer Ableitungen:

$$\text{div } \vec{v} = \text{div} (-k \text{ grad } h) = q \quad (2.27)$$

Beispiel zur Berechnung der Divergenz:

Man berechne die Divergenz des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} des vorigen Beispiels:

$$\nabla \vec{v} = \frac{\partial}{\partial x} (3 - 2y) 10^{-3} + \frac{\partial}{\partial y} (-4 \cdot 10^{-3} x) = 0$$

Das Gebiet ist also quell- und senkenfrei.

Bei der **Rotationsbildung** wird der NABLA-Operator formal mittels Vektorprodukt mit einem Vektor verknüpft:

$$\text{rot } \vec{v} = \nabla \times \vec{v} \quad (2.28)$$

$$\text{rot } \vec{v} = \begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ v_x & v_y & v_z \end{bmatrix} = \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \vec{i} - \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \vec{j} + \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \vec{k}$$

Das Ergebnis stellt wieder einen Vektor dar.

Wenn $\text{rot } \vec{v} = 0$ ist, spricht man von einem wirbelfreien Feld. Man kann daraus auch ableiten, dass $\text{rot grad } \varphi = 0$ stets für wirbelfreie Potentialfelder φ gilt.

Weitere Rechenregeln im Zusammenhang mit der vektoriellen Differentiation ergeben sich durch Anwendung anderer Vektorregeln und der erweiterten Regel zur Differentiation von Produkten:

$$\nabla (\varphi_1 \cdot \varphi_2) = \varphi_1 \nabla \varphi_2 + \varphi_2 \nabla \varphi_1 = \varphi_1 \text{grad } \varphi_2 + \varphi_2 \text{grad } \varphi_1 \quad (2.29)$$

$$\nabla \cdot (\varphi \vec{a}) = \varphi \nabla \cdot \vec{a} + \vec{a} \cdot \nabla \varphi = \varphi \text{div}(\vec{a}) + \vec{a} \cdot \text{grad}(\varphi) \quad (2.30)$$

$$\nabla \times (\varphi \vec{a}) = \varphi \nabla \times \vec{a} + \vec{a} \times \nabla \varphi = \varphi \text{rot}(\vec{a}) + \vec{a} \times \text{grad}(\varphi) \quad (2.31)$$

Untersucht man die Quell- und Senkenaktivität eines Grundwasserleiters, so kann man das DARCY-Gesetz wie folgt schreiben:

$$\text{div}(\vec{v}) = \text{div}(-k \cdot \text{grad } h) = q \quad (2.32)$$

$$\nabla(\vec{v}) = \nabla(-k \cdot \nabla h) = q$$

$$\nabla(\vec{v}) = \nabla(-k) \cdot \nabla h - k \cdot \nabla(\nabla h) = q$$

$$\nabla(\vec{v}) = \nabla(-k) \cdot \nabla h - k \cdot \Delta h = q$$

$$\text{div}(\vec{v}) = \text{grad}(-k) \cdot \text{grad}(h) - k \cdot \text{div}(\text{grad}(h)) = q$$

Nur für den homogenen isotropen Grundwasserleiter darf $\text{grad}(-k) = 0$ gesetzt werden, und die Grundwasserleitergleichung heißt dann:

$$\text{div}(\vec{v}) = -k \text{div}(\text{grad } h) = q \quad (2.33)$$

Tabelle 2.3: Koordinatensysteme

Bezeichnung	Operation	Koordinatensystem	
		kartesisch	zylindrisch
Nabla-Operator	∇	$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$	$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \vec{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{\varphi} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{z}$
Gradient	$grad\ h = \nabla h$	$\nabla h = \frac{\partial h}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial h}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial h}{\partial z} \vec{k}$	$\nabla h = \frac{\partial h}{\partial r} \vec{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial h}{\partial \varphi} \vec{\varphi} + \frac{\partial h}{\partial z} \vec{z}$
Divergenz	$div\ \vec{v} = \nabla \cdot \vec{v}$	$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$	$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{1}{r} \frac{\partial (r v_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$
Laplace-Operator	$div (grad\ h) = \nabla^2 h = \Delta h$	$\Delta h = \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2}$	$\Delta h = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 h}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2}$
Rotation	$rot\ \vec{v} = \nabla \times \vec{v}$	$\nabla \times \vec{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \\ \frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \\ \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \end{pmatrix} \vec{i} + \begin{pmatrix} \frac{\partial v_z}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial z} \\ \frac{\partial v_y}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial y} \\ \frac{\partial v_x}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial x} \end{pmatrix} \vec{j} + \begin{pmatrix} \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \\ \frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \\ \frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \end{pmatrix} \vec{k}$	$\nabla \times \vec{v} = \begin{pmatrix} \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \varphi} - \frac{\partial v_\varphi}{\partial z} \\ \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial (r v_\varphi)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \vec{r} + \begin{pmatrix} \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r} \\ \frac{\partial v_\varphi}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial \varphi} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial (r v_\varphi)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \vec{\varphi} + \begin{pmatrix} \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \\ \frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \\ \frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \end{pmatrix} \vec{z}$
Volumen	dV	$dV = dx \cdot dy \cdot dz$	$dV = r \cdot dr \cdot d\varphi \cdot dz$

2.3 Beispiele zur Vektorrechnung

1. Die Filtergeschwindigkeit \vec{v} setzt sich aus den Komponenten $v_x = 3 \cdot 10^3 m \cdot s^{-1}$; $v_z = -5 \cdot 10^{-4} m \cdot s^{-1}$ und $v_y = 0$ zusammen.

Skizzieren und berechnen Sie die Filtergeschwindigkeit in Vektorschreibweise und geben Sie den Betrag und den Richtungswinkel an.

Der Betrag eines Vektors berechnet sich zu:

$$|\vec{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$$

Mit den gegebenen Zahlenwerten erhält man den Betrag zu:

$$|\vec{v}| = \sqrt{(3 \cdot 10^{-3})^2 + (-5 \cdot 10^{-4})^2} = 3,04 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s}$$

Der Richtungswinkel errechnet sich aus dem Anstieg, der gleich dem Tangens des Richtungswinkels ist:

$$\begin{aligned} \alpha &= \arctan \left(\frac{v_z}{v_x} \right) = \arctan \left(\frac{-5 \cdot 10^{-4}}{3 \cdot 10^{-3}} \right) \\ &= \arctan (-0,166) = 350,52^\circ = 6,12 \text{ rad} \end{aligned}$$

Damit lautet der Vektor der Aufgabenstellung in kartesischen und Polarkoordinaten:

$$\vec{v} = 3 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s} \cdot \vec{i} + 5 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s} \cdot \vec{k} = 3,04 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s} \cdot \vec{r} + 6,12 \frac{m}{s} \cdot \vec{\alpha}$$

2. Ein Schadstoffpartikel wird durch die Konvektion (\vec{v}_{konv}) und durch die hydrodynamische Dispersion (\vec{v}_{disp}) bewegt. Stellen Sie grafisch dar und berechnen Sie den zurückgelegten Weg und den Endpunkt, wenn das Partikel mit folgenden Anteilen

$$\vec{v}_{konv} = 1 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s} \vec{i} + 10^{-3} \frac{m}{s} \vec{j} \quad \text{und}$$

$$\vec{v}_{disp} = 3 \cdot 10^{-10} \frac{m}{s} \vec{r} + 0,785 \vec{\alpha}$$

vom Koordinatenursprung transportiert wird.

In der Aufgabenstellung werden zwei verschiedene Koordinatendarstellungen verwendet. Da die Naturprozesse unabhängig von der Darstellungsart sind, kann die Aufgabe unter Benutzung der kartesischen Koordinatendarstellung oder mittels der Polarkoordinaten gelöst werden. In beiden Fällen ist eine Umrechnung zwischen den beiden Systemen notwendig.

Für den hier vorliegenden zweidimensionalen Fall gelten folgende Beziehungen:

$$\vec{a} = a_x \vec{i} + a_y \vec{j}$$

$$\vec{a} = a_r \vec{r} + a_\alpha \vec{\alpha}$$

$$a_r = \sqrt{a_x^2 + a_y^2} = |\vec{a}|$$

$$a_\alpha = \arctan \frac{a_y}{a_x}$$

$$a_x = \cos(a_\alpha) \cdot a_r$$

$$a_y = \sin(a_\alpha) \cdot a_r \quad \text{bzw.}$$

$$a_x = \tan(a_\alpha) \cdot a_y$$

Dabei ist zu beachten, dass a_α meist in Bogenmaß anzugeben ist und folgende Relation gilt:

$$\frac{\widehat{\alpha}}{2\pi} = \frac{\alpha^\circ}{360^\circ}$$

Mit den gegebenen Zahlenwerten findet man:

$$\vec{v} = \vec{v}_{konv} + \vec{v}_{disp}$$

Laut obiger Definition gilt:

$$v_{r\,konv} = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} = \sqrt{(10^{-4})^2 + (10^{-3})^2} = 10^{-7} \frac{m}{s}$$

$$v_{\alpha\,konv} = \arctan \left(\frac{v_y}{v_x} \right) = 93,65^\circ$$

3. Konstruieren und berechnen Sie den Endpunkt eines Schadstoffpartikels nach einem Tag, wenn er vom Punkt $x = 0m$, $y = 0m$ durch eine Konvektion in Folge eines Potentialgefälles von $\Delta h = 1m$ zwischen den Punkten $x = 0m$, $y = 0m$ und $x = 30m$, $y = 40m$ bei einem k -Wert von $k = 5 \cdot 10^{-4} m/s$ bewegt wird.

Als Basis der Konvektion wird die Filtergeschwindigkeit \vec{v} angesetzt. Exakterweise

hätte hier die Abstandsgeschwindigkeit benutzt werden müssen, was aber nicht Gegenstand der Aufgabe sein sollte. Die mittlere Abstandsgeschwindigkeit \vec{v}_a wird dabei

der Porengeschwindigkeit gleichgesetzt.

$$\vec{v}_a = \frac{\vec{v}}{n'}, \quad \text{mit: } \vec{v} \text{ Filtergeschwindigkeit, } n' \text{ durchströmte Porosität}$$

$$\vec{v} = -k \operatorname{grad} h \quad (\text{DARCY-Gesetz})$$

$$v_r = k \frac{dh}{dr} \quad \Rightarrow \quad v_r \approx k \frac{\Delta h}{\Delta r}$$

$$\Delta r = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} = \sqrt{(30 \text{ m})^2 + (40 \text{ m})^2} = 50 \text{ m}$$

$$v_r = 5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot \frac{1 \text{ m}}{50 \text{ m}} = 10^{-5} \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$\text{Weg } s: \quad s = v_r \cdot t = 10^{-5} \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 86400 \text{ s} = 0,864 \text{ m}$$

$$\text{Lage:} \quad s = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$x^2 = s^2 - y^2$$

Aus der Geradengleichung: $y = mx + n$ bzw. der Zweipunktgleichung einer Geraden ergibt sich:

$$\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} = \frac{y - y_0}{x - x_0}$$

Mit $x_0 = y_0 = 0$ und $x_1 = 30 \text{ m}$ bzw. $y_1 = 40 \text{ m}$ ergibt sich:

$$\frac{y}{x} = \frac{40}{30} = \frac{4}{3} \quad \text{bzw. } y = \frac{4}{3}x = m \cdot x$$

$$y^2 = m^2 \cdot x^2 = m^2 \cdot (s^2 - y^2)$$

$$y^2 = \frac{m^2 \cdot s^2}{(1 + m^2)}$$

$$y = \sqrt{\frac{m^2 \cdot s^2}{(1 + m^2)}} = \sqrt{\frac{1,333^2 (0,864 \text{ m})^2}{(1 + 1,7778)}} = \sqrt{0,4777 \text{ m}} = 0,689 \text{ m}$$

$$x = \frac{y}{m} = 0,517 \text{ m}$$

Man kann y sofort in die Gleichung der Länge s einsetzen und erhält:

$$y = \frac{4}{3}x$$

$$s = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$s = \sqrt{x^2 + \left(\frac{4}{3}x\right)^2} = \sqrt{x^2 + \frac{16}{9}x^2} = \frac{5}{3}x$$

Mit $s = 0,864m$ erhält man den gleichen Wert:

$$x = \frac{3s}{5} = 0,6 \cdot 0,864m = 0,518m$$

$$y = \frac{4}{3}x = 0,69m$$

2.4 Aufgaben zur Vektorrechnung

1. Die Vektoren \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} sind durch ihre Koordinaten gegeben:

$$a_x = 5 \quad b_x = 3 \quad c_x = -6$$

$$a_y = 7 \quad b_y = -4 \quad c_y = -9$$

$$a_z = 8 \quad b_z = 6 \quad c_z = -5$$

Bestimmen Sie die Länge des Vektors $\vec{d} = \vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$.

2. Gegeben sind die Vektoren $\vec{a} = 2\vec{i} - 3\vec{j} + 5\vec{k}$ und $\vec{b} = 3\vec{i} - w\vec{j} + 2\vec{k}$.

Berechnen Sie w so, dass die Vektoren senkrecht zueinander stehen.

3. Berechnen Sie für $\varphi = xy + yz + zx$ und $\vec{A} = x^2y\vec{i} + y^2z\vec{j} + z^2x\vec{k}$:

a) $\vec{A} \cdot \nabla\varphi$

b) $\varphi \cdot (\nabla\vec{A})$ und

c) $(\nabla\varphi) \times \vec{A}$

4. Ein Partikel bewegt sich entlang einer Raumkurve mit den Koordinaten $x = t^3 + 2t$, $y = -3e^{-2t}$, $z = 2 \sin 5t$.

Berechnen Sie die Geschwindigkeit und die Beschleunigung des Partikels für eine beliebige Zeit t .

Geben Sie ihren Betrag sowie auch den zurückgelegten Abstand für $t = 0$ und $t = 1$ an.

5. Konstruieren und berechnen Sie den Endpunkt eines Schadstoffpartikels nach einem Tag, wenn er vom Punkt $x = 0m$; $y = 0m$ durch eine Konvektion infolge eines Potentialgefälles von $\Delta h = 1m$ zwischen den Punkten $x = 0m$; $y = 0m$ und $x = 30m$; $y = 40m$ bei einem k -Wert von $k = 5 \cdot 10^{-4}m \cdot s^{-1}$ bewegt wird.

6. Gegeben ist das skalare Potentialfeld in einem Filter $h = xy + yz + xz$.

a) Bestimmen Sie die Filtergeschwindigkeit (Vektor und Betrag).

b) Gibt es Quellen- und Senkenaktivität im Filter?

c) Ist die Strömung im Filter wirbelfrei?

Gegeben sind $k = 10^{-4}ms^{-1}$ und $\text{grad}(-k) = 0$.

7. Eine Schadstofffahne hat sich im Untergrund ausgebreitet. Die Verteilung des Schadstoffes entspricht im Wertebereich $x ::= 0$ bis 10 und $y ::= 0$ bis 10 folgender geometrischen Figur:

$$C(x, y) = 50 - ((x - 5)^2 + (y - 5)^2)$$

a.) Skizzieren Sie die Äquipotentiallinien für die Konzentrationswerte im Bereich von $C(x, y) = 0mg$ bis $50mg$ mit einer Schrittweite $\Delta C(x, y) = 10$.

b.) Berechnen Sie den Gradienten am Punkt $P(3, 4)$ und bestimmen Sie den Betrag und den Richtungswinkel.

8. Eine Schadstofffahne hat sich im Untergrund ausgebreitet. Die Verteilung des Schadstoffes entspricht im Wertebereich $x ::= 0$ bis 10 und $y ::= 0$ bis 10 folgender geometrischen Figur:

$$C(x, y) = 125 - ((2x - 10)^2 + (y - 5)^2)$$

- a.) Skizzieren Sie die Äquipotentiallinien für die Konzentrationswerte im Bereich von $C(x, y) = 0mg$ bis $125mg$ mit einer Schrittweite $\Delta C(x, y) = 25$.
- b.) Berechnen Sie den Gradienten am Punkt $P(5, 10)$ und bestimmen Sie den Betrag und den Richtungswinkel.
9. Der Grundwasserstand eines einseitig durch eine Barriere begrenzten Grundwasserleiters und eines Brunnens soll durch folgende geometrische Figur beschrieben werden:

$$z_R = \frac{1}{2} \frac{(y - 10)^2}{x}$$

- a.) Skizzieren Sie die Hydroisohypsen im Bereich von $z_R = 1m$ bis $z_R = 5m$ mit einer Schrittweite $\Delta z_R = 1m$ für die Koordinaten $0 \leq x \leq 10$.
- b.) Berechnen Sie die Filtergeschwindigkeit mit $k = 0,0001ms^{-1}$ am Punkt $P(5, 5)$; bestimmen Sie den Betrag und den Richtungswinkel α .
- c.) Ist dieses Feld quell- und senkenfrei?

Kapitel 3

Interpolationsverfahren

Problem:

Durch Messung sind einige Messwerte (abhängige Variable) in Abhängigkeit von unabhängigen Variablen im ein-, zwei-, drei- oder vierdimensionalen Raum, der im Allgemeinen durch die drei Raumkoordinaten (je nach Koordinatensystem z.B. x_n, y_n, z_n oder r_n, α_n, z_n oder $r_n, \alpha_n, \vartheta_n$ (siehe Kapitel 2 Vektorrechnung, Seite 45)) und die Zeit t_n gebildet wird, bekannt. Man hat in diesem Fall diskontinuierliche Wertetabellen. Für den eindimensionalen Fall gilt z. B.:

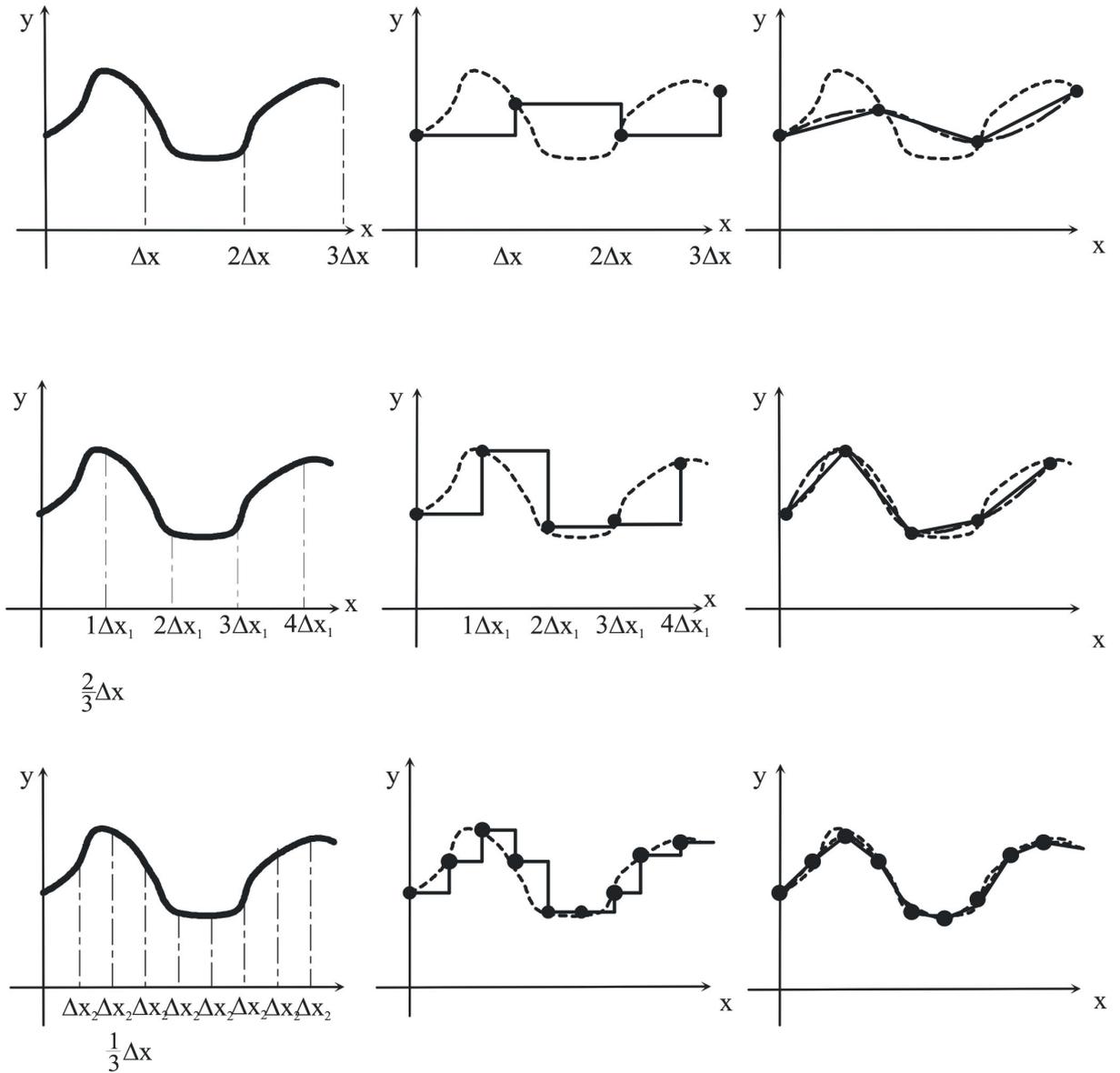
Unabhängige Variable	Abhängige Variable
x_0	$y_0 = f(x_0)$
x_1	$y_1 = f(x_1)$
\vdots	\vdots
x_n	$y_n = f(x_n)$

Die Stellen x_0, x_1, \dots, x_n werden als so genannte **Stützstellen** bezeichnet, die y_0, y_1, \dots, y_n als **Stützwerte**.

Werden Funktionswerte gesucht, deren unabhängige Variable innerhalb des Bereiches (x_0, x_n) liegen, spricht man von **Interpolation**. Sollen dagegen Funktionswerte für unabhängige Variable außerhalb des Bereiches (x_0, x_n) gesucht werden, wird dies **Extrapolation** genannt. Durch die Interpolation bzw. Extrapolation wird eine kontinuierliche Ersatzfunktion $w = p(x)$ gesucht, die die Originalfunktion $y_n = f(x_n)$ möglichst genau widerspiegelt (siehe Abbildung 3.1). Dabei ist immer davon auszugehen, dass die Ersatzfunktion nur an den Stützstellen mit der Originalfunktion übereinstimmt. Für den dazwischen liegenden Raum hängt die Genauigkeit, d.h. die Übereinstimmung der beiden Funktionen, von der Anzahl und der Verteilung der Stützstellen ab. Entsprechend dem **Abtasttheorem** nimmt der Quantisierungsfehler proportional zum Anstieg der Funktion zu.

Beachte:

Kein Interpolationsalgorithmus kann als Ersatz für eine Vergrößerung der Messwertdichte benutzt werden. Mittels der Interpolationsalgorithmen erhält man immer nur **Näherungswerte**.



Originalfunktion

Abgetastete Funktion

Interpolierte Funktion

- Abgetasteter Messwert
- Originalfunktion
- Lineare Interpolation
- Spline-Interpolation

Abbildung 3.1: Darstellung der diskontinuierlichen Messwernerfassung

Beispiel zur Anwendung von Interpolationen:

Die Schadstoffkonzentration $C(x)$, die von einer Altlast ausgeht, wird an den Stellen x_0, x_1, x_2 gemessen (siehe Abbildung 3.2). Die Schadstoffkonzentration, die als Gefahr an der Stelle x_{Fl} in den Fluss fließen kann, soll durch Interpolation abgeschätzt werden. Dabei soll eine Aussage erfolgen, ob dieser Wert den zulässigen Grenzwert überschreitet.

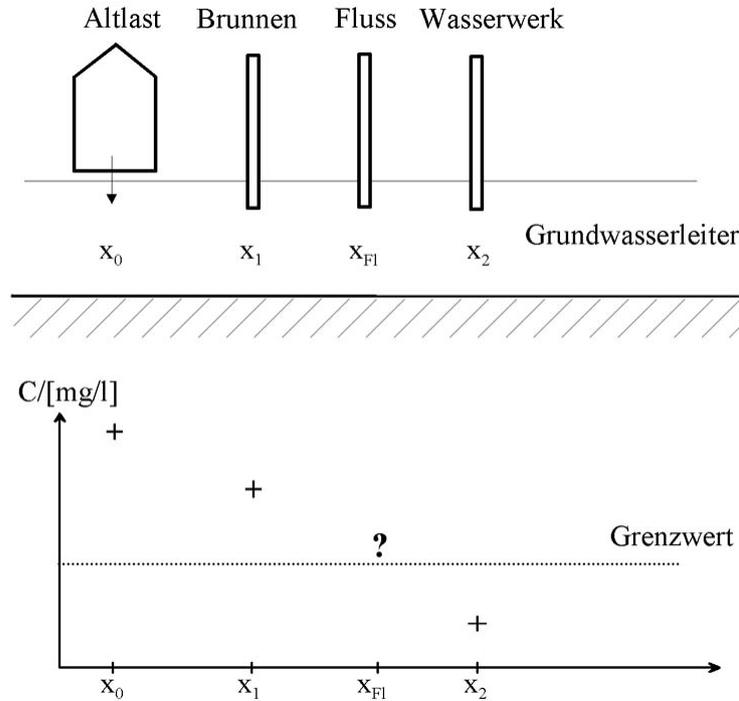


Abbildung 3.2: Darstellung eines Interpolationsproblems

x_0	$C_0 = f(x_0)$
x_1	$C_1 = f(x_1)$
x_{Fl}	?
x_2	$C_2 = f(x_2)$

Zur Lösung dieses Problems wird eine Interpolationsfunktion $w = p(x)$ als "Ersatz" für die Funktion $C_n = f(x_n)$ gesucht. Diese Funktion soll folgende Voraussetzung erfüllen:

$$w_i = p(x_i) = C_i \tag{3.1}$$

d.h.

$$w_0 = p(x_0) = C_0 \tag{3.2}$$

$$w_1 = p(x_1) = C_1$$

$$\vdots$$

$$w_n = p(x_n) = C_n$$

Dann wird angenommen, dass sich die Zwischenwerte der Funktion $w = p(x)$ den Zwischenwerten der Funktion $C_n = f(x_n)$ mit guter Näherung angleichen.

Zur Bestimmung der Funktion $w = p(x)$ können verschiedene Interpolationsverfahren verwendet werden. Man unterscheidet dabei die ein- und die mehrdimensionalen Verfahren. Die mehrdimensionalen Verfahren spielen im Zusammenhang mit den **Geografischen Informationssystemen** (GIS) eine wesentliche Rolle und werden auch oft im Zusammenhang mit den Verfahren der **Geostatistik** betrachtet.

Im Folgenden sollen einige der im Zusammenhang mit wasserwirtschaftlichen Fragestellungen benutzten Verfahren vorgestellt werden.

- Polynominterpolation
- Interpolierende Polynomteilstücke (Spline)
- Kriging-Verfahren

3.1 Polynominterpolation

Bei diesem Verfahren hat $p(x)$ die Form eines algebraischen Polynoms n -ten Grades:

$$w = p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \quad (3.3)$$

Dies weist den Vorteil auf, dass Zwischenwerte möglichst leicht zu berechnen sind.

Geht man von einer Messwerttabelle mit $n + 1$ Wertepaaren aus, so lässt sich maximal genau ein Polynom n -ten Grades dazu ermitteln:

$$y := p_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k \cdot x^k \quad (3.4)$$

mit der Eigenschaft:

$$y(x_i) \approx p(x_i) = \sum_{k=0}^n a_k \cdot x_i^k = w_i \quad (3.5)$$

Dieses Polynom ist das Interpolationspolynom zu dem gegebenen System von Interpolationsstützstellen.

In der Regel werden Polynome niedrigen Grades ($n \leq 3$) gesucht, die die Wertepaare zumindest stückweise anpassen:

$$p(x) = a_0 + a_1x \quad \text{lineare Interpolation}$$

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 \quad \text{quadratische Interpolation}$$

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 \quad \text{kubische Interpolation}$$

Der Einsatz von Polynomen höheren Grades erschwert die Rechenarbeit und führt zu sehr große Schwankungen.

Aus den verschiedenen Darstellungsformen für Polynome ergeben sich auch die verschiedenen Interpolationsverfahren zur Bestimmung der Koeffizienten a_i des Polynoms n -ten Grades. Diese verschiedenen Verfahren führen alle zu dem selben Polynom.

So werden die Interpolationsformeln nach

- analytische Potenzfunktion
- LAGRANGE
- AIKEN
- NEWTON

unterschieden.

3.1.1 Analytische Potenzfunktionen

Dieser Polynomansatz geht davon aus, dass das Polynom $w = p(x)$ für jede Stützstelle die Bedingung $y(x_i) = p(x_i)$ erfüllt. Man erhält in diesem Fall für die $n + 1$ Stützstellen $n + 1$ Gleichungen mit den $n + 1$ Unbekannten a_0 bis a_n .

$$a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n = y_0 \quad (3.6)$$

$$a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n = y_1$$

$$\vdots$$

$$a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_nx_n^n = y_n$$

Dieses Gleichungssystem kann in gewohnter Weise auch als Matrixgleichung geschrieben werden:

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{Y}$$

Mit:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Dabei ist zu beachten, dass die Matrix \mathbf{X} die bekannten Koeffizienten und \mathbf{Y} die rechte Seite darstellen, wobei hier die Matrix \mathbf{A} den gesuchten Lösungsvektor darstellt. Das LGS kann mit allen bekannten Methoden (siehe Abschnitt 1.3 Lösung von Gleichungssystemen, Seite 17) gelöst werden.

Die Determinante dieses linearen Gleichungssystems (LGS) ist:

$$D = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} (x_1 - x_0) \cdot (x_2 - x_0) \cdot (x_3 - x_0) \cdot \dots \cdot (x_n - x_0) \cdot \\ \quad \cdot (x_2 - x_1) \cdot (x_3 - x_1) \cdot \dots \cdot (x_n - x_1) \cdot \\ \quad \quad \cdot (x_3 - x_2) \cdot \dots \cdot (x_n - x_2) \cdot \\ \quad \quad \quad \vdots \\ \quad \quad \quad \cdot (x_{n-1} - x_{n-2}) \cdot (x_n - x_{n-2}) \cdot \\ \quad \quad \quad \quad \cdot (x_n - x_{n-1}) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

und wird als VANDERMONDSche Determinante bezeichnet.

Da alle Stützstellen verschieden von einander sind (sein müssen), ist $D \neq 0$ und das LGS eindeutig lösbar.

Es existiert genau ein Polynom n -ten Grades, das die Werte $y_i = f(x_i)$ annimmt und deren Koeffizienten sich ergeben zu (vgl. Abschnitt 1.2.3 Determinanten, Seite 13):

$$a_0 = \frac{D_{a_0}}{D}, \quad a_1 = \frac{D_{a_1}}{D}, \quad \dots \quad a_n = \frac{D_{a_n}}{D} \quad (3.8)$$

Mit diesen Koeffizienten erhält man das gesuchte Interpolationspolynom zu:

$$y(x) \approx p(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n$$

Der gesuchte Interpolationswert an der Stelle x_P ergibt sich damit zu:

$$y(x_P) \approx p(x_P) = a_0 + a_1 \cdot x_P + a_2 \cdot x_P^2 + \dots + a_n \cdot x_P^n$$

Obwohl bei diesem Verfahren der Ansatz sehr einfach ist, erfordert die endgültige Bestimmung des Interpolationspolynoms einen erheblichen Rechenaufwand, besonders wenn eine größere Anzahl von Stützwerten zu berücksichtigen ist.

Beispiel zur Anwendung der Interpolation nach dem Polynomansatz:

Gesucht sind ein quadratisches Polynom, das die Werte der folgenden Tabelle annehmen soll und der Wert $y = f\left(\frac{1}{2}\right)$ an der Stelle $x = \frac{1}{2}$.

x	0	1	2
y	0	1	0

Da nur drei Stützstellen vorhanden sind, kann das Polynom nur vom zweiten Grad sein. Ein quadratisches Polynom hat die Form:

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$$

Es muss gelten:

$$y_i = p(x_i)$$

$$y_i = a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2$$

$$p(0) = 0 \implies a_0 + a_1 \cdot 0 + a_2 \cdot 0 = 0 \implies a_0 = 0$$

$$p(1) = 1 \implies a_0 + a_1 \cdot 1 + a_2 \cdot 1^2 = 1 \implies a_1 + a_2 = 1$$

$$p(2) = 0 \implies a_0 + a_1 \cdot 2 + a_2 \cdot 2^2 = 0 \implies 2a_1 + 4a_2 = 0$$

Aus den drei Gleichungen folgt:

$$a_0 = 0$$

$$a_1 = 2$$

$$a_2 = -1$$

Damit lautet das Interpolationspolynom:

$$p(x) = 2x - x^2$$

Mit dieser Funktion kann der gesuchte Funktionswert an der Stelle $x = \frac{1}{2}$ berechnet werden:

$$f\left(\frac{1}{2}\right) \approx p\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$p\left(\frac{1}{2}\right) = 2 \cdot \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2$$

$$f\left(\frac{1}{2}\right) \approx \frac{3}{4}$$

3.1.2 Interpolationsformel von LAGRANGE

LAGRANGE hat die Interpolationsfunktion in folgender Form geschrieben:

$$y(x_P) \approx p(x_P) = L_0(x_P) \cdot y_0 + L_1(x_P) \cdot y_1 + \dots + L_n(x_P) \cdot y_n \quad (3.9)$$

Bei der Interpolation nach LAGRANGE werden keine geschlossenen analytische Funktionen berechnet, sondern nur jeweils einzelne Werte $p(x_P)$ zur Interpolationsstelle x_P . Dabei sind die Koeffizienten ($L_i(x)$ ($i = 0, 1, \dots, n$)) der Stützwerte y_i Polynome n -ten Grades von x_P . Diese werden aus den Stützstellen x_i berechnet. Die LAGRANGESchen Polynome n -ten Grades haben folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} L_0(x) &= \frac{(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)} \\ L_1(x) &= \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \cdots (x_1 - x_n)} \\ &\vdots \\ L_i(x) &= \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_{i-1})(x_P - x_{i+1}) \cdots (x_P - x_{n-1})}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_{n-1})} \\ &\vdots \\ L_n(x) &= \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1})} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Damit erhält das Interpolationspolynom von LAGRANGE die Form:

$$\begin{aligned} y &= f(x_P) \approx p(x_P) = L_0(x_P) y_0 + L_1(x_P) y_1 + \dots + L_n(x_P) y_n \\ &= \frac{(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \cdots (x_0 - x_n)} y_0 \\ &\quad + \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \cdots (x_1 - x_n)} y_1 \\ &\quad + \dots + \frac{(x_P - x_0)(x_P - x_1)(x_P - x_2) \cdots (x_P - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1})} y_n \end{aligned} \quad (3.11)$$

Setzt man für x_P einen der Werte $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n$ ein, so wird immer ein Faktor des Zählers gleich Null. Damit werden werden alle LAGRANGESchen Polynome außer dem i -ten gleich Null. Für das i -te Polynom wird der Zähler gleich dem Nenner und erhält damit den Werte Eins. Damit ist bewiesen:

$$y_i = f(x_i) \approx p(x_i) = 1 \cdot y_i$$

Ein Nachteil des LAGRANGESchen Verfahrens besteht darin, dass bei einer Erhöhung der berücksichtigten Stützstellenzahl, welche mit der Erhöhung des Grades des Interpolationsalgorithmus identisch ist, die Berechnung der LAGRANGESchen Interpolationspolynome erneut durchgeführt werden muss. Dies ist z.B. auch im folgenden Beispiel deutlich zu sehen.

Beachte:

- Die Gewichte (Faktoren) $L_i(x_i)$ der LAGRANGESchen Interpolationsformel müssen immer neu berechnet werden, wenn sich die Zahl der Stützstellen ändert.
- Die Summe der Gewichte ist immer gleich Eins (zur Kontrolle der Ergebnisse wichtig).

$$\sum L_i(x_i) = 1$$

Beispiel zur Anwendung der LAGRANGESchen Interpolationsfunktion:

Für die Funktion $y_n = f(x_n)$ sind die Werte an den äquidistanten Stellen $x_n = x_0 + 2nh$, mit $n = -1; 0; 1; 2$ (siehe Tabelle) gegeben:

n	-1	0	1	2
x_n	$x_0 - 2h$	x_0	$x_0 + 2h$	$x_0 + 4h$
$f(x_n)$	y_{-1}	y_0	y_1	y_2

Gesucht ist ein Näherungswert $w = f(x) = f(x_0 + h)$ für $x = \frac{1}{2}$.

Nach den Regeln des Polynomansatzes kann in diesem Fall mit den vier Stützstellen maximal ein Interpolationspolynom dritten Grades entwickelt werden. Es ist aber auch möglich, eine stückweise Interpolation durchzuführen. Dies hat den Vorteil, dass man den Rechenaufwand reduzieren kann. Die Genauigkeit wird dadurch aber verschlechtert. Es gilt in diesem Fall, ein Optimum zwischen erforderlicher Genauigkeit und Rechenaufwand zu finden. Bei der stückweisen Interpolation werden die Stützstellen benutzt, die dem Interpolationspunkt am nächsten liegen.

1. Lineare Interpolation

Die Interpolationsfunktion an der Stelle $x = \frac{1}{2}$ wird mit Hilfe der LAGRANGESchen Interpolationsformel folgenderweise geschrieben (siehe Gleichung 3.9):

$$w_{\frac{1}{2}} = L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_0 + L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_1$$

Dabei werden die Stützstellen benutzt, zwischen denen der Wert $x = \frac{1}{2}$ liegt, die Werte $x = 0$ und $x = 1$. Die Faktoren L_0 und L_1 sind (siehe Gleichung 3.10):

$$L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = \frac{x_{\frac{1}{2}} - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x_0 + h - x_0 - 2h}{x_0 - x_0 - 2h} = \frac{1}{2}$$

$$L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) = \frac{x_{\frac{1}{2}} - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x_0 + h - x_0}{x_0 + 2h - x_0} = \frac{1}{2}$$

Dann ist der gesuchte Wert:

$$w_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(y_0 + y_1)$$

Das Ergebnis der linearen Interpolation ist damit gleich dem arithmetischen Mittel.

2. Quadratische Interpolation

In diesem Fall ist (siehe Gleichung 3.9):

$$w_{\frac{1}{2}} = L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_0 + L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_1 + L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_2$$

Die entsprechenden Faktoren sind (siehe Gleichung 3.10):

$$\begin{aligned} L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_0 - x_1\right)\left(x_0 - x_2\right)} = \frac{3}{8} \\ L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_1 - x_0\right)\left(x_1 - x_2\right)} = \frac{3}{4} \\ L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)}{\left(x_2 - x_0\right)\left(x_2 - x_1\right)} = -\frac{1}{8} \end{aligned}$$

und der gesuchte Wert ist:

$$w_{\frac{1}{2}} = \frac{3}{8}y_0 + \frac{3}{4}y_1 - \frac{1}{8}y_2.$$

3. Kubische Interpolation

Auf dieselbe Weise folgt (siehe Gleichung 3.9):

$$w_{\frac{1}{2}} = L_{-1}\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_{-1} + L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_0 + L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_1 + L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right) y_2$$

Man erhält folgende LAGRANGEFaktoren (siehe Gleichung 3.10):

$$\begin{aligned} L_{-1}\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_{-1} - x_0\right)\left(x_{-1} - x_1\right)\left(x_{-1} - x_2\right)} = -\frac{1}{16} \\ L_0\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_{-1}\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_0 - x_{-1}\right)\left(x_0 - x_1\right)\left(x_0 - x_2\right)} = \frac{9}{16} \\ L_1\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_{-1}\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_2\right)}{\left(x_1 - x_{-1}\right)\left(x_1 - x_0\right)\left(x_1 - x_2\right)} = \frac{9}{16} \\ L_2\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= \frac{\left(x_{\frac{1}{2}} - x_{-1}\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right)\left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right)}{\left(x_2 - x_{-1}\right)\left(x_2 - x_0\right)\left(x_2 - x_1\right)} = -\frac{1}{16} \end{aligned}$$

Damit lautet der interpolierte Wert:

$$w_{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{16}y_{-1} + \frac{9}{16}y_0 + \frac{9}{16}y_1 - \frac{1}{16}y_2$$

3.1.3 NEWTONSche Interpolationsformel

3.1.3.1 Beliebige Stützstellen

Der Nachteil des LAGRANGESchen Verfahrens, dass die LAGRANGESchen Polynome neu berechnet werden müssen, wird bei dem NEWTONSchen Verfahren vermieden. Bei dem NEWTONSchen Verfahren wird bei Berücksichtigung weiterer Stützstellen nur ein Zusatzglied addiert.

Das Verfahren geht von folgenden Ansatz aus:

$$\begin{aligned} p(x) &= b_0 + b_1(x - x_0) && (3.12) \\ &+ b_2(x - x_0)(x - x_1) \\ &+ b_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\ &\vdots \\ &+ b_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \end{aligned}$$

Wenn ein bestimmter Interpolationswert $p(x_P)$ gesucht wird, wird im Polynomausdruck x durch x_P ersetzt.

Die Koeffizienten werden wieder so bestimmt, dass das Polynom die Stützstellen (x_n, y_n) exakt widerspiegelt. Setzt man in den NEWTONSchen Ansatz für x_P die Werte x_0, x_1, \dots, x_n ein, so erhält man ein gestaffeltes Gleichungssystem mit n Gleichungen für n Unbekannte, da jeweils die entsprechenden Faktoren $((x_P - x_i) = 0)$ Null werden und damit die Polynomglieder wegfallen. Dabei muss der Polynomwert $p(x_i)$ den Stützwert y_i annehmen.

$$y_0 = b_0 + b_1 \underbrace{(x_0 - x_0)}_{=0} + \dots \quad (3.13)$$

$$y_1 = b_0 + b_1(x_1 - x_0) + b_2(x_1 - x_0) \underbrace{(x_1 - x_1)}_{=0} + \dots$$

$$y_2 = b_0 + b_1(x_2 - x_0) + b_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)$$

$$\vdots$$

$$y_n = b_0 + b_1(x_n - x_0) + b_2(x_n - x_0)(x_n - x_1) + \dots$$

$$+ b_n(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdots (x_n - x_{n-1})$$

Das Gleichungssystem lässt sich schrittweise nach $b_0, b_1, b_2 \cdots b_n$ auflösen. Durch Einsetzen der ersten Gleichung in die zweite erhält man b_1 . Dieses wiederum in die dritte eingesetzt liefert b_2 . In die $(n + 1)$ -te Gleichung werden die zuvor bestimmten $b_0, b_1, b_2 \cdots b_{n-1}$ eingesetzt und liefern dann b_n .

$$b_0 = y_0 \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)} = [x_1 x_0] \\ b_2 &= \frac{(y_2 - y_0) - \frac{(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)}(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \frac{(y_2 - y_1) + (y_1 - y_0) - [x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \frac{(y_2 - y_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} + \frac{(y_1 - y_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{[x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \frac{[x_2 x_1]}{(x_2 - x_0)} + \frac{[x_1 x_0](x_1 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{[x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \frac{[x_2 x_1]}{(x_2 - x_0)} + \frac{[x_1 x_0](x_1 - x_0) - [x_1 x_0](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ &= \frac{[x_2 x_1]}{(x_2 - x_0)} + \frac{-[x_1 x_0](x_2 - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \\ b_2 &= \frac{[x_2 x_1] - [x_1 x_0]}{(x_2 - x_0)} = [x_2 x_1 x_0] \end{aligned}$$

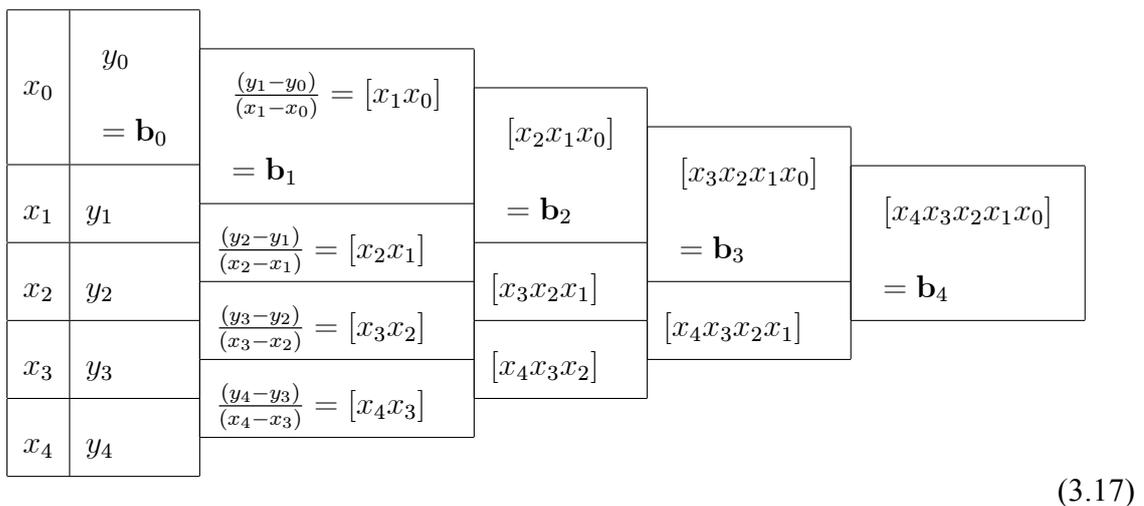
Allgemein kann man folgende gekürzte Schreibweise, die als **dividierte Differenzen** erster und höherer Ordnung bezeichnet werden, einführen:

$$\begin{aligned}
 [x_k x_i] &:= \frac{(y_k - y_i)}{(x_k - x_i)} \\
 [x_l x_k x_i] &:= \frac{[x_l x_k] - [x_k x_i]}{(x_l - x_i)} \\
 [x_m x_l x_k x_i] &:= \frac{[x_m x_l x_k] - [x_l x_k x_i]}{(x_m - x_i)} \\
 &\vdots \\
 [x_n x_{n-1} \cdots x_1 x_0] &:= \frac{[x_n x_{n-1} \cdots x_1] - [x_{n-1} \cdots x_1 x_0]}{(x_n - x_0)}
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Damit ergeben sich die gesuchten Koeffizienten zu:

$$\begin{aligned}
 b_0 &= y_0 \\
 b_1 &= \frac{(y_1 - y_0)}{(x_1 - x_0)} = [x_1 x_0] \\
 b_2 &= \frac{[x_2 x_1] - [x_1 x_0]}{(x_2 - x_0)} = [x_2 x_1 x_0] \\
 b_3 &= \frac{[x_3 x_2 x_1] - [x_2 x_1 x_0]}{(x_3 - x_0)} = [x_3 x_2 x_1 x_0] \\
 &\vdots \\
 b_n &= \frac{[x_n x_{n-1} \cdots x_1] - [x_{n-1} \cdots x_1 x_0]}{(x_n - x_0)} = [x_n x_{n-1} \cdots x_1 x_0]
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Die Koeffizienten lassen sich besonders bequem nach dem folgenden **Rechenschema** bestimmen (in diesem Beispiel für 5 Stützstellen):



(3.17)

Entsprechend Gleichung 3.12 ergibt sich der zu interpolierende Wert y an der Stelle x zu:

$$\begin{aligned}
 y(x) \approx p(x) &= b_0 + b_1(x - x_0) \\
 &+ b_2(x - x_0)(x - x_1) \\
 &+ b_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \\
 &+ b_4(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Diese Gleichung kann natürlich auch benutzt werden, um den Funktionsverlauf der Interpolationsfunktion $w = p(x)$ zu berechnen und eventuell grafisch darzustellen.

3.1.3.2 Äquidistante Stützstellenverteilung

Sei die **äquidistanten Stützstellenverteilung** $x_0, x_1 = x_0 + h, \dots, x_n = x_0 + nh$ (h ist die Schrittweite) gegeben, dann lautet nach NEWTON die Interpolationsfunktion:

$$p(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} (x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2! \cdot h^2} (x - x_0)(x - x_1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n! \cdot h^n} (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \tag{3.19}$$

Die Elemente $\Delta y_0, \Delta^2 y_0, \dots, \Delta^n y_0$, werden als **finite Differenzen** bezeichnet. Dabei stellen die Exponenten nicht die Potenzierung, sondern die schrittweise Differenzenbildung dar. Vergleicht man diese Gleichung 3.19 mit der Gleichung 3.12 auf Seite 76 so erhält man:

$$\begin{aligned}
 b_0 &\simeq y_0 \\
 b_1 &= \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} \simeq \frac{\Delta y_0}{h} \\
 b_2 &= \frac{[x_2 x_1] - [x_1 x_0]}{(x_2 - x_0)} \simeq \frac{\Delta^2 y_0}{2! \cdot h^2}
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

Diese Differenzen werden nach folgendem Schema berechnet:

x_0	y_0		
x_1	y_1	$\Delta y_0 = y_1 - y_0$	$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0$
x_2	y_2	$\Delta y_1 = y_2 - y_1$	$\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
x_{n-1}	y_{n-1}	$\Delta y_{n-2} = y_{n-1} - y_{n-2}$	$\Delta^2 y_{n-2} = \Delta y_{n-1} - \Delta y_{n-2}$
x_n	y_n	$\Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-1}$	

...

$\Delta^n y_0 = \Delta^{n-1} y_1 - \Delta^{n-1} y_0$

Das Schema ist z.B. für $n = 4$:

x_0	y_0							
x_1	y_1	$\Delta y_0 = y_1 - y_0$						
x_2	y_2	$\Delta y_1 = y_2 - y_1$	$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0$					
x_3	y_3	$\Delta y_2 = y_3 - y_2$	$\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1$	$\Delta^3 y_0 = \Delta^2 y_1 - \Delta^2 y_0$				
x_4	y_4	$\Delta y_3 = y_4 - y_3$	$\Delta^2 y_2 = \Delta y_3 - \Delta y_2$	$\Delta^3 y_1 = \Delta^2 y_2 - \Delta^2 y_1$	$\Delta^4 y_0 = \Delta^3 y_1 - \Delta^3 y_0$			

Durch rückwärtiges Einsetzen sieht man, dass jede finite Differenz eine Kombination der y -Werte der ersten Spalte ist. Es gilt z. B. :

$$\Delta^3 y_0 = y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0, \tag{3.21}$$

3.1.3.3 Beispiele zur Anwendung des Newtonschen Verfahrens

1. Für die Funktion $y_n = f(x_n)$ sind die Werte an den äquidistanten Stellen $x_n = x_0 + 2nh$, $n = -1; 0; 1; 2$ (siehe Tabelle) gegeben:

n	-1	0	1	2
x_n	$x_0 - 2h$	x_0	$x_0 + 2h$	$x_0 + 4h$
$f(x_n)$	y_{-1}	y_0	y_1	y_2

Gesucht ist ein Näherungswert $x = \frac{1}{2}$ für $y_{\frac{1}{2}} = f(x_0 + h)$.

Lösen Sie dieses Beispiel mit dem NEWTONSchen Verfahren und vergleichen Sie die Ergebnisse mit denen der LANGRANGESchen Interpolationsformel

- a) Lineare Interpolation:

$$\begin{aligned}
 p\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} \left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right) \\
 &= y_0 + \frac{y_1 - y_0}{2h} (x_0 + h - x_0) \\
 &= \frac{1}{2} (y_0 + y_1)
 \end{aligned}$$

- b) Quadratische Interpolation:

$$\begin{aligned}
 p\left(x_{\frac{1}{2}}\right) &= y_0 + \frac{\Delta y_0}{h} \left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2} \left(x_{\frac{1}{2}} - x_0\right) \left(x_{\frac{1}{2}} - x_1\right) \\
 &= \frac{1}{2} (y_0 + y_1) + \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{(2h)^2 2} (x_0 + h - x_0) (x_0 + h - x_0 - 2h) \\
 &= \frac{3}{8} y_0 + \frac{3}{4} y_1 - \frac{1}{8} y_2
 \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0 = y_2 - y_1 - (y_1 - y_0) = y_2 - 2y_1 + y_0$$

Bemerkung:

Der Vorteil des NEWTONSchen Verfahrens liegt darin, dass sich die Polynome $L_i(x)$ nicht ändern, wenn die Anzahl der Stützstellen verändert wird, d.h. man braucht jedes Mal nur das zusätzliche Glied der Interpolationsfunktion zu berechnen.

2. Gegeben sind folgende Messwerte:

x	0	1	2	3	4	5
y	1	2	4	8	15	26

Bestimmen Sie den Wert $y = f(2,5)$. Wählen Sie dazu ein Polynom geeigneten Grades. Wie groß ist die Abweichung, wenn sich der Grad des Polynoms ändert?

Zur Berechnung des gesuchten Wertes mittels Polynomen verschiedenen Grades ist das NEWTONSche Verfahren geeignet. Da die gegebenen Stützstellen äquidistant sind ($h = 1$), ist seine Anwendung möglich.

Zunächst werden die finiten Differenzen berechnet:

$x_0 = 0$	$y_0 = 1$					
$x_1 = 1$	$y_1 = 2$	$\Delta y_0 = 1$				
$x_2 = 2$	$y_2 = 4$	$\Delta y_1 = 2$	$\Delta^2 y_0 = 1$			
$x_3 = 3$	$y_3 = 8$	$\Delta y_2 = 4$	$\Delta^2 y_1 = 2$	$\Delta^3 y_0 = 1$		
$x_4 = 4$	$y_4 = 15$	$\Delta y_3 = 7$	$\Delta^2 y_2 = 3$	$\Delta^3 y_1 = 1$	$\Delta^4 y_0 = 0$	
$x_5 = 5$	$y_5 = 26$	$\Delta y_4 = 11$	$\Delta^2 y_3 = 4$	$\Delta^3 y_2 = 1$	$\Delta^4 y_1 = 0$	$\Delta^5 y_0 = 0$

Daraus ist ersichtlich, dass das Interpolationspolynom maximal dritten Grades ist

a) Lineare Interpolation

Der gesuchte Wert bei $x = 2,5$ liegt zwischen $x_2 = 2$ und $x_3 = 3$. Deshalb wird die lineare Interpolation nur zwischen diesen beiden Werte durchgeführt.

$$\begin{aligned}
 p(x) &= y_2 + \frac{\Delta y_2}{h} (x - x_2) \\
 &= 4 + \frac{4}{1} (2,5 - 2) \\
 \underline{p(2,5) = 6}
 \end{aligned}$$

b) Quadratische Interpolation

Da der gesuchte Wert bei $x = 2,5$ liegt, wird die quadratische Parabel zwischen den Werten x_1, x_2 , und x_3 aufgespannt.

$$\begin{aligned} p(x) &= y_2 + \frac{\Delta y_2}{h} (x - x_2) + \frac{\Delta^2 y_2}{2!h^2} (x - x_2)(x - x_3) \\ &= 4 + \frac{4}{1} (2,5 - 2) + \frac{3}{2 \cdot 1} (2,5 - 2)(2,5 - 3) \\ &= 4 + 2 - \frac{0,75}{2} \\ \underline{p(2,5)} &= \underline{5,625} \end{aligned}$$

c) Kubische Interpolation

Die kubische Interpolationsformel benötigt drei Stützstellen. In diesem Fall kann man sowohl das Tripel x_1, x_2 , und x_3 oder das Tripel x_2, x_3 , und x_4 benutzen. Für den ersten Fall erhält man:

$$\begin{aligned} p(x) &= y_1 + \frac{\Delta y_1}{h} (x - x_1) + \frac{\Delta^2 y_1}{2!h^2} (x - x_1)(x - x_2) + \frac{\Delta^3 y_1}{3!h^3} (x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \\ &= 2 + \frac{2}{1} (2,5 - 1) + \frac{2}{2 \cdot 1} (2,5 - 1)(2,5 - 2) + \frac{1}{6 \cdot 1} (2,5 - 1)(2,5 - 2)(2,5 - 3) \\ &= 2 + 3 + 0,75 - 0,0625 \\ \underline{p(2,5)} &= \underline{5,6875} \end{aligned}$$

Für das zweite Tripel ergibt sich:

$$\begin{aligned} p(x) &= y_2 + \frac{\Delta y_2}{h} (x - x_2) + \frac{\Delta^2 y_2}{2!h^2} (x - x_2)(x - x_3) + \frac{\Delta^3 y_2}{3!h^3} (x - x_2)(x - x_3)(x - x_4) \\ &= 4 + \frac{4}{1} (2,5 - 2) + \frac{3}{2 \cdot 1} (2,5 - 2)(2,5 - 3) + \frac{1}{6 \cdot 1} (2,5 - 2)(2,5 - 3)(2,5 - 4) \\ &= 4 + 2 - \frac{0,75}{2} + 0,0625 \end{aligned}$$

$$p(2,5) = 5,6875$$

Die Abweichung zwischen dem linearen und dem quadratischen Ergebnis ist

$$\left| \frac{5,625 - 6}{5,625} \right| = 6,7\%,$$

während die Abweichung zwischen dem quadratischen und dem kubischen Ergebnis nur

$$\left| \frac{5,6875 - 5,625}{5,6875} \right| = 1,1\%$$

beträgt. Um die Ergebnisse zu beurteilen, können die gegebenen Punkte graphisch dargestellt werden (siehe Abbildung 3.3).

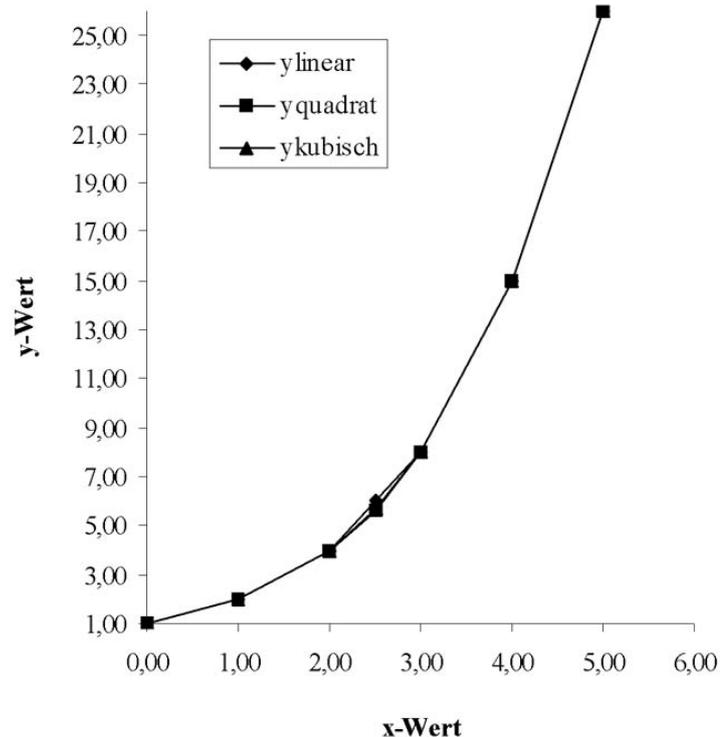


Abbildung 3.3: Darstellung der Messwerte und des interpolierten Wertes

Die graphische Darstellung zeigt, dass der gesuchte Wert tatsächlich zwischen 5 und 6 liegen soll. Es wird auch deutlich, dass die lineare Interpolation in diesem Fall kein gutes Ergebnis liefern kann. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, gegebene Punkte graphisch darzustellen und den gesuchten Wert einzuschätzen.

Im Fall eines realen Versuches ist es wichtig, genug Punkte zu haben, um die Form der Funktion mit guter Näherung zu bekommen. Dies kann festgestellt werden, wenn zusätzliche Punkte dazugenommen werden und sich die Form der Funktion nicht wesentlich ändert.

3.2 Interpolierende Polynomteilstücke (Spline)

Zur Darstellung einer gegebenen Funktion in einem Intervall kann man an Stelle eines einzigen Polynoms mit hohem Grad Abschnitte mehrerer Polynome niedrigeren Grades miteinander verknüpfen. Das klassische Beispiel sind Geradenstücke in Teilintervallen (siehe Abbildung 3.4). Dabei wird angenommen, dass die Funktion zwischen zwei Stützstellen fast linear ist. Dieses gilt vor allem, wenn die Stützstellen eng genug bei einander liegen.

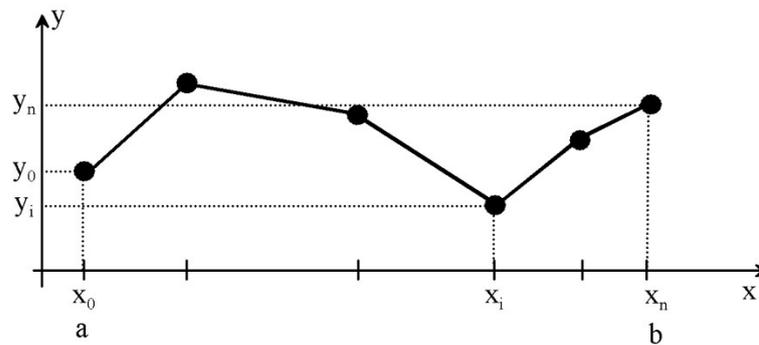


Abbildung 3.4: Darstellung von linearen Spline-Kurven

Derartige Approximationen sind zwar stetig, die erste Ableitung ist aber unstetig, d.h. es treten Ecken beim Übergang vom einem Intervall zum anderen auf. Im Folgenden wird ein Weg beschrieben, die Methode der Spline-Interpolation, bei dem kubische Parabelbögen so zusammengesetzt werden, dass die Ecken gerundet sind, die erste und zweite Ableitung der Approximation stetig ist. Polynome höheren Grades werden in der Regel nicht verwendet, da sie stark oszillieren.

Ein gegebenes Intervall $I = (a, b)$ wird durch die x -Werte $x_0 = a, x_1, x_2, \dots, x_n = b$ in n **Teilintervalle** aufgeteilt. Die kubischen Parabelbögen werden so in jedes dieser Teilintervalle eingepasst, indem vorgegebene y -Werte y_i an den Stellen x_i angenommen werden. An den Übergangsstellen zwischen den Teilintervallen müssen die links- und rechtsseitige erste und zweite Ableitung übereinstimmen (siehe Abbildung 3.5). Die Stützstellen (x_i, y_i) werden die Knoten des Splines (das Wort "Spline" bezeichnete ursprünglich ein flexibles Kurvenlineal) genannt.

Ein kubisches Polynom dritten Grades hat vier Koeffizienten. Allgemein lautet der Ansatz:

$$p_i(x) = c_{0i} + c_{1i}x + c_{2i}x^2 + c_{3i}x^3 \quad (3.22)$$

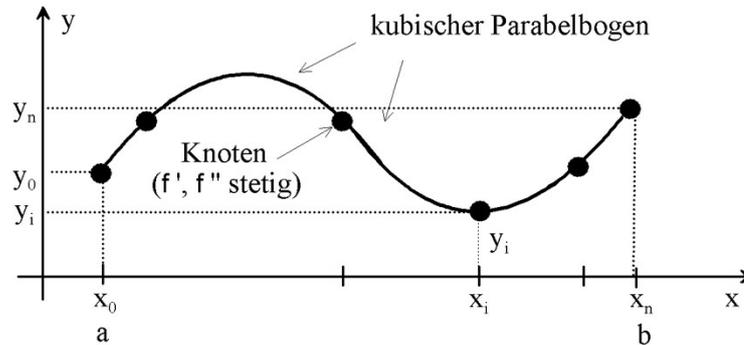


Abbildung 3.5: Darstellung von Spline-Kurven für ein kubisches System

Die Spline-Funktion ist demnach folgendermaßen definiert:

1. $S(x)$ ist im Bereich $[a, b]$ zweimal stetig differenzierbar.
2. $S(x)$ ist in jedem Intervall $[x_i \cdots x_{i+1}]$ durch ein kubisches Polynom $p_i(x)$ gegeben

$$S(x) \equiv \sum p_i(x)$$

$$p_i(x) := a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \quad (3.23)$$

3. $S(x)$ erfüllt die Interpolationsbedingungen $S(x_i) = y_i$ für alle i von $[1 \cdots n]$ im Gebiet $[a, b]$.
4. Je nach Gestaltung der Anschlussbedingungen unterscheidet man verschiedene Arten von Spline-Funktionen. So erhält man folgende spezielle **kubische Spline-Funktionen**.

Anschlussbedingung	Bezeichnung	Bemerkung
$S(x_0) = S''(x_0) = 0$ $S(x_n) = S''(x_n) = 0$	natürlich	$S(x_0)$ und $S(x_n)$ ist die Tangente an den Graphen von $S(x)$
$S''(x_0) = \alpha S''(x_n) = \beta$	verallgemeinert	
$S'(x_0) = \alpha S'(x_n) = \beta$	vorgegeben	erste Ableitung am Rand
$S'''(x_0) = \alpha S'''(x_n) = \beta$	vorgegeben	dritte Ableitung am Rand
$S(x_0) = S(x_n)$ $S'(x_0) = S'(x_n)$ $S''(x_0) = S''(x_n)$	periodisch	
$p_0(x) = p_l(x)$ $p_{n-2}(x) = p_{n-1}(x)$	not-a-knot	$S'''(x_l)$ und $S'''(x_n)$ sind stetig

Bei n Segmenten ergeben sich $4n$ Koeffizienten. Entscheidend ist, dass $4n$ Bedingungen für die $4n$ Koeffizienten erwartet werden. Es gibt 4 Bedingungen an jedem Knoten (x_i, y_i) für $i = 1, 2, \dots, n - 1$ (y -Wert und Übereinstimmung der Ableitungen). Dieses liefert $4n - 4$ Bedingungen. An den Endpunkten muss der y -Wert angenommen werden, und damit sind $4n - 2$ Bedingungen gefunden, d.h. die Spline-Kurve ist nicht vollständig definiert; zwei Freiheitsgrade bleiben.

$$\begin{array}{lll}
 p_i(x_i) = y_i & i = 0; 1; \dots; n & \text{Interpolationsbedingungen} \\
 p_i(x_i) = p_{i-1}(x_i) & & \text{Anschlussbedingungen} \\
 p'_i(x_i) = p'_{i-1}(x_i) & i = 0; 1; \dots; n - 1 & \\
 p''_i(x_i) = p''_{i-1}(x_i) & & \text{der Polynome } p_i \text{ an } p_{i-1}
 \end{array} \tag{3.24}$$

Man kann die zweite Ableitung an den Endpunkten Null setzen und erhält so eine **natürliche Splinekurve**.

$$\begin{aligned} p_n(x_n) &= a_n & S(x_0) \text{ und } S(x_n) \text{ ist die Tangente} \\ p_n''(x_n) &= 2c_n & \text{an den Graphen von } S(x) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Alternativ kann die erste Ableitung an den Endpunkten vorgegeben werden, um eine Funktion zu approximieren.

So ergibt sich ein Gleichungssystem mit $4n$ Gleichungen für $4n + 2$ Unbekannte. Die fehlenden beiden Gleichungen werden durch Vorgabe der Randbedingungen abgedeckt.

$$\begin{aligned} p_0''(x_0) &= 0 \\ p_n''(x_n) &= 0 \end{aligned} \quad \text{Randbedingungen} \quad (3.26)$$

Dieses Gleichungssystem kann nach den bekannten Methoden gelöst werden. In der Regel ist die Lösung dieses Gleichungssystems aufwendig, so dass nicht nur Gesamtschritt- sondern auch iterative Verfahren (siehe Abschnitt 1.3 Lösungsmethoden von Gleichungssystemen, Seite 17) angewandt werden müssen. Wie unten gezeigt wird, kann aber bei Benutzung eines bestimmten Schemas ein tridiagonales Gleichungssystem erzeugt werden, welches mit wenig Aufwand gelöst werden kann.

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \frac{3}{h_3}(a_4 - a_3) - \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) \\ \vdots \\ \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) - \frac{3}{h_{n-3}}(a_{n-2} - a_{n-3}) \\ \frac{3}{h_{n-1}}(a_n - a_{n-1}) - \frac{3}{h_{n-2}}(a_{n-1} - a_{n-2}) \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

Die Matrix \mathbf{A} ist tridiagonal, symmetrisch, diagonaldominant, positiv definit und besitzt nur positive Elemente. Damit ist diese Matrix stets invertierbar und stets eindeutig lösbar. Als Lösungsmethode kann vorteilhafter Weise der GAUSSsche Algorithmus für tridiagonale Matrizen (siehe Abschnitt 1.3.1 Lösungen von Gleichungssystemen, GAUSSscher Algorithmus, Seite 18) benutzt werden.

Beispiel zur Anwendung der Splinefunktion:

Folgende Messwerte sind als Stützstellen und -werte gegeben.

i	0	1	2	3	4
x_i	-1	-0,5	0	0,5	1
y_i	0,5	0,8	1	0,8	0,5

Für diese 5 Wertepaare soll eine natürliche kubische Spline-Funktion gefunden werden. Nach der Definition der Spline-Funktionen werden durch die 5 Wertepaare 4 Teilfunktionen $i = 1; 2; 3; 4$

$$p_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

mit einem jeweiligen Geltungsbereich von $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ gesucht.

Entsprechend des Rechenschemas werden folgende fünf Schritte ausgeführt.

Schritt	Berechnung	Ergebnis
1	$a_i = y_i$	$a_0 = 0,5$ $a_1 = 0,8$ $a_2 = 1,0$ $a_3 = 0,8$ $a_4 = 0,5$
2	$c_0 = c_n = 0$	$c_0 = 0$ $c_4 = 0$

Schritt	Berechnung	Ergebnis
3	$\begin{bmatrix} 2(h_0 + h_1) & h_1 & & \\ & h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 \\ & & h_2 & 2(h_2 + h_3) & h_3 \\ & & & & & & \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}$ $= \begin{bmatrix} \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) - \frac{3}{h_0}(a_1 - a_0) \\ \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) - \frac{3}{h_1}(a_2 - a_1) \\ \frac{3}{h_3}(a_4 - a_3) - \frac{3}{h_2}(a_3 - a_2) \end{bmatrix}$	$c_1 = 0$ $c_2 = 1, 2$ $c_3 = 0$
4	$b_i = \frac{1}{h_i}(a_{i+1} - a_i) - \frac{h_i}{3}(c_{i+1} - 2c_i)$	$b_0 = 0,6$ $b_1 = 0,6$ $b_2 = 0$ $b_3 = -0,6$
5	$d_i = \frac{1}{3h_i}(c_{i+1} - c_i)$	$d_0 = 0$ $d_1 = -0,8$ $d_2 = 0,8$ $d_3 = 0$

Damit ergeben sich nach Gleichung 3.23 folgende Teil-Spline-Funktionen:

$$p_i(x) := a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3$$

Teil-Spline-Funktion	Geltungsbereich
$p_0(x) = 0,5 + 0,6(x + 1)$	$-1 \leq x \leq -0,5$
$p_1(x) = 0,8 + 0,6(x + 0,5) - 0,8(x + 0,5)^3$	$-0,5 \leq x \leq 0$
$p_2(x) = 1,0 - 1,2x^2 + 0,8x^3$	$0 \leq x \leq 0,5$
$p_3(x) = 0,8 - 0,6(x - 0,5)$	$0,5 \leq x \leq 1$

Die grafische Darstellung des Splines zeigt Abbildung 3.6: Man erkennt, dass der Spline die

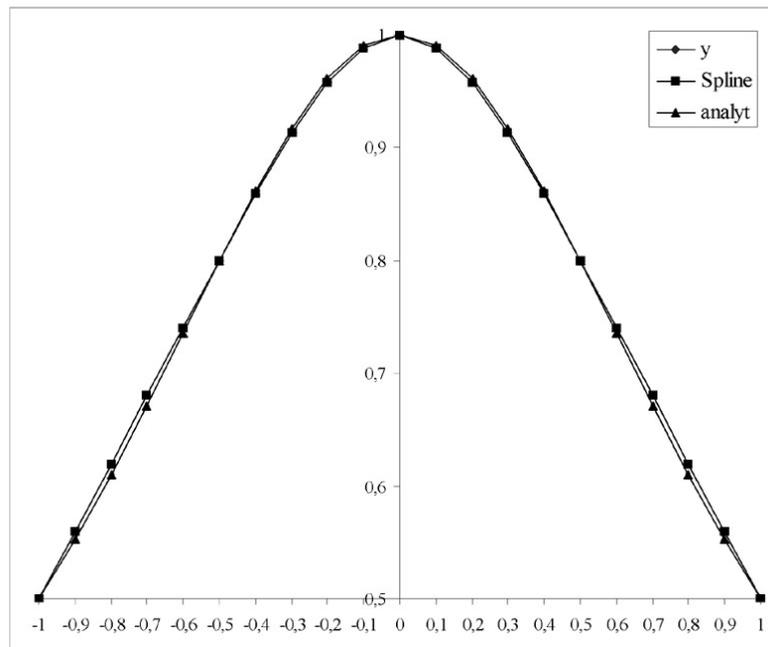


Abbildung 3.6: Interpolierte Spline-Funktion

ursprüngliche analytische Funktion

$$y = \frac{1}{x^2 + 1}$$

sehr gut nachbildet. Die maximale Abweichung zur analytischen Lösung beträgt 0,010244; dies entspricht 1,68%.

3.3 Kriging-Verfahren

Mit Kriging wird eine Familie spezieller Interpolationsverfahren bezeichnet, die auf folgendes Problem zielt:

Die Probenahme an einem Ort liefert Informationen für bestimmte raumbezogene Punkte. Es ist aber dadurch nicht bekannt, welche Werte für die zumessenden Variablen zwischen diesen Punkten vorliegen. Kriging ist ein Verfahren, das ermöglicht, die Werte an Zwischenpunkten oder den Durchschnitt über einen gesamten Block zu berechnen. Die verschiedenen Spezialverfahren basieren dabei alle auf der Bildung gewichteter Mittelwerte der raumbezogenen Variablen. Blockschätzungen sind vorwiegend im Bergbau notwendig, während Punktschätzungen für Kartendarstellungen eingesetzt werden, was im Folgenden erläutert wird.

Die einzelnen Kriging-Verfahren unterscheiden sich entweder in der Art der zu schätzenden Zielgrößen oder in ihrer methodischen Erweiterung zur Einbeziehung zusätzlicher Informationen.

Zusätzliche Informationen über das räumliche Verhalten einer ortsabhängigen Variablen bestehen in der Kenntnis anderer Messgrößen, die in Beziehung zu der betrachtenden Variablen stehen. Bekannt in der hydrogeologischen Praxis sind z.B. korrelierende Wasserinhaltsstoffe oder zeitliche Wiederholungsmessungen von Grundwasserdruckhöhen.

Gemeinsam sind allen Kriging-Verfahren die folgenden **Vorteile** gegenüber anderen Interpolationsverfahren:

- Kriging liefert den "besten" Schätzwert
- Kriging bezieht die Kenntnis der räumlichen Struktur der Variablen, das Variogramm, in die Schätzung mit ein.
- Die individuelle räumliche Anordnung des Messstellennetzes im Bezug auf das Interpolationsgitter wird berücksichtigt.
- Die Zuverlässigkeit der Ergebnisse wird für jeden Schätzpunkt in Form des Kriging-Fehlers angegeben.

Beachte:

Auch bei den Kriging-Verfahren muss beachtet werden, dass durch die mathematischen Verfahren **keine Informationsgewinn** erreicht werden kann. Es wird nur der Informationsgehalt der Messwerte (Stützwerte) verarbeitet. Dabei können durchaus Interpolationsergebnisse entstehen, die physikalischen Gesetzen widersprechen (z. B. Grundwasserisohypsen durch Vorfluter). Will man physikalisch korrekte Interpolationen erhalten, so ist eine feinquantisierte Simulation mittels physikalischer Modelle (z. B. Grundwasserströmungsmodelle) notwen-

dig und sinnvoll. Deshalb bieten derartige Simulationsprogramme interne Grafikroutinen zur Isolinienenerzeugung an.

Um die Kriging-Verfahren zu verstehen, müssen folgende Begriffe aus der Geostatistik bekannt sein:

Mittelwert	$m =$	$\frac{1}{n} \sum_{a=1}^n Z_a$
Erwartungswert	$E[Z] =$	$\int z \cdot p(z) dz = m,$ wobei $p(z)$ die Dichtefunktion ist
Varianz	$\text{var}(Z) =$	$\sigma^2 = E[(Z - E[Z])^2] = E[(Z - m)^2]$
Kovarianz zweier Zufallsvariablen	$\text{cov}(Z_i, Z_j) =$	$E[(Z_i - m_i)(Z_j - m_j)] = \sigma_{ij}$
		Z_i, Z_j
Korrelationskoeffizient	$\rho_{ij} =$	$\frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_i^2 \sigma_j^2}}$
Variogramm	$\gamma(\vec{h}) =$	$\frac{1}{2} E \left[\left(Z(\vec{x} + \vec{h}) - Z(\vec{x}) \right)^2 \right]$

Z ist eine ortsabhängige Zufallsvariable mit n bekannten Messwerten Z_a . Die Dichtefunktion $p(z)$ ist ein Maß dafür, mit welcher Wahrscheinlichkeit Z den Wert z_i annimmt. Das Variogramm ist ein Maß für die Variabilität einer Zufallsfunktion, durch Berechnung der Ungleichheit zweier Werte, die Punkten mit Abstand den Vektor \vec{h} entsprechen.

Dann kann das Kriging-Problem entsprechend Abbildung 3.7 dargestellt werden:

Wir haben eine Anzahl von Messwerten $Z(\vec{x}_a)$, wobei Z eine Zufallsvariable und \vec{x}_a die Messstellen eines Bereiches D sind.

Wir nehmen dann an, dass $Z(\vec{x}_a)$ eine Untermenge der Zufallsfunktion $Z(\vec{x})$ ist, die folgende Eigenschaften hat:

Sie ist eine stationäre Funktion 2. Ordnung, d.h.

1. der Erwartungswert ist konstant über dem Bereich D $E \left[Z(\vec{x} + \vec{h}) \right] = E[Z(\vec{x})]$
2. die Kovarianz zwischen zwei Punkten ist nur vom Vektor \vec{h} abhängig, der diese Punkte verbindet: $\text{cov} \left[Z(\vec{x} + \vec{h}), Z(\vec{x}) \right] = C(\vec{h})$

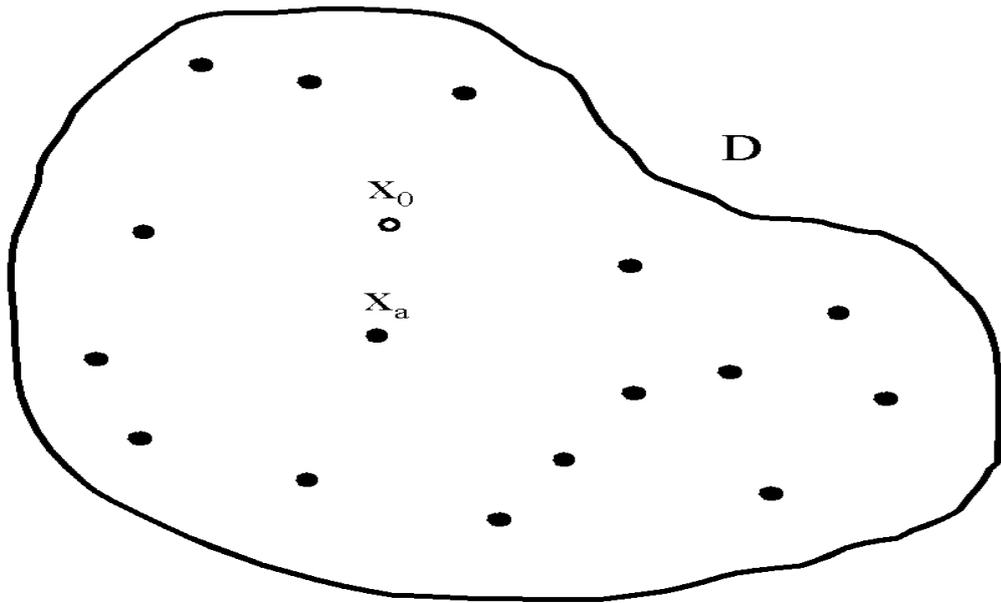


Abbildung 3.7: Darstellung des Kriging-Problems

Auf Grund dieser Annahmen wollen wir ein gewichtetes Mittel berechnen, um einen Schätzwert für die Stelle \vec{x}_0 zu bekommen

Der Kriging-Schätzer $Z^*(\vec{x}_0)$ stellt eine Linearkombination gewichteter Probenwerte Z_i und n benachbarter Punkte dar:

$$Z^*(\vec{x}_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\vec{x}_i) \quad (3.32)$$

Die Gewichte λ_i sind so zu bestimmen, dass der Schätzwert $Z^*(\vec{x}_0)$ des unbekanntes wahren Wertes die folgenden Bedingungen erfüllt:

1. $Z^*(\vec{x}_0)$ sei erwartungstreu, d.h. $E^*[Z^*(\vec{x}_0) - Z(\vec{x}_0)] = 0$
2. Der mittlere quadratische Fehler $E[Z^*(\vec{x}_0) - Z(\vec{x}_0)]^2$ sei ein Minimum.

Unter der Annahme der Stationarität ist der Erwartungswert $E[Z(\vec{x}_i)] = m$ und $Z(\vec{x}_0) = m$. Die Bedingung 1. (Erwartungstreue) liefert somit:

$$E \left[\sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\vec{x}_i) - Z(\vec{x}_0) \right] = \sum_{i=1}^n \lambda_i m - m = m \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i - 1 \right) = 0 \quad (3.33)$$

Hieraus folgt, dass die Summe der Gewichte 1 sein muss.

Mit Hilfe des Variogramms kann der Erwartungswert des quadratischen Fehlers ausgedrückt

werden:

$$\begin{aligned}
 E [Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)]^2 &= \text{var} (Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)) & (3.34) \\
 &= 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_0) - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j (\vec{x}_i - \vec{x}_j) - \gamma (\vec{x}_0 - \vec{x}_0)
 \end{aligned}$$

Um die Fehlervarianz unter der Nebenbedingung $1 \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \right)$ zu minimieren, wird ein LAGRANGE-Multiplikator μ eingeführt. Dann wird folgende Funktion minimiert:

$$\varphi = \text{var} (Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)) - 2\mu \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i - 1 \right)$$

Das Minimum erhält man durch Null-Setzen der partiellen Ableitungen $\frac{\partial \phi}{\partial \lambda_i}$ ($i = 1, \dots, n$) und $\frac{\partial \phi}{\partial \mu}$.

Dies führt zu dem linearen Kriging-Gleichungssystem (KGS) mit $n + 1$ Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 \sum_{j=1}^n \lambda_j \gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_j) + \mu &= \gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_0) \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, n \\
 \sum_{j=1}^n \lambda_j &= 1
 \end{aligned}$$

In Matrixform wird das KGS wie folgt geschrieben:

$$\begin{bmatrix}
 \gamma (\vec{x}_1 - \vec{x}_1) & \gamma (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) & \dots & \gamma (\vec{x}_1 - \vec{x}_n) & 1 \\
 \gamma (\vec{x}_2 - \vec{x}_1) & \gamma (\vec{x}_2 - \vec{x}_2) & \dots & \gamma (\vec{x}_2 - \vec{x}_n) & 1 \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
 \gamma (\vec{x}_n - \vec{x}_1) & \gamma (\vec{x}_n - \vec{x}_2) & \dots & \gamma (\vec{x}_n - \vec{x}_n) & 1 \\
 1 & 1 & \dots & 1 & 0
 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}
 \lambda_1 \\
 \lambda_2 \\
 \vdots \\
 \lambda_n \\
 \mu
 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
 \gamma (\vec{x}_1 - \vec{x}_0) \\
 \gamma (\vec{x}_2 - \vec{x}_0) \\
 \vdots \\
 \gamma (\vec{x}_n - \vec{x}_0) \\
 1
 \end{bmatrix}$$

Dabei ist im Fall von Punktschätzungen $\gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_i) = \gamma (0) = 0$, d.h. die Diagonale ist mit Null besetzt.

Da im stationären Fall die Beziehung $\gamma (\vec{h}) = C (0) - C (\vec{h})$ gilt, kann $\gamma (\vec{h})$ im KGS durch die Kovarianz $C (\vec{h})$ ersetzt werden. Dadurch erhält die Diagonale der Matrix die größten Elemente. In numerischer Hinsicht ist sie vorzuziehen und daher in den meisten Programmen verwirklicht.

Die Kriging-Schätzvarianz σ_K^2 für Punktschätzungen ergibt sich aus obigen Gleichungen:

$$\sigma_K^2 = \text{var} (Z^* (\vec{x}_0) - Z (\vec{x}_0)) = \mu + \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma (\vec{x}_i - \vec{x}_0) \quad (3.35)$$

In einem Sonderfall, bei dem keine räumliche Abhängigkeit der Daten existiert, erhält man für die Gewichte $\lambda_i = \frac{1}{n}$. Der Kriging-Schätzer ist jetzt das einfache arithmetische Mittel der benachbarten Proben.

Folgende Eigenschaften zeichnen den Kriging-Schätzer aus:

- Das KGS ist nur lösbar, wenn die Determinante der Matrix $(\gamma_{ij}) \neq 0$ ist. Praktisch bedeutet dies, dass eine Probe nicht doppelt auftreten darf (d.h. mit identischen Koordinaten)
- Kriging liefert einen exakten Interpolator.
- Das KGS hängt nur von $\gamma (\vec{h})$ bzw. $C (\vec{h})$ ab, nicht jedoch von den Werten der Variablen Z in den Probenpunkten x_i . Bei identischer Datenkonfiguration braucht das KGS nur ein Mal gelöst zu werden.
- Mit Hilfe des Schätzfehlers σ_K können Vertrauensgrenzen der Schätzung angegeben werden.

In der Praxis ist eine Reihe von Kriging-Verfahren entwickelt und angewandt worden, die komplexere Situationen betrachten, z.B. instationäre Variablen, Raum-Zeit-Abhängigkeit usw.

3.3.1 Aufgaben zur Anwendung von Interpolationsverfahren

Interpolieren Sie mittels der Verfahren:

- analytische Potenzfunktion
- LAGRANGE
- NEWTON
- Spline-Funktion

folgende Messwerttabellen

1. Für die Funktion der Normalverteilung $y(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}}$, die auszugsweise tabelliert ist:

x	1,00	1,20	1,40	1,60	1,80	2,00
y	0,2420	0,1942	0,1497	0,1109	0,0790	0,0540

wird der Wert $y(x)$ für $x = 1,5$ gesucht.

2. Interpolieren Sie die Funktion $y = \sqrt{x}$ für die Werte $x = 1,03$ und $x = 1,26$ an Hand der Tabelle.

x	1,00	1,05	1,10	1,15	1,20	1,25	1,30
y = \sqrt{x}	1,00000	1,02470	1,04881	1,07238	1,09544	1,11803	1,14017

3. Durch die drei Stützpunkte $(1, -2)$; $(2, 3)$; $(3, 1)$ ist eine ganze rationale Funktion möglichst niedrigen Grades zu legen.
Wie ändert sich diese Interpolationsfunktion, wenn man auch noch den Stützpunkt $(4, 4)$ dazunimmt?

Kapitel 4

Optimierungsprobleme

4.1 Analytische Lösung von Extremwertaufgaben

4.2 Iterative Optimumsuche

4.3 Methode der kleinsten Fehlerquadrate (MKQ-Methode)

In der wasserwirtschaftlichen Praxis wird die experimentelle Prozessanalyse (siehe Abschnitt 11.1 Modellklassifizierung, Seite 294ff) vorrangig zur Parameterbestimmung von unterirdischen Systemen, wie z. B. k-, S- und T-Werte von Böden, Abbauraten, Transportparameter, benutzt. Dabei wird durch eine theoretische Prozessanalyse die mathematische Modellstruktur festgelegt. Diese Modellstruktur versucht man in leicht lösbare Darstellungen zu überführen. Durch die Lösung von Bestimmungsgleichungen oder durch Lösung eines Parameterapproximationsproblems können dann die Parameter ermittelt werden. Es besteht somit die Aufgabe, auf Grund von Strukturkenntnissen oder -annahmen, ein solches Modell, bzw. solche Parametersätze, zu entwickeln, das

- die Eigenschaften des Systems so genau als notwendig widerspiegelt und
- die überlagerten Störeinflüsse und Fehler weitgehend eliminiert.

Zur Befriedigung dieser Forderungen dient der Vergleich der Ausgangsgrößen des Originals als Funktion der Eingangsgrößen oder einer unabhängigen Variablen (Zeit oder Ort) mit denen des Modells. Im Ergebnis dessen ist eine Veränderung der Parameter des Modells vorzunehmen oder das Modell selbst so lange zu verändern, bis die Abweichung ein Minimum erreicht hat. Die Veränderungen können nach einer bestimmten Strategie (Suchalgorithmen, Optimierungsprogramme), statistisch (Zufallsgenerator) oder empirisch erfolgen. Auch der visuelle Vergleich zwischen den beiden grafischen Darstellungen (Original- und Modellausgangssignal) ist möglich.

Diese Aufgabe wird auch als Parameterschätzung bezeichnet. Insbesondere die hier vorzustellenden Vorgehensweisen wird als **iterative Schätzaufgabe** klassifiziert.

Bei der algorithmierten Modellanpassung (siehe Abbildung 4.1) wird versucht, den Eingangsvektor, den Stellvektor y , sowohl auf den Prozess als auch auf das Modell wirken zu lassen. Mit einem ersten Parametersatz, den Startparametern, lässt sich der Ausgangsvektor des Modells x_M^1 in erster Näherung berechnen. Die Abweichung dieses Vektors von dem Ausgangsvektor x des Prozesses $(x_i - x_{Mi})$ wird als Güte der Anpassung des Modells bezeichnet. Bei den wasserwirtschaftlichen Anwendungen hat sich die quadratische Bewertung durchgesetzt. Das Ziel der Parameteränderung muss nun die Minimierung dieses Wertes $Q = \sum (x_i - x_{Mi})^2 \implies Min.$ sein.

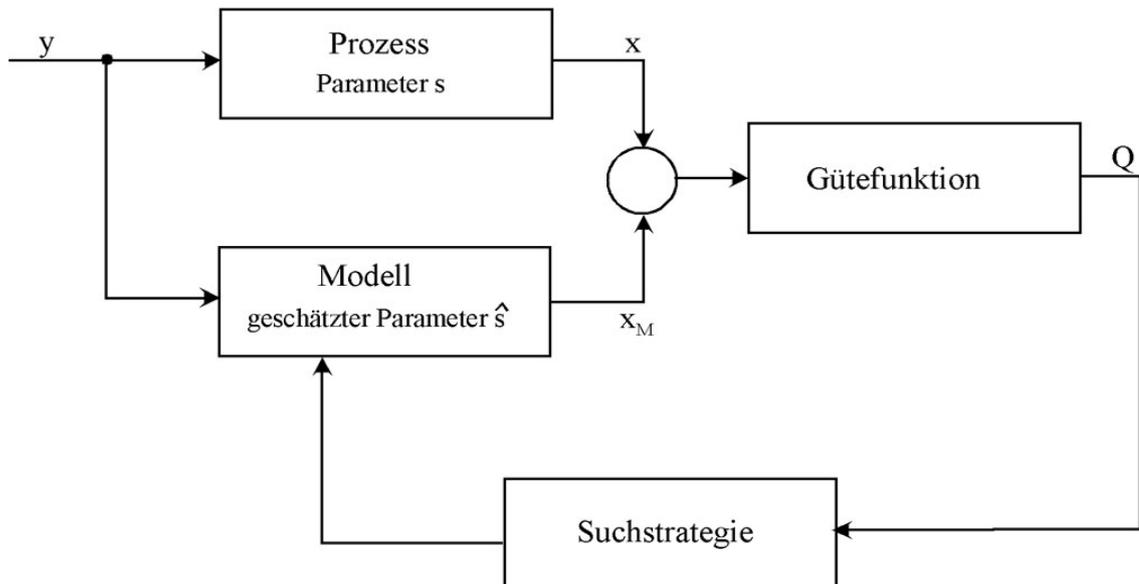


Abbildung 4.1: Iterative Modellanpassung

4.4 Suchstrategien

Für diese Optimierungsaufgaben ist es sehr entscheidend, in welcher Verarbeitungszeit das Minimum gefunden wird. Die Verarbeitungszeit T_v hängt dabei von der Grundrechenzeit T_n zur numerischen Auswertung des Modells und von der Anzahl der Iterationsschritte n ab. Die Anzahl der Lösungsabläufe wird in der Hauptsache von vier Einflüssen bestimmt, und zwar von:

- der Zahl der zu suchenden Parameter; sie entspricht der Anzahl der Suchrichtungen und geht damit exponentiell ein,
- der Ausbildung des Gütegebirges, d.h. der Steilheit und der Anzahl der Nebenminima,
- der Suchstrategie, wobei die Treffsicherheit für die richtige Suchrichtung, die Schrittwerte und das Erkennen von Nebenmaxima entscheidend ist und
- den Startparametern, die unnötige Suchschritte entscheidend verhindern.

Die Ausbildung des Gütegebirges und die Suchstrategie sind nicht unabhängig voneinander zu betrachten. Im Allgemeinen muss beachtet werden, dass es nicht ein "bestes" Suchprogramm gibt, sondern für bestimmte Klassen von Gütegebirgen eignen sich entsprechende Verfahren besonders.

Für die Lösung von Optimierungsproblemen gibt es eine Reihe von Verfahren. Man unterteilt diese Suchverfahren nach ihrer Suchstrategie in gradientenfreie, Gradienten- und Zufalls-

suchverfahren. In Tabelle 4.1 sind die wichtigsten Verfahren für iterative Schätzverfahren (nach WERNSTEDT) zusammengestellt.

Tabelle 4.1: Iterative Schätzverfahren (nach WERNSTEDT)

Verfahren	Lösungsgleichung für \hat{s} $\hat{s}^{i+1} = \hat{s} + \Delta \hat{s}^{i+1}$	Beispielsverfahren
Gradientenfreie Verfahren	$\Delta \hat{s}^{i+1} = a(i) \bullet \Delta \hat{s}$ wenn $a(i) \begin{cases} > \\ = \\ < \end{cases} 0$ dann $Q(i) \begin{cases} < \\ = \\ > \end{cases} Q(i-1)$ $\Delta \hat{s}$ vorgegebener Vektor	POWELL ROSENBROCK FIBONACCI
Gradientenverfahren	$\Delta \hat{s}^{i+1} = -g(i+1) \bullet R(i+1) \nabla Q(i)$ $g(i)$ Schrittweitenvektor $R(i)$ Richtungsmatrix $\nabla Q(i)$ Gradient zum i -ten Schritt	steilster Abstieg NEWTON NEWTON RAPHSON MARQUART LEVENBERG POWELL JONES
Zufallssuchverfahren	$\Delta \hat{s}^{i+1} = b(i+1) \bullet R(i+1) \Delta \hat{s}$ $b(i+1) = \begin{cases} 0 & \text{für } Q(i+1) \geq Q(i) \\ 1 & \text{für } Q(i+1) < Q(i) \end{cases}$ $\Delta \hat{s}$ Zufallsvektor	BROOKS RASTRIGIN WHITE SCHWEFEL

4.4.1 Spiralverfahren nach JONES

Die Verfahren der **nichtlinearen Regression**, die sich für Pumpversuchsauswertungen am besten eignen, haben das Ziel, Modellfunktionen $x_M(\hat{s})$ durch geeignete Wahl der Parameter \hat{s} an vorgegebene Werte (Messwerte) $x(s)$ anzugleichen. Dabei werden die Abweichungen zwischen den $x_M(\hat{s})$ und den $x(s)$ mit Gewichtungsfaktoren W belegt. Man geht in dem Fall davon aus, dass von dem Prozess n Abtastwerte (Messwerte) vorliegen und das Modell durch k unabhängige Parameter bestimmt ist.

Von Startwerten \hat{s}_0 ausgehend ist die Zielfunktion

$$Q(\hat{s}) = \sum_{i=1}^n (W_i (x(s)_i - x_M(\hat{s})_i)^2) \quad (4.1)$$

bezüglich der Parameter \hat{s}_i ($i = 1, k$) zu minimieren. Dies entspricht der Forderung der Methode der kleinsten Fehlerquadrate.

Eine Iteration besteht im Wesentlichen in der Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\sum_{j=1}^k A_{i,j} \cdot T_j = G_i \quad (4.2)$$

mit

$$G_i = \frac{dQ_i}{d\hat{s}_i} \quad (i = 1, k) \quad (4.3)$$

$$G_j = \sum_{i=1}^n W_{ii} \cdot \left(x(s)_i - x_M(\hat{s}_0)_i \frac{dx_{Mi}}{d\hat{s}_j} \right) \quad (4.4)$$

und

$$A_{i,j} = \sum_{k=1}^n W_{kk} \cdot \frac{dx_{Mk}}{d\hat{s}_i} \cdot \frac{dx_{Mk}}{d\hat{s}_j} \quad (4.5)$$

T_j stellt die Veränderung des j -ten Parameters dar. Das lineare Gleichungssystem erhält man dadurch, dass die Zielfunktion an der Stelle s_0 in einer TAYLOR-Reihe entwickelt, aber nach dem ersten Glied abgebrochen wird. Setzt man die partiellen Ableitungen dieser Funktion nach den Parametern gleich Null, folgt obiges Gleichungssystem.

Ist die lineare Näherung adäquat, müsste die Ungleichung

$$Q(\hat{s}_0 + T) < Q(\hat{s}_0)$$

gelten. In praktischen Fällen ist das nicht immer der Fall. Nach JONES findet man einen besseren Zielfunktionswert durch eine Vektormanipulation zwischen der TAYLOR-Richtung T und der negativen Gradientenrichtung G (siehe Abbildung 4.2). Der minimale Funktionswert innerhalb der Iteration wird an der Stelle $\hat{s}_0 + T$ erwartet. Andererseits ist bekannt, dass in Richtung des negativen Gradienten die Zielfunktion abnimmt. Damit ist gesichert, dass es

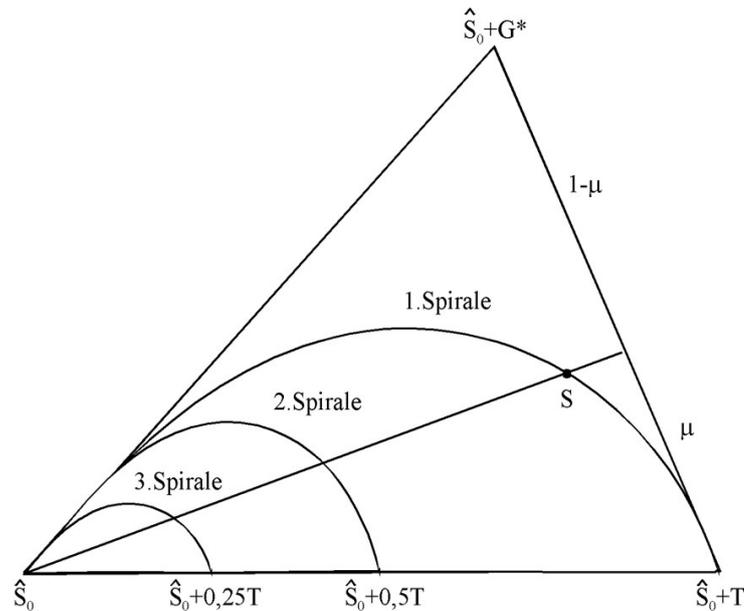


Abbildung 4.2: Spiralalgorithmus nach JONES

innerhalb des Dreiecks $\hat{s}_0 - (\hat{s}_0 + T) - (\hat{s}_0 + G^*)$ einen besseren Zielfunktionswert gibt. Dabei hat G^* die Richtung von G und den Betrag von T . Bei dessen Suche geht man davon aus, dass der TAYLOR-Schritt ausgeführt wird.

Eine Iteration ist beendet, wenn ein besserer Zielfunktionswert gefunden worden ist. Ist der TAYLOR-Schritt nicht erfolgreich, werden Punkte auf der 1. Spirale berechnet, die durch

$$S = A_1 \cdot (\mu G^* + (1 - \mu)T) \quad (4.6)$$

gegeben sind. Die verschiedenen S -Werte werden durch Veränderung des μ -Wertes gewonnen. μ beginnt mit 0, 1 und wird durch die Beziehung

$$m_{n+1} = \frac{Z \cdot m_n}{1 + (Z - 1) \cdot m_n} \quad (4.7)$$

berechnet ($Z \geq 2$). Ist $\mu > 0,9$ wird die Suche auf der aktuellen Spirale abgebrochen. Ist $Q(\hat{s}_0 + S) \geq Q(\hat{s}_0)$, wird der Vektor T halbiert und die nächste Spirale abgesucht. Je größer Z ist, um so weniger Punkte werden auf einer Spirale berechnet. Sowohl auf der Spirale als auch in TAYLOR-Richtung wird, wenn möglich, interpoliert. Ist auch längs der letzten Spirale kein besserer Wert gefunden worden, wird in negativer Gradientenrichtung mit immer kleiner werdenden Schrittweiten gesucht.

Kapitel 5

Gewöhnliche Differentialgleichungen

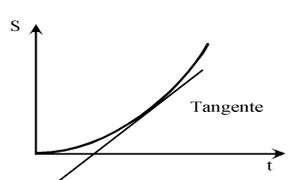
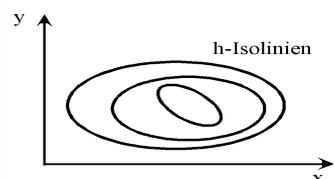
Gewöhnliche Differentialgleichungen (GDGL) (englisch: ODE - Ordinary Differential Equation) werden dadurch charakterisiert, dass die gesuchte Funktion abhängig von einer Variable ist, während bei den partiellen Differentialgleichungen (PDG) mehrere unabhängige Variable und ihre entsprechenden Ableitungen auftauchen, wie in den folgenden Beispielen zu sehen ist:

$$\frac{dx}{dt} + t^2 \cdot x = 2t^2 \quad \text{gewöhnliche DGL (ODE)}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad \text{partielle DGL (PDE)}$$

Ihre Darstellung ist in Tabelle 5.1 ersichtlich.

Tabelle 5.1: Darstellung der Differtialgleichungen

	Gewöhnliche DGL	Partielle DGL
Anzahl	eine Variable (unabhängige Veränderliche)	mehrere Variable (unabhängige Veränderliche)
Variablen	x, y, z oder t	x, y, z und/oder t
Beispiel	$v = \frac{ds}{dt}$	$\vec{v} = k \cdot \text{grad}(h)$ $\vec{v} = k \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial h}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial h}{\partial z} \vec{k} \right)$
Grafik	 <p>1-D-Funktion mit Tangente</p>	 <p>Spitzkegel mit beliebig gekrümmter Oberfläche</p>

In den folgenden Herleitungen und Beispielen wird bei den gewöhnlichen Differentialgleichungen davon ausgegangen, dass "x" für den Funktionswert steht und "t" als unabhängige Variable dient. Natürlich lassen sich alle Aussagen auch auf andere unabhängige Variablen übertragen, und für abhängige Funktionen können beliebige Variablennamen benutzt werden. Die vorzugsweise Benutzung des Buchstabens x als Variablenname trägt sowohl der Darstellung in vielen Lehrwerken der Mathematik als auch der Darstellung in der Signaltheorie Rechnung (siehe GRAEBER: Lehrmaterial zur Automatisierungstechnik bzw. Grundwassermesstechnik). Bei den partiellen Differentialgleichungen werden x, y und z als unabhängige Ortskoordinaten benutzt.

Die allgemeine Form einer GDGL lautet:

$$F \left[t, x(t), \frac{dx(t)}{dt}, \frac{d^2x(t)}{dt^2}, \dots, \frac{d^n x(t)}{dt^n} \right] = g(t) \quad (5.1)$$

Diese DGL erhält nach Tabelle 5.2 folgende Bezeichnung, wenn entsprechende Bedingungen gelten.

Tabelle 5.2: Bezeichnungen der Differentialgleichungen

Bezeichnung	Bedingung	Beispiel
Ordnung der DGL	n	$\frac{d^n x}{dt^n} + \frac{d^{n-1}x}{dt^{n-1}} + \frac{d^{n-2}x}{dt^{n-2}} = 0$
inhomogen	$g(t) \neq 0$	$\frac{dx}{dt} + t^2 \cdot x = 2t^2$
homogen	$g(t) = 0$	$\frac{dx}{dt} + t^2 \cdot x = 0$
explizit	$\frac{d^n x}{dt^n} = 0$	$\frac{d^2 x}{dt^2} = 0$
implizit	$F \left[t, x, \frac{dx}{dt}, \frac{d^n x}{dt^n} \right] = 0$	$\frac{dx}{dt} + t^2 \cdot x - 2t^2 = 0$
linear	$a_1(t) \neq a_1(x, t)$	$t \frac{dx}{dt} + t^2 x = 2t^2$
nichtlinear	$a_1(t) = a_1(x, t)$	$x \frac{dx}{dt} + t^2 x = 2t^2$

5.1 Aufstellen von Gleichungen

Die in den weiteren Abschnitten zu lösenden Differentialgleichungen beruhen auf der mathematischen Beschreibung natürlicher Prozesse. Die Ableitung mathematischer Gleichungen als Abbildung natürlicher Prozesse wird als Modellierung und die Abbildung als mathematisches Modell bezeichnet. Die Entwicklung solcher mathematischer Modelle ist Gegenstand der Abschnitte 11.2.1 Theoretische Prozessanalyse, Seite 301 sowie 11.2.2 Experimentelle Prozessanalyse, Seite 302. Hier soll nur ein Weg beschrieben werden, wie aus den physikalisch/chemischen Grundgesetzen und deren Wirkungen auf mathematische Modelle geschlossen werden kann. Dieser Weg der theoretischen Prozessanalyse, auch als mathematische Modellierung bezeichnet, wird im Allgemeinen von den Naturwissenschaftler bevorzugt.

Bei der theoretischen Prozessanalyse werden die Wechselwirkungen der Prozessvariablen, der Zustandsgrößen, mit ihrer Umgebung als Modellgleichungen mathematisch formuliert. Die wesentlichsten Wechselwirkungen zwischen dem System und seiner Umgebung werden dazu in Ursachen und Wirkungen unterteilt. Die Ursachen heißen Eingangsgrößen und die Wirkungen Ausgangsgrößen. Die Beschreibung mittels der physikalisch/chemischen Grundgesetze mündet meist in die Aufstellung von Bilanzgleichungen, insbesondere der Formulierung der Energie- und Massenbilanzgleichungen.

Die **Energiebilanzgleichung** mündet meist in das Kräftegleichgewichtsgesetz und führt auf Strömungsgesetze. Allgemein formuliert kann man von der Umwandlung von potentieller in kinetische Energie sprechen. Solche Energiewandlungen finden an so genannten Strömungswiderständen statt. Durch unterschiedliche potentielle Energien am Ein- bzw. Ausgang des Strömungswiderstandes (z. B. Rohrleitung, Grundwasserleiter, elektrischer Widerstand) als Triebkraft entsteht eine kinetische Energie in Form eines Stoff- oder Massestromes. Man spricht auch davon, dass über den Strömungswiderständen entsprechende potentielle Energie, auch als Potentiale bezeichnet, abgebaut wird, "abfällt" (z. B. Druckdifferenz, Spannungsabfall).

Die **Massenbilanzgleichung** geht davon aus, dass innerhalb eines betrachteten Systems (z. B. Behälter, Repräsentatives Einheitsvolumen) keine Masse verloren geht oder entsteht. Nur durch äußere Quellen oder Senken kann die Massenbilanz eines Systems verändert werden. Wenn dynamische Systeme betrachtet werden, muss die Speicherwirkung ebenfalls mit in die Massenbilanz einbezogen werden. Dies bedeutet, dass alle Massenströme, die auf ein System einwirken, in der Summe Null sein müssen (Knotenpunktgesetz). Mathematisch kann dieser Sachverhalt auch durch die Divergenz eines Strömungsvektors beschrieben werden, die in diesem Fall gleich Null sein muss ($\text{div } \vec{v} = 0$).

Beispiel zum Aufstellen von DGL:

Gesucht ist der Zusammenhang dem Volumenstrom \dot{V} der aus einer Rohrleitung bei freiem Gefälle ausfließt, wenn diese an einem Behälter angeschlossen ist (siehe Abbildung).

Aufgaben zum Aufstellen von DGL:

1. Der Grundwasserwiederanstieg und damit das Auffüllen der Restlöcher in den ehemaligen Braunkohlentagebauen dauert unter natürlichen Bedingungen zu lange. Deshalb wird versucht durch Fremdeinspeisung den Auffüllvorgang zu beschleunigen. Stellen Sie für den Auffüllvorgang $h_{(1,2)}(t)$, ohne Berücksichtigung des Grundwasserleiters und eventuellen Grundwasserneubildungsraten, die Differentialgleichung auf. In allen Fällen soll die Anfangsbedingung ($h_{t=0(1,2)} = 0$) gelten.
 - a) konstanter Volumenstrom (siehe Abbildung 11.13)
 - b) variabler Volumenstrom (siehe Abbildung 11.14)
 - c) gekoppelte Speicherkaskade (siehe Abbildung 11.15)

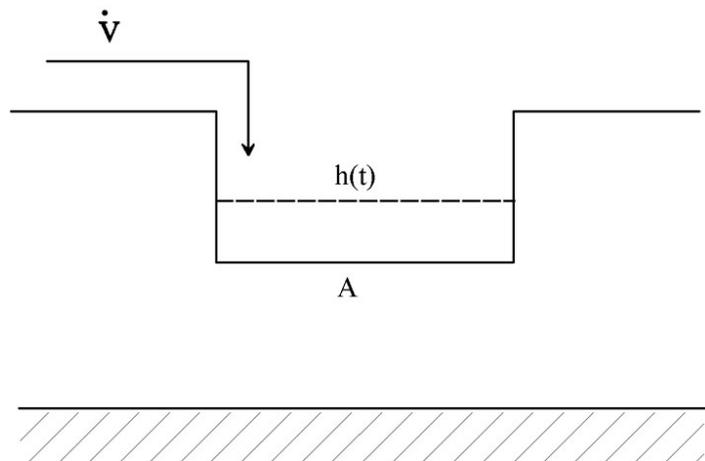


Abbildung 5.1: Füllvorgang eines Restloches mit konstantem Volumenstrom

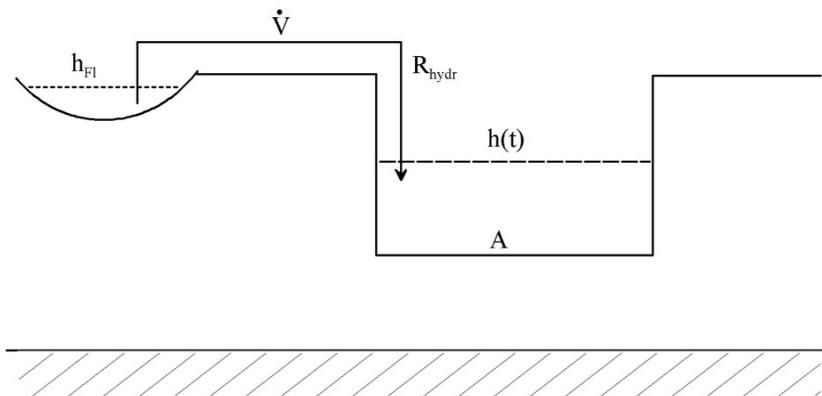


Abbildung 5.2: Füllvorgang eines Restloches mit variablem Volumenstrom

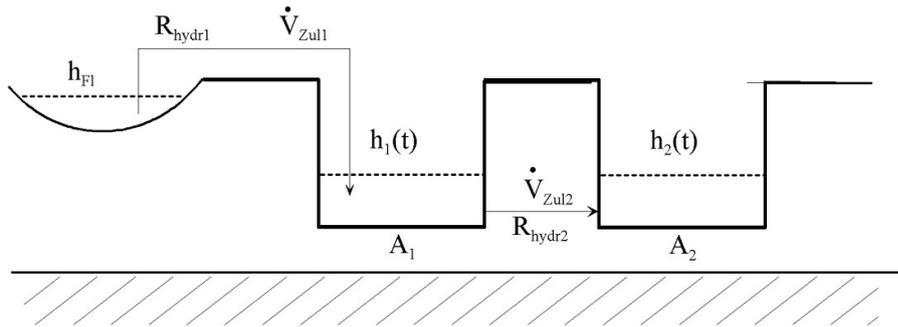


Abbildung 5.3: Gekoppelte Speicherkaskade

- Stellen Sie für folgendes hydraulische Schema (siehe Abbildung 5.4) mit zugehörigem Blockmodell die Differentialgleichung auf.
Gehen Sie dabei von linearisierten Verhältnissen und einem homogenen, isotropen Grundwasserleiter mit folgenden Parametern $k = 5 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s}$; $n_0 = 0,2$; $z_{Rmittel} = 20m$; $l = 50m$ aus:

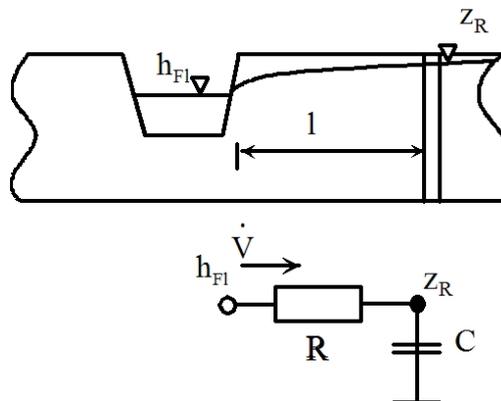


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung des Grundwasserspiegels mit Blockschaltbild

- Für die Wasserstandsregelung eines Bewässerungsgrabens wird eine Schwimmerregelung eingesetzt (siehe Abbildung 5.5).
Stellen Sie die Differentialgleichungen auf, mit denen der Wasserstand H berechnet werden kann. Die Fläche des Behälters beträgt A . Der Volumenstrom \dot{V} ist abhängig vom Wasserstand H .

$$\dot{V} = K \cdot \dot{V}_{max} \cdot (H_{max} - H)$$

- Bei einem statischen Batch-Versuch wird eine Bodenprobe mit einem Volumen V_B in einem Becherglas mit Wasser V_{H_2O} in Berührung gebracht. Die Schadstoffkonzentration im Boden soll $C_B = 125mg \cdot l^{-1}$ betragen, die im Wasser zum Zeitpunkt $t = 0$

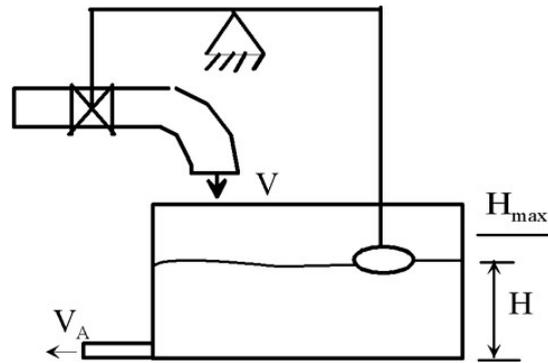


Abbildung 5.5: Wasserstandsregelung eines Bewässerungsgrabens

$C_{H_2O t=0} = 0 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}$. In erster Näherung wird sich ein Schadstofftransport aus dem Boden in das Wasser auf Grund der Diffusion einstellen. Stellen Sie für den Konzentrationsverlauf im Wasser die Differentialgleichung auf. Das Wasser/Feststoffverhältnis ($W/F = 1$) soll gleich eins sein. Der Diffusionswiderstand R_{Diff} ist gegeben.

Gegeben: $m_{qu} = 125 \text{ mg}$, $V_B = V_{H_2O} = 1 \text{ l}$, R_{Diff}

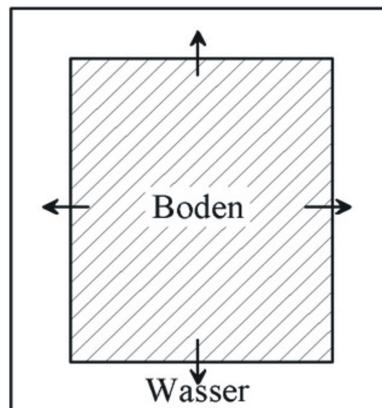


Abbildung 5.6: Prinzip des Batchversuches

5.2 Analytische Lösungsmethoden

5.2.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung

Für folgende inhomogene DGL erster Ordnung soll eine Lösung gefunden werden:

$$a_1(t) + a_0(t)x = g(t)$$

Es werden oft folgende verkürzte Schreibweisen benutzt:

$$\frac{dx}{dt} = \dot{x}$$
$$\frac{dy}{dx} = y'$$

Zur Lösung der inhomogenen DGL wird zuerst diese in eine homogene überführt.

$$a_1(t) \frac{dx_h}{dt} + a_0(t)x_h = 0 \quad (5.2)$$

Für die Lösung dieser homogenen DGL gibt es mehrere Methoden, wovon hier die der **Trennung der Variablen** und die **Ansatzmethode** beschrieben werden.

5.2.1.1 Lösung homogener Differentialgleichung

Homogene DGL erster Ordnung lauten:

$$a_1(t) \frac{dx_h}{dt} + a_0(t)x_h = 0 \quad (5.3)$$

Zur Vereinfachung werden die Funktionen a_0 und a_1 als Konstanten betrachtet.

- **Trennung der Variablen**

Die Methode der Trennung der Variablen hat das Ziel, die DGL so umzuformen, dass auf jeder Seite der Gleichung ein totales Differential steht, welches mittels der Integraloperation

in eine algebraische Form der Variablen überführt wird:

$$\begin{aligned}
 a_1 \frac{dx_h}{dt} + a_0 x_h &= 0 & (5.4) \\
 \frac{dx_h}{dt} &= -\frac{a_0}{a_1} x_h \\
 \frac{dx_h}{x_h} &= -\frac{a_0}{a_1} dt \\
 \int \frac{1}{x_h} dx_h &= -\frac{a_0}{a_1} \int dt \\
 \ln x_h + C_1 &= -\frac{a_0}{a_1} \cdot t \quad \text{oder} \quad \ln x_h - \ln C_2 = -\frac{a_0}{a_1} \cdot t \\
 \ln x_h &= -\left(\frac{a_0}{a_1} \cdot t + C_1\right) \quad \ln x_h = \ln C_2 - \left(\frac{a_0}{a_1} \cdot t\right) \\
 x_h &= e^{-\left(\frac{a_0}{a_1} \cdot t + C_1\right)} \quad x_h = C_2 \cdot e^{-\left(\frac{a_0}{a_1} \cdot t\right)}
 \end{aligned}$$

Beide Lösungen sind gleichberechtigt und nach den Logarithmengesetzen (siehe Abschnitt 1.1, Seite 2) ineinander überführbar.

Durch Gleichsetzen beider Gleichungen kann man zeigen, dass gilt:

$$C_2 = e^{C_1} \text{ bzw. } C_1 = -\ln C_2 \quad (5.5)$$

Da die Integrationskonstanten C_1 und C_2 und damit auch deren Logarithmus bzw. deren e -Funktion an dieser Stelle noch unbestimmt sind, sind beide Lösungen gleichwertig. Die Konstanten können aus Anfangs- oder Endbedingungen, z.B. C_1 und C_2 am Punkt $t = 0$ mit der bekannten Anfangsbedingung x_{h0} , bestimmt werden mit:

$$C_1 = -\ln x_{h0} \quad (5.6)$$

$$C_2 = x_{h0}$$

Somit ergibt sich für beide Varianten die gesuchte Lösung der homogenen DGL:

$$x_h = x_{h0} \cdot e^{-\left(\frac{a_0}{a_1} \cdot t\right)} \quad (5.7)$$

Beispiel zur Anwendung der Methode der Trennung der Variablen:

Gesucht ist die Lösung der DGL

$$\frac{dx}{dt} + t^2 \cdot x = 0, \quad \text{wobei gilt: } x_{t=0} = 3$$

Entsprechend des Algorithmus wird versucht, die totalen Differentiale (dx und dt) jeweils getrennt auf eine Seite der Gleichung zu separieren.

$$\frac{dx}{dt} = -t^2 x$$

$$\frac{1}{x} dx = -t^2 dt$$

$$\int \frac{1}{x} dx = \int -t^2 dt$$

$$\ln x = -\frac{1}{3}t^3 + C_1$$

$$x = e^{-\frac{1}{3}t^3 + C_1}$$

$$x = C_2 e^{-\frac{1}{3}t^3}$$

Setzt man $x_{t=0} = 3$ in die allgemeine Lösung ein, ergibt sich $C_2 = 3$, so dass die Lösung $x = 3e^{-\frac{1}{3}t^3}$ ist.

• **Ansatzmethode**

Grundgedanke der Ansatzmethode ist es, mittels bekannter Ansätze, die sich laut Erfahrungen bewährt haben, eine mögliche Lösung zu finden. Die bekanntesten Ansätze sind Kombinationen aus e -Funktionen und/oder Sinus-Funktionen. Auch allgemeine Potenzreihen haben sich vielfach bewährt. Der Vorteil besteht darin, dass nicht schwierige Integraloperationen ausgeführt werden müssen, sondern die Ansätze nur differenziert werden, was oftmals wesentlich einfacher zu realisieren ist:

$$\text{Ausgangs-DGL : } a_1 \cdot \frac{dx_h}{dt} + a_0 x_h = 0 \quad (5.8)$$

$$\text{Ansatz : } x_h = K \cdot e^{\lambda t}$$

$$\text{daraus abgeleitet : } \frac{dx_h}{dt} = \lambda \cdot K \cdot e^{\lambda t}$$

$$\text{Einsetzen in die homogene DGL liefert : } a_1 \cdot \lambda \cdot K \cdot e^{\lambda t} + a_0 \cdot K \cdot e^{\lambda t} = 0$$

$$\text{Daraus ergibt sich : } \lambda = -\frac{a_0}{a_1}$$

Der Kehrwert dieser Konstanten λ , der in dem Fall die Maßeinheit einer Zeit trägt, wird oft auch als Zeitkonstante T oder τ bezeichnet.

Damit erhält man:

$$x_h = K \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} = K \cdot e^{-\frac{t}{T}} = K \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (5.9)$$

Die Konstanten werden, wie bei der Methode der Trennung der Variablen, aus Anfangs- oder Endbedingungen bestimmt.

Z.B. kann K am Punkt $t = 0$ mit x_{h0} bestimmt werden:

$$K = x_{h0} \quad (5.10)$$

Damit ergibt sich:

$$x_h = x_{h0} \cdot e^{-\left(\frac{a_0}{a_1} t\right)} \quad (5.11)$$

Man erkennt, dass damit die gleiche Lösung für die DGL erzielt wird, wie auch bei den anderen Methoden.

5.2.1.2 Lösung der inhomogenen Differentialgleichung

Eine allgemeine inhomogene DGL lässt sich in der Form

$$a_1 \frac{dx}{dt} + a_0 x = g(t) \quad (5.12)$$

schreiben.

Ihre allgemeine Lösung ergibt sich aus der Addition der homogenen ($g(t) = 0$) Lösung $x_h(t)$ und einer partikulären Lösung $x_p(t)$, d.h.

$$x(t) = x_p(t) + x_h(t) \quad (5.13)$$

Die partikuläre Lösung der DGL erhält man z. B. durch die Methode der Variation der Konstanten, bei der von der homogenen Lösung ausgegangen und die vorhandene Konstante als Funktion der unabhängigen Variablen, hier der Zeit, aufgefasst wird.

• Methode der Variation der Konstanten

Die Lösung erfolgt in **vier** Teilschritten:

	Ausgangs-DGL	$a_1 \frac{dx}{dt} + a_0 x = g(t)$
1. Schritt	Verstümmeln (homogen machen)	$a_1 \frac{dx_h}{dt} + a_0 x_h = 0$
2. Schritt	Trennung der Variablen und	$\frac{dx}{x_h} = -\frac{a_0}{a_1} dt$
	Lösung der homogenen DGL	$x_h = C e^{-\frac{a_0}{a_1} t}$
3. Schritt	Variation der Konstanten	$x_p = C(t) e^{-\frac{a_0}{a_1} t}$

Nach der Regel zur Differentiation von Produkten folgt:

$$\frac{dx_p}{dt} = \frac{dC}{dt} \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} + C \cdot \left(-\frac{a_0}{a_1}\right) \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} \quad (5.14)$$

4. Schritt	Einsetzen in die DGL	$a_1 \frac{dx_p}{dt} + a_0 x_p = g(t)$
		$a_1 \cdot \left(\frac{dC}{dt} \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} + C \cdot \left(-\frac{a_0}{a_1}\right) \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} \right) + a_0 \cdot C \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} = g(t)$
		$a_1 \cdot \frac{dC}{dt} \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} + a_1 \cdot C \cdot \left(-\frac{a_0}{a_1}\right) \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} + a_0 \cdot C \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} = g(t)$
		$a_1 \cdot \frac{dC}{dt} \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1} t} = g(t)$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{+\frac{a_0}{a_1}t} \quad (5.15)$$

Diese DGL kann nach den vorgestellten Methoden zur Lösung von homogenen DGL behandelt werden, so z.B. mittels der Methode der Trennung der Variablen:

$$\begin{aligned} dC &= \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{+\frac{a_0}{a_1}t} dt & (5.16) \\ \int dC &= \int \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{+\frac{a_0}{a_1}t} dt \\ C(t) &= \int \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{+\frac{a_0}{a_1}t} dt \end{aligned}$$

Damit ist die Gesamtlösung der DGL

$$x(t) = x_p(t) + x_h(t) \quad (5.17)$$

$$x = C e^{-\frac{a_0}{a_1}t} + \int \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{+\frac{a_0}{a_1}t} dt e^{-\frac{a_0}{a_1}t} \quad (5.18)$$

Die Konstanten werden, wie bei der Methode der Trennung der Variablen, aus Anfangs- oder Endbedingungen bestimmt.

Z.B. kann C am Punkt $t = 0$ mit x_{h0} bestimmt werden:

$$C = x_0 - \left(\int \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{\frac{a_0 t}{a_1}} dt \right)_{t=0} \quad (5.19)$$

Damit ergibt sich:

$$x(t) = \left(x_0 - \int \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{+\frac{a_0}{a_1}t} dt \right)_{t=0} \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1}t} + \left(\int \frac{g(t)}{a_1} \cdot e^{+\frac{a_0}{a_1}t} dt \right) \cdot e^{-\frac{a_0}{a_1}t} \quad (5.20)$$

Die Lösungsmöglichkeit ist damit von der Integrierbarkeit der Störfunktion $g(t)$ abhängig.

Hinweis:

Die **Integration eines Produktes** zweier Funktionen ist nur bei einigen Funktionen möglich. Insbesondere, wenn die eine Funktion die Stammfunktion oder die Ableitung der anderen ist, kann man mit folgendem Ansatz eine Lösung herbeiführen:

$$\int u \cdot dv = u \cdot v - \int v \cdot du \quad (5.21)$$

Man merke sich nicht die Schlussformel, sondern den Weg:

1. Überführung in eine homogene DGL (Verstümmelung)
2. Trennung der Variablen
3. Variation der Konstanten oder Ansatzmethode
4. Einsetzen in die DGL

Bemerkungen zur Methode der Variation der Konstanten:

1. Sie kann nur für lineare DGL angewandt werden.
2. Die allgemeine Lösung weist eine lineare Abhängigkeit von der Konstanten auf.
3. Die allgemeine Lösung besitzt ein von Konstanten freies Glied. Dies ist, für sich genommen, eine partikuläre Lösung der inhomogenen DGL.
4. Es kommt häufig vor, dass eine nichtlineare DGL durch eine einfache Substitution in einer lineare DGL überführt werden kann.

Beispiele zur Lösung von inhomogenen DGL:

1. Gesucht ist die Lösung der DGL

$$t\dot{x} - x = t^2 \cos t$$

Lösung:

$$\text{Ausgangs-DGL : } t\dot{x} - x = t^2 \cos t$$

$$1. \text{ Verstümmeln : } t\dot{x} - x = 0$$

$$2. \text{ Trennung der Variablen : } \frac{dx}{x} = \frac{dt}{t}$$

$$: x = Ct$$

$$3. \text{ Variation der Konstanten : } x = C(t)t$$

$$: \dot{x} = \dot{C}t + C$$

$$4. \text{ Einsetzen in die DGL : } t(\dot{C}t + C) - Ct = t^2 \cos t$$

$$: t^2\dot{C} = t^2 \cos t$$

$$: \dot{C} = \cos t$$

$$: C = \sin t + C_1$$

$$\text{die allgemeine Lösung : } x = (C_1 + \sin t)t = t \sin t + C_1 t$$

2. Gesucht ist die Lösung der DGL:

$$2tx \cdot \dot{x} + t^2 - x^2 + 1 = 0$$

Lösung:

Durch die Substitution $z = x^2$ und $\dot{z} = 2x \cdot \dot{x}$ wird die DGL zu $t\dot{z} - z = -1 - t^2$, welche eine lineare DGL der unbekanntten Funktion z ist. Sie kann nach der Ansatzmethode

folgenderweise gelöst werden:

$$\text{Ausgangs-DGL : } 2tx\dot{x} + t^2 - x^2 + 1 = 0$$

$$\text{Substitution : } z = x^2$$

$$\text{substituierte DGL : } t\dot{z} - z = -1 - t^2$$

$$1. \text{ Verstümmeln : } t\dot{z} - z = 0$$

$$2. \text{ Trennung der Variablen : } \frac{dz}{z} = \frac{dt}{t}$$

$$: z = Ct$$

$$3. \text{ Variation der Konstanten : } z = C(t)t$$

$$: \dot{z} = \dot{C}t + C$$

$$4. \text{ Einsetzen in die DGL : } t(\dot{C}t + C) - Ct = -1 - t^2$$

$$: t^2\dot{C} = -1 - t^2$$

$$: \dot{C} = -\frac{1}{t^2} - 1$$

$$: C = \frac{1}{t} - t + C_1$$

$$\text{allgemeine Lösung in } z : z = 1 - t^2 + C_1t$$

$$\text{Rücksubstitution : } x^2 = 1 - t^2 + C_1t$$

$$\text{allgemeine Lösung in } x : x = \sqrt{1 - t^2 + C_1t}$$

5.2.1.3 Aufgaben zur Lösung von DGL erster Ordnung

1. Geben Sie die allgemeine Lösung folgender DGL an:

a) $y' = (y - 3) \cos x$

b) $y' = e^{x+y}$

c) $y' \sin x = y \ln y$

d) $2xy' + \frac{y^2}{x} = 0$

e) $y' + y + e^x = 0$

f) $y' + \frac{y}{x} = \sin x$

g) $\frac{dx}{dt} + t^2 \cdot x = 2t^2$

h) $y' = -xy^2$ mit $y(0) = 2$

i) $\frac{dx}{dt} + t^2x = 0$ mit $x(0) = 3$

j) $t \frac{dx}{dt} - x = t^2 \cos t$ mit $x(\pi/2) = \pi$

2. Für ein System mit einfacher Speicherwirkung gilt die DGL $T\dot{x}_a + x_a = Kx_e$ (x_a Ausgangsgröße, x_e Eingangsgröße, T Zeitkonstante, K proportionaler Übertragungsfaktor).

Wie ändert sich die Ausgangsgröße x_a in Abhängigkeit von der Zeit t , wenn gilt:
 $x_e = ct$ ($c = \text{const.}$)?

3. Bestimmen Sie jeweils die allgemeine und die durch Anfangsbedingungen festgelegte spezielle Lösung:

a) $y' = xy + 2x$ mit $y(0) = 2$

b) $y' + x^2y = x^2$ mit $y(2) = 1$

4. Für das hydraulische Schema (siehe Abbildung 5.7) mit zugehörigem Blockschaltbild gilt die Differentialgleichung:

$$h_{Fl} = R \cdot C \frac{dz_R}{dt} + z_R$$

Dabei ist von linearisierten Verhältnissen und einem homogenen, isotropen Grundwasserleiter mit folgenden Parametern $k = 5 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s}$; $n_0 = 0,2$; $z_{Rmittel} = 20m$; $l = 50m$ ausgegangen worden.

Berechnen Sie die Änderung des Wasserstandes, wenn sich der Flusswasserespiegel in

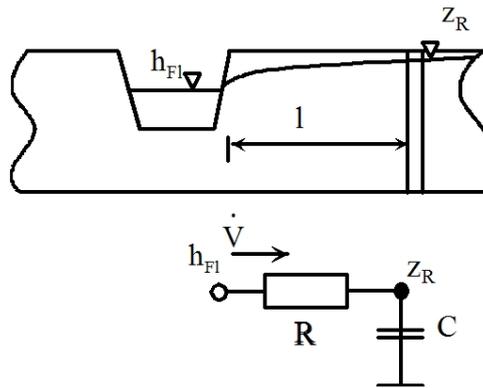


Abbildung 5.7: Schematische Darstellung des Grundwasserspiegels

erster Näherung wie folgt ändert:

- sprunghaft ($h_{Fl} = h_{FL} \cdot \mathbf{1}(t)$) und
- sinusförmig ($h_{Fl} = h_{FLm} \sin(\omega \cdot t) + h_{FL0}$, mit $\omega = 2\pi/\tau$ und $\tau = 7$ Tage).

5. Für die Konzentrations C durch Sorption von Schadstoffen an der Bodenmatrix soll folgende DGL gelten:

$$T_1 \dot{C} + C = K$$

wobei T_1 eine Zeitkonstante und K eine Konstante sein sollen. $T_1 = 1d^{-1}$, $K = 100$
Die Konzentrationsänderung zum Zeitpunkt $t = 0$ soll $C(0) = 0$ sein.

- Lösen Sie die DGL mittels der analytischen Methoden und berechnen Sie die Konzentrationsänderung für den Zeitpunkt $t = 1d$.
 - Skizzieren Sie den prinzipiellen Zeitverlauf der Konzentrationsänderung.
6. Der Grundwasserwiederanstieg und damit die Auffüllung der Restlöcher in den ehemaligen Braunkohlentagebauen dauert unter natürlichen Bedingungen zu lange. Deshalb wird mit einer konstanten Fremdeinspeisung der Auffüllvorgang ($h_{t=0} = 0$) beschleunigt. (siehe Abbildung 5.8)

$$A \frac{dh}{dt} = \dot{V}_{Zustr}$$

Lösen Sie diese Differentialgleichung mittels analytischer Methoden.

7. Es ist folgende Differentialgleichung gegeben:

$$\frac{dh}{dt} + k \cdot h = g \quad \text{mit} \quad h_{t=0} = 0$$

$g = 0,015m \cdot s^{-1}$ und $k = 0,01s^{-1}$

Lösen Sie die Differentialgleichung mittels algebraischer Methoden.

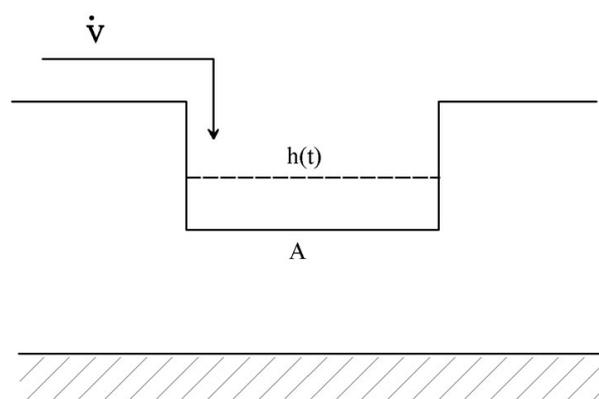


Abbildung 5.8: Füllvorgang eines Restloches

5.2.2 Gewöhnliche Differentialgleichungen höherer Ordnung

Eine allgemeine Lösung einer DGL n -ter Ordnung hat n Konstanten und stellt geometrisch eine n -parametrische Kurvenschar dar. Zur Festlegung einer Einzellösung aus dieser Schar braucht man n Anfangs- oder Randbedingungen.

Beispiel einer DGL 2. Ordnung:

Für die Bewegung eines Teilchens ist die DGL $y^2 y' + y^2 - 1 = 0$ gegeben. Die allgemeine Lösung dieser DGL ist $(x - C)^2 + y^2 = 1$. Diese Gleichung entspricht der Gesamtheit aller Kreise vom Radius $r = 1$ mit dem Mittelpunkt auf der x -Achse. Durch die Anfangsbedingung $y(0) = 1$ ergibt sich $C = 0$; dann ist die Einzellösung $x^2 + y^2 = 1$. Das Teilchen bewegt sich auf dem Kreis mit dem Radius $r = 1$ um den Mittelpunkt im Ursprung des Koordinatensystemes.

Für verschiedene Typen von DGL höherer Ordnung bieten sich unterschiedliche Lösungsmethoden an:

5.2.2.1 DGL vom Typ a

$$\lambda \cdot \frac{d^2 y}{dt^2} + \frac{dy}{dt} = 0 \quad (5.22)$$

Bei DGL höherer Ordnung dieses Typs wird mittels folgender **Substitution** der Grad der DGL verringert:

$$z = \frac{dy}{dt} \quad (5.23)$$

Die Ableitung lautet dann:

$$\frac{dz}{dt} = \frac{d^2 y}{dt^2} \quad (5.24)$$

Diese beiden Gleichungen werden in die DGL eingesetzt, die dann lautet:

$$\lambda \cdot \frac{dz}{dt} + z = 0 \quad (5.25)$$

Für diese DGL erhält man nach den Regeln für homogene DGL 1. Ordnung folgende Lösung (siehe Abschnitt 5.2.1.1, Seite 117):

$$z = k_1 e^{-\frac{t}{\lambda}} \quad (5.26)$$

bzw.

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{k_1}{\lambda} e^{-\frac{t}{\lambda}} \quad (5.27)$$

Aus dieser Gleichung erhält man auf Grund der Substitutionsbedingung:

$$z = \frac{dy}{dt} \tag{5.28}$$

$$\frac{dy}{dt} = k_1 e^{-\frac{t}{\lambda}}$$

Diese DGL kann wieder mit der Methode der Trennung der Variablen gelöst werden:

$$\frac{dy}{dt} = k_1 e^{-\frac{t}{\lambda}} \tag{5.29}$$

$$\int dy = \int k_1 e^{-\frac{t}{\lambda}} dt$$

$$y = -\lambda \cdot k_1 \cdot e^{-\frac{t}{\lambda}} + k_2$$

Da hier zwei Konstanten existieren, müssen auch zwei Bedingungsgleichungen gefunden werden. Bei e^{-t} -Funktionen bieten sich die Werte $t = 0$ und $t = \infty$ an, da dann die e -Funktion einfache Werte (1 und 0) liefert:

$$k_2 = y(\infty)$$

$$k_1 = -\frac{y(0) - y(\infty)}{\lambda}$$

Damit lautet die Lösung:

$$y(t) = (y(0) - y(\infty)) \cdot e^{-\frac{t}{\lambda}} + y(\infty) \tag{5.30}$$

Bemerkung:

Dieser Lösungsweg läßt sich auch für die DGL

$$a \frac{d^2 y}{dt^2} + b \frac{dy}{dt} = g(t) \tag{5.31}$$

anwenden. Die Substitution $z = \frac{dy}{dt}$ führt zu einer linearen DGL, die an Hand der Methode der Variation der Konstanten gelöst werden kann.

5.2.2.2 DGL vom Typ b

$$a \frac{d^2 y}{dt^2} + b \frac{dy}{dt} + cy = 0 \quad (5.32)$$

Diese DGL soll nach der **Ansatzmethode** gelöst werden. Sinn und Zweck der Ansatzmethode ist, dass komplizierte Operationen der Integration der Differentialgleichung umgangen werden und man nur die meist wesentlich einfacheren Operationen der Differentiation ausführen muss. Auch hier wird ein gängiger Lösungsansatz, der aus der Erfahrung heraus erfolgversprechend aussieht, benutzt. Für diesen Ansatz werden alle Ableitungen gebildet, die in der DGL auftreten.

Es gelte folgender Ansatz und dessen Ableitungen:

$$y = C \cdot e^{\lambda t} \quad (5.33)$$

$$\frac{dy}{dt} = C \cdot \lambda \cdot e^{\lambda t}$$

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = C \cdot \lambda^2 \cdot e^{\lambda t}$$

Wird dies in die DGL eingesetzt, so erhält man:

$$(a\lambda^2 + b\lambda + c) \cdot C \cdot e^{\lambda t} = 0 \quad (5.34)$$

Für $t \neq -\infty$ kann man durch $e^{\lambda t}$ dividieren und erhält:

$$a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \quad (5.35)$$

Bringt man dies auf die Normalform der quadratischen Gleichung, so ergibt sich mit den neuen Konstanten $d = \frac{b}{a}$ und $f = \frac{c}{a}$:

$$\lambda^2 + \frac{b}{a}\lambda + \frac{c}{a} = 0 \quad \text{bzw.} \quad \lambda^2 + d\lambda + f = 0 \quad (5.36)$$

Diese Gleichung wird auch als die **Charakteristengleichung der DGL** bezeichnet.

Die Lösung dieser Charakteristengleichung lautet allgemein:

$$\lambda_{1,2} = -\frac{d}{2} \pm \sqrt{\frac{d^2}{4} - f} \quad (5.37)$$

Je nach Größe der Koeffizienten d und f ergeben sich drei verschiedenen Fälle:

1. Der **1. Fall** ergibt sich, wenn $\frac{d^2}{4} - f > 0 \implies \frac{d^2}{4} > f$, bzw. $b^2 > 2 \cdot c \cdot a$.
Dann sind $\lambda_1 \neq \lambda_2$ und reelle Zahlen,

$$\lambda_{1,2} = -\frac{d}{2} \pm \sqrt{\frac{d^2}{4} - f} \quad (5.38)$$

Damit lautet die Lösung der DGL:

$$y = C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \quad (5.39)$$

Dieser Fall ergibt eine asymptotische Kurve, die sich einem stationären Endzustand nähert. Dieser liegt im reellen Zahlenbereich, wenn λ_1 und λ_2 negative Werte annehmen.

2. Der **2. Fall** ergibt sich, wenn $\frac{d^2}{4} - f < 0 \implies \frac{d^2}{4} < f$, bzw. $b^2 < 2 \cdot c \cdot a$.
 Dann werden $\lambda_{1,2}$ in der komplexen Zahlenebene dargestellt, da der Radicant negativ ist und die Quadratwurzel aus (-1) die komplexe Zahl j liefert.

$$\lambda_{1,2} = -\frac{d}{2} \pm \sqrt{\frac{d^2}{4} - f} \quad (5.40)$$

$$\lambda_{1,2} = -\frac{d}{2} \pm \sqrt{(-1) \left(f - \frac{d^2}{4} \right)}$$

$$\lambda_{1,2} = -\frac{d}{2} \pm \sqrt{(-1)} \cdot \sqrt{\left(f - \frac{d^2}{4} \right)}$$

$$\lambda_{1,2} = -\frac{d}{2} \pm j \cdot \beta$$

Setzt man diese Lösung der Charakteristengleichung in die Ansatzfunktion ein, ergibt sich

$$y = C_1 \cdot e^{(-\frac{d}{2} + j \cdot \beta) \cdot t} + C_2 \cdot e^{(-\frac{d}{2} - j \cdot \beta) \cdot t} \quad (5.41)$$

$$y = e^{-\frac{d}{2} \cdot t} (C_1 \cdot e^{+j \cdot \beta \cdot t} + C_2 \cdot e^{-j \cdot \beta \cdot t})$$

Nach den Gesetzen der Exponentialrechnung konnte die Summe der Exponenten in ein Produkt zweier e-Funktionen zerlegt werden. Gleichzeitig kann man berücksichtigen, dass die e-Funktionen mit imaginärem Exponenten in trigonometrische Funktionen umgeformt werden können.

Damit lautet die Lösung der DGL

$$y = e^{-\frac{d}{2} \cdot t} (C_1 \cos \beta t + C_2 \sin \beta t) \quad (5.42)$$

Diese Funktion stellt die allgemeine Form der Schwingungsgleichung dar. Für Sonderfälle erhält man sinusförmige Schwingungen. Dies ist der Fall, wenn C_1 oder C_2 identisch Null sind. Bei $d = 0$ erhält man eine ungedämpfte Schwingung, d.h. die Amplitude ist konstant, bei $d < 0$ eine gedämpfte, bei welcher die Amplitude gegen Null geht, und bei $d > 0$ eine sich aufschaukelnde Schwingung.

3. Der **3. Fall** ergibt sich, wenn $\frac{d^2}{4} - f = 0 \implies \frac{d^2}{4} = f$, bzw. $b^2 = 2 \cdot c \cdot a$
In dem Fall ist der Diskriminant gleich Null, und man erhält zwei identische Lösungen:

$$\lambda = \lambda_1 = \lambda_2 = -\frac{d}{2} = -\frac{b}{2a} \quad (5.43)$$

Damit ist die Lösung nicht mehr eindeutig! Man erhält als Lösung zwei unterschiedliche Funktionen, die die DGL befriedigen:

$$y_1 = Ce^{\lambda t} \quad (5.44)$$

$$y_2 = C_1te^{\lambda t} + C_2e^{\lambda t}$$

Beispiele zur Lösung von DGL 2. Ordnung:

1. Gesucht ist die allgemeine Lösung der DGL $y'' - y = 0$.

$$\text{Ausgangs-DGL : } y'' - y = 0$$

$$\text{Ansatz : } y = e^{\lambda t}$$

$$: y' = \lambda e^{\lambda t}$$

$$: y'' = \lambda^2 e^{\lambda t}$$

$$\text{Einsetzen in die DGL : } (\lambda^2 - 1) e^{\lambda t} = 0$$

$$\text{Charakteristengleichung : } \lambda^2 - 1 = 0$$

$$\text{Lösung der Charakteristiken-Gl. : } \lambda_{1,2} = \pm 1$$

$$\text{allgemeine Lösung : } y = C_1 e^t + C_2 e^{-t}$$

2. Gesucht ist die allgemeine Lösung der DGL $\ddot{y} + y = 0$.

$$\text{Ausgangs-DGL : } \ddot{y} + y = 0$$

$$\text{Ansatz : } y = e^{\lambda t}$$

$$: \dot{y} = \lambda e^{\lambda t}$$

$$: \ddot{y} = \lambda^2 e^{\lambda t}$$

$$\text{Einsetzen in die DGL : } (\lambda^2 + 1) e^{\lambda t} = 0$$

$$\text{Charakteristengleichung : } \lambda^2 + 1 = 0$$

$$\text{Lösung der Charakteristiken-Gl. : } \lambda_{1,2} = \pm j$$

$$\text{Es gilt : } e^{\pm jt} = \cos t \pm j \sin t$$

$$\text{allgemeine Lösung : } y = C_1 \cos t + C_2 \sin t$$

3. Gesucht ist die allgemeine Lösung der DGL $\ddot{y} + 2\dot{y} + y = 0$.

$$\text{Ausgangs-DGL : } \ddot{y} + 2\dot{y} + y = 0$$

$$\text{Ansatz : } y = e^{\lambda t}$$

$$: \dot{y} = \lambda e^{\lambda t}$$

$$: \ddot{y} = \lambda^2 e^{\lambda t}$$

$$\text{Einsetzen in die DGL : } (\lambda^2 + 2\lambda + 1) e^{\lambda t} = 0$$

$$\text{Charakteristengleichung : } \lambda^2 + 2\lambda + 1 = 0$$

$$\text{Lösung der Charakteristiken-Gl. : } \lambda_{1,2} = -1$$

$$\text{allgemeine Lösung : } y = C_1 t e^{-t} + C_2 e^{-t}$$

Bemerkung:

Dieser Lösungsweg lässt sich ebenfalls für DGL höherer Ordnung ($n \geq 3$) mit den entsprechenden Lösungsansätzen der algebraischen Gleichungen höherer Ordnung anwenden.

Beispiel zur Lösung von DGL 3. Ordnung:

Gesucht ist die Lösung der DGL $\ddot{y} + \dot{y} = 0$.

$$\text{Ausgangs-DGL : } \ddot{y} + \dot{y} = 0$$

$$\text{Ansatz : } y = e^{\lambda t}$$

$$\text{: } \dot{y} = \lambda e^{\lambda t}$$

$$\text{: } \ddot{y} = \lambda^2 e^{\lambda t}$$

$$\text{: } \ddot{y} = \lambda^3 e^{\lambda t}$$

$$\text{Einsetzen in die DGL : } (\lambda^3 + \lambda) e^{\lambda t} = 0$$

$$\text{Charakteristengleichung : } \lambda^3 + \lambda = \lambda(\lambda^2 + 1) = 0$$

$$\text{Lösung der Charakteristiken-Gl. : } \lambda_1 = +j, \quad \lambda_2 = -j, \quad \lambda_3 = 0$$

$$\text{allgemeine Lösung : } y = C_1 + C_2 \cos x + C_3 \sin x$$

5.2.2.3 DGL vom Typ c

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \frac{1}{t} \frac{dy}{dt} + y = 0 \quad (5.45)$$

Diese DGL soll auch wieder nach der **Ansatzmethode** gelöst werden. Der Lösungsansatz mit den dazugehörigen Ableitungen lautet:

$$y = 1 + a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_4 t^4$$

$$\frac{dy}{dt} = 2a_2 t + 3a_3 t^2 + 4a_4 t^3 \dots$$

$$\frac{d^2y}{dt^2} = 2a_2 + 2 \cdot 3a_3 t + 4 \cdot 3a_4 t^2 \dots$$

Werden diese Gleichungen in die DGL eingesetzt und die Gleichung nach Potenzen von t geordnet, so erhält man:

$$(1 + 2 \cdot 2a_2) \cdot t^0 + 3 \cdot 3a_3 \cdot t^1 + (a_2 + 4 \cdot 4a_4) \cdot t^2 + (a_3 + 5 \cdot 5a_5) \cdot t^3$$

$$+ \dots + (a_n + (n+2)^2 \cdot a_{n+2}) \cdot t^n = 0 \quad (5.46)$$

Eine Lösung dieser Gleichung, die für alle t -Werte gilt, ergibt sich, wenn die Faktoren der Potenzreihenglieder gleich Null werden.

Das ist der Fall, wenn gilt:

$$a_3 = a_5 = a_7 = \dots a_{2n+1} \dots = 0$$

$$a_2 = -\frac{1}{2^2}$$

$$a_4 = -\frac{a_2}{4^2} = \frac{1}{2^2 4^2}$$

$$a_6 = -\frac{a_4}{6^2} = -\frac{1}{2^2 4^2 6^2}$$

$$a_{2n} = -\frac{a_{2n-2}}{(2n)^2} = (-1)^{\frac{2n}{2}} \frac{1}{2^2 \cdot 4^2 \cdot 6^2 \cdot \dots \cdot (2n)^2} = (-1)^{\frac{2n}{2}} \frac{1}{\prod_{k=1}^n (2k)^2}$$

Setzt man diese Koeffizienten in den Lösungsansatz, so erhält man die Lösung der DGL, die als BESSEL-Funktion 0-ter Ordnung bezeichnet wird:

$$y = 1 - \frac{t^2}{2^2} + \frac{t^4}{2^2 4^2} - \frac{t^6}{2^2 4^2 6^2} + \dots + (-1)^{\frac{2n}{2}} \frac{t^{2n}}{\prod_{k=1}^n (2k)^2} + \dots = I_0(t) \quad (5.47)$$

5.2.2.4 Aufgaben zur Lösung von DGL höherer Ordnung

Die folgenden DGL sind zu lösen:

a) $yy'' = y'^2$

b) $y'' - y' = e^x$

c) $y'' + 4y' + a_0y = 0$ für $a_0 = 3, 4, 5$

5.3 Integraltransformationen

5.3.1 Zeit- und Frequenzbereich

Integraltransformationen sind ein Mittel, um über einen Umweg zur Lösung einer Differentialgleichung zu kommen. Man unterscheidet bei diesen Transformationen zwei Bereiche:

- den Original- oder Zeitbereich und
- den Bild- oder Frequenzbereich.

Die Integration nach der unabhängigen Variablen im Originalbereich wird in eine Multiplikation im Bildbereich transformiert. Dabei können die schwierigen Integrationsverfahren umgangen werden. Die Beziehungen zwischen den Bereichen und ihre besonderen Kennzeichen sind im folgenden Schema (siehe Abbildung 5.9) dargestellt.

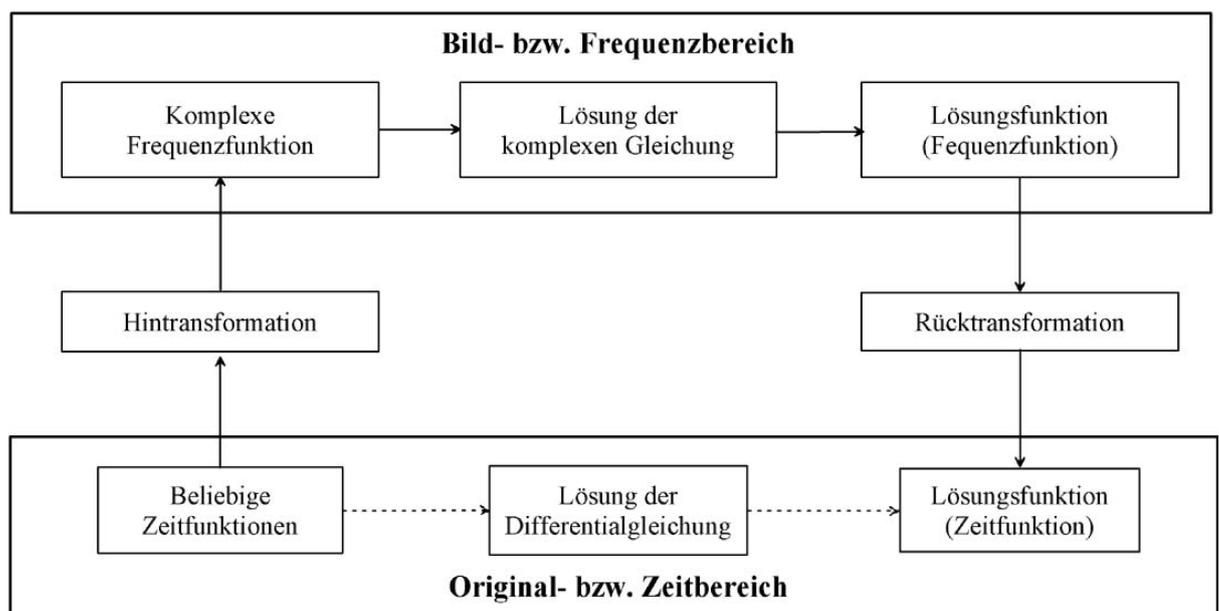


Abbildung 5.9: Zusammenhang zwischen Original- und Bildbereich

Die bekanntesten Transformationen sind die LAPLACE-, die LAPLACE-CARSON-, die FOURIER-, die LAURENT- und die Z-Transformation. Die Theorie der meisten dieser Transformationen ist allgemein bekannt und kann in der vielfältigen Literatur?? nachgelesen werden. Es soll deshalb hier nur auf die wesentlichen Gesichtspunkte eingegangen und Nachteile, welche einer breiten Anwendung entgegen stehen, aufgezeigt werden.

Im Folgenden werden die Transformationen an Hand der Zeit als unabhängige Variable dargestellt, da dies die häufigsten Ingenieurwendungen sind. Ungeachtet dessen sind die Transformationen auf alle unabhängigen Variablen anwendbar, d.h. auch auf die Raumvariablen.

Die Gruppe der Integraltransformationen kann in die der stetigen und die der diskreten Transformationen eingeteilt werden. Die **stetigen Integraltransformationen** können durch die allgemeine Gleichung

$$F(f(t)) = \int_{t_1}^{t_2} k(t, f(t)) f(t) dt \quad (5.48)$$

dargestellt werden, wobei $k(t, f(t))$ als Kern der Transformation bezeichnet wird. Der Einfachheit halber wird nur eine unabhängige Variable (z. B. t) betrachtet.

Als Sonderfälle sind dabei die in Tabelle 5.3 aufgeführten Beziehungen bekannt.

Tabelle 5.3: Sonderfälle bei stetigen Integraltransformationen

Transformationskern $k(t, f(t))$	untere Integrationsgrenze t_1	obere Integrationsgrenze t_2	Bezeichnung
e^{-pt}	$0(-\infty)$	∞	LAPLACE-Transformation
pe^{-pt}	$0(-\infty)$	∞	LAPLACE-CARSON-Transformation
$e^{-j\omega t}$	$0(-\infty)$	∞	FOURIER-Transformation

Der Zusammenhang zwischen den drei aufgezählten Integraltransformationen kann in folgender Form anschaulich dargestellt werden. Nach Definition ist

$$p = \sigma + j\omega \quad \text{mit } s = \text{Realteil und } j = \text{Imaginärteil} \quad (5.49)$$

und wird als komplexe Frequenz bezeichnet. Geht der Realteil der komplexen Frequenz p gegen Null, so geht die LAPLACE-Transformation in die FOURIER-Transformation über. Dies bedeutet, mittels der LAPLACE-Transformation können beliebige (theoretisch) Zeitvorgänge betrachtet werden, mittels der FOURIER-Transformation nur sinusförmige. Die LAPLACE-Transformation eignet sich insbesondere für die Anwendung auf aperiodische Vorgänge, wie sie z.B. bei Sprungsignalen auftreten. Trotzdem bringt die FOURIER-Transformation dadurch einen sehr großen Vorteil, da sie einfacher im Gebrauch ist. Durch die FOURIER-Reihenanalyse kann jede periodische bzw. periodisierbare Funktion in eine Summe von Sinusschwingungen zerlegt werden. Diese Zerlegung der Erregungsfunktionen und Überlagerung der Antwortfunktionen ist natürlich nur bei linearen Systemen erlaubt. Aus der FOURIER-Transformation folgen die bekannten komplexen Rechenmethoden der Elektrotechnik

für sinusförmige Wechselgrößen. Während bei der FOURIER-Transformation die Dichte derartiger Schwingungen, das so genannte Spektrum, untersucht wird, wird bei den Regeln der Wechselstromtheorie nur eine Sinusschwingung, d.h. nur eine Frequenz, betrachtet.

Die **diskreten Transformationen** werden dagegen durch eine Summenformel dargestellt:

$$F(f(t)) = \sum_n k(t_n, f(t_n)) \quad (5.50)$$

Auch hier erhält man für die bestimmten $k(t_n, f(t_n))$ einige bekannte Sonderfälle (siehe Tabelle 5.4).

Tabelle 5.4: Sonderfälle bei diskreten Transformationen

Transformationskern $k(t_n, f(t_n))$	Summationsgrenzen	Bezeichnung
e^{-pn}	$0 \leq n < \infty$	diskrete LAPLACE-Transformation
$\frac{1}{z^n}$	$-\infty < n < \infty$	LAURENT-Transformation
$\frac{1}{z^n}$	$0 \leq n < \infty$	Z-Transformation

Den Zusammenhang zwischen LAPLACE- und Z-Transformation kann man auch in folgender Weise darlegen. Ersetzt man im LAPLACE-Integral für stetige Funktionen

$$F(p) = \int_0^{\infty} f(t)e^{-pt} dt \quad (5.51)$$

$$p = \sigma + j\omega$$

die Funktion $f(t)$ durch die Funktionswertfolge $f(nT)$, das Integral entsprechend durch eine unendliche Summe und e^{-pt} durch e^{-pnT} , so erhält man:

$$F(p) = T \sum_{n=0}^{\infty} f(nT)e^{-npT} \quad (5.52)$$

mit $e^{pt} = z$ folgt:

$$F_T(z) = T \sum_{n=0}^{\infty} f(nT)z^{-n} = T \cdot F(z) \quad (5.53)$$

5.3.2 LAPLACE-Transformation

Hintransformation

Bei der Arbeit mit der LAPLACE-Transformierten werden folgende Symbole verwendet:

$$L\{f(t)\} = F(p) \quad \text{LAPLACE-Transformierte der Funktion } f(t)$$

$$\begin{aligned} L^{-1}\{F(p)\} &= L^{-1}\{L\{f(t)\}\} \quad \text{LAPLACE-Rücktransformierte} \\ &= f(t) \end{aligned}$$

Die Transformation von der Zeit- bzw. Originalebene in die LAPLACE-Ebene erfolgt mittels der oben angeführten Integralbeziehung.

$$F(p) = L\{f(t)\} = \int_0^{\infty} f(t)e^{-pt} dt \quad (5.54)$$

$$p = \sigma + j\omega$$

Beispiele zur Anwendung der Transformation auf Funktionen:

Beispiel 1:

$$f(t) = 0 \quad (5.55)$$

$$F(p) = L\{0\} = \int_0^{\infty} 0 \cdot e^{-pt} dt = 0$$

Beispiel 2:

$$f(t) = 1 \quad (5.56)$$

$$\begin{aligned} F(p) &= L\{1\} = \int_0^{\infty} 1 \cdot e^{-pt} dt \\ &= -\frac{1}{p} \cdot [e^{-pt}]_0^{\infty} = -\frac{1}{p} \cdot (-1) \\ &= \frac{1}{p} \end{aligned}$$

Beispiel 3:

$$f(t) = t \quad (5.57)$$

$$\begin{aligned} F(p) &= L\{t\} = \int_0^{\infty} t \cdot e^{-pt} dt \\ &= - \left[\frac{e^{-pt}}{p^2} (pt + 1) \right]_0^{\infty} \\ &= \frac{1}{p^2} \end{aligned}$$

Für weitere ausgewählte Grundfunktionen gibt es tabellarische Zusammenstellungen der LAPLACE-Transformierten (siehe Tabelle 5.5, Seite 146).

5.3.2.1 Wichtige Rechenregeln

- **Additionssatz**

$$L\{f_1(t) + f_2(t)\} = L\{f_1(t)\} + L\{f_2(t)\}$$

Dieser Additionssatz soll beispielhaft für die anderen Rechenregeln bewiesen werden, indem entsprechend der Transformationsregel die LAPLACE-Transformierte als Integral über das Produkt der Funktion mit einer e -Funktion berechenbar ist:

$$\begin{aligned} L\{f_1(t) + f_2(t)\} &= \int_0^{\infty} e^{-pt}(f_1(t) + f_2(t))dt \\ &= \int_0^{\infty} (e^{-pt}f_1(t) + e^{-pt}f_2(t))dt \\ &= \int_0^{\infty} e^{-pt}f_1(t)dt + \int_0^{\infty} e^{-pt}f_2(t)dt \end{aligned} \quad (5.58)$$

Laut Definition der LAPLACE-Transformierten gilt:

$$L\{f_1(t) + f_2(t)\} = L\{f_1(t)\} + L\{f_2(t)\}$$

Allgemeine Form des Additionssatzes

$$L\{\lambda_1 f_1(t) + \dots + \lambda_n f_n(t)\} = \lambda_1 F_1(p) + \dots + \lambda_n F_n(p) \quad (5.59)$$

- **Ähnlichkeitssatz**

$$L\{f(at)\} = \frac{1}{a} F\left(\frac{p}{a}\right) \quad (5.60)$$

• **Dämpfungssatz**

$$L \{ e^{-at} f(t) \} = F(p + a) \quad (5.61)$$

• **Verschiebesatz**

$$\begin{array}{l}
 L \{ f(t - a) \} = e^{-ap} F(p) \\
 L \{ f(t + a) \} = e^{ap} \left[F(p) - \int_0^a e^{-pt} f(t) dt \right] \\
 \text{mit } F(p) = L \{ f(t) \}
 \end{array}
 \left\{ \begin{array}{l}
 \text{nach rechts,} \\
 \text{positiv in die Zukunft} \\
 \text{nach links,} \\
 \text{negativ in die Vergangenheit} \\
 \text{LAPLACE-Transformation} \\
 \text{ohne Verschiebung}
 \end{array} \right. \quad (5.62)$$

• **Differentiation**

Die Differentiationsregel bilden die Basis zur Anwendung der LAPLACE-Transformation auf Differentialgleichungen und deren Lösung.

$$\begin{aligned}
 L \{ f'(t) \} &= pF(p) - f(0) \\
 L \{ f''(t) \} &= p^2 F(p) - f(0)p - f'(0) \\
 L \{ f^n(t) \} &= p^n F(p) - f(0)p^{n-1} - f'(0)p^{n-2} - \dots \\
 &\quad \dots - f^{(n-2)}(0)p - f^{(n-1)}(0)
 \end{aligned} \quad (5.63)$$

• **Integration**

$$L \left\{ \int_0^t f(\tau) d\tau \right\} = \frac{1}{p} F(p) \quad (5.64)$$

• **Faltungssatz**

Die Faltungsoperation spielt bei der Analyse von Übertragungssystemen eine Rolle (siehe Abschnitt 12.3, Seite 12.3ff)

$$L \left\{ \int_0^t f_1(t - \tau) f_2(\tau) d\tau \right\} = L \{ f_1(t) \} \cdot L \{ f_2(\tau) \} = F_1(p) \cdot F_2(p) \quad (5.65)$$

Rücktransformation

Für die Rücktransformation benutzt man auch die so genannte L^{-1} -Transformierte.

$$L^{-1}\{F(p)\} = L^{-1}\{L\{f(t)\}\} = f(t) \quad \text{LAPLACE-Rücktransformierte} \quad (5.66)$$

Dabei kann man prinzipiell folgende Möglichkeiten anwenden

- **Integralformel**

$$f(t) = \frac{1}{2\pi j} \int_{a-j\infty}^{a+j\infty} L\{f(t)\} e^{pt} dp \quad (5.67)$$

- **Residuenformel (Partialbruchzerlegung)**

$$f(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \text{Res}_{p=p_n} \{L\{f(t)\} e^{pt}\} \quad (5.68)$$

Dabei sind p_n die singulären Stellen in den linken, komplexen Halbebenen, bzw. $(p - p_n)$ ergeben die entsprechenden Polstellen.

- **Reihenentwicklung**

$$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n B_n(\sigma_0 t) \quad \text{mit } B_n(\sigma_0 t) = e^{-\sigma_0 t} L_n(2\sigma_0 t) \quad (5.69)$$

Von diesen Möglichkeiten ist die Residuenformel für die technisch vorkommenden Probleme stets anwendbar und leicht zu handhaben.

5.3.2.2 Korrespondenztabelle

Da diese Integrale relativ kompliziert werden können und verschiedene Funktionen sich sehr oft wiederholen, sind Rechenregeln und **Korrespondenztabelle** aufgestellt worden, aus denen die Transformierte und ihre Rücktransformierte leicht ablesbar sind (siehe Tabelle 5.5)

Tabelle 5.5: Korrespondenztabelle

Nr.	$\mathbf{F(p)} = \mathbf{L}\{\mathbf{f(t)}\}$	$\mathbf{f(t)} = \mathbf{L}^{-1}\{\mathbf{F(p)}\}$
1	0	0
2	$\frac{1}{p}$	1
3	$\frac{1}{p^n}$	$\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}$
4	$\frac{1}{(p-\alpha)^n}$	$\frac{(n-1)! e^{\alpha t}}{t^{n-1}}$
5	$\frac{1}{(p-\alpha)(p-\beta)}$	$\frac{\beta - \alpha}{e^{\beta t} - e^{\alpha t}}$
6	$\frac{p}{(p-\alpha)(p-\beta)}$	$\beta \frac{e^{\beta t} - \alpha e^{\alpha t}}{\beta - \alpha}$
7	$\frac{\alpha}{p^2 + \alpha^2}$	$\sin \alpha t$
8	$\frac{\alpha \cos \beta + p \sin \beta}{p^2 + \alpha^2}$	$\sin(\alpha t + \beta)$
9	$\frac{p}{p^2 + \alpha^2}$	$\cos \alpha t$
10	$\frac{p \cos \beta - \alpha \sin \beta}{p^2 + \alpha^2}$	$\cos(\alpha t + \beta)$
11	$\frac{\alpha}{p^2 - \alpha^2}$	$\sinh \alpha t$
12	$\frac{p}{p^2 - \alpha^2}$	$\cosh \alpha t$
13	$\frac{p^2 + 2\alpha^2}{p(p^2 + 4\alpha^2)}$	$\cos^2 \alpha t$
14	$\frac{2\alpha^2}{p(p^2 + 4\alpha^2)}$	$\sin^2 \alpha t$
15	$\frac{p^2 - 2\alpha^2}{p(p^2 - 4\alpha^2)}$	$\sinh^2 \alpha t$

Tabelle 5.6: Korrespondenztabelle - Fortsetzung

Nr.	$\mathbf{F}(\mathbf{p}) = \mathbf{L}\{\mathbf{f}(\mathbf{t})\}$	$\mathbf{f}(\mathbf{t}) = \mathbf{L}^{-1}\{\mathbf{F}(\mathbf{p})\}$
16	$\frac{2\alpha^2 p}{p^4 + 4\alpha^4}$	$\sin \alpha t \sinh \alpha t$
17	$\frac{\alpha(p^2 + 2\alpha^2)}{p^4 + 4\alpha^4}$	$\sin \alpha t \cosh \alpha t$
18	$\frac{2\alpha p}{(p^2 + \alpha^2)}$	$t \sin \alpha t$
19	$\frac{p^2 - \alpha^2}{(p^2 + \alpha^2)^2}$	$t \cos \alpha t$
20	$\frac{2\alpha p}{(p^2 - \alpha^2)^2}$	$t \sinh \alpha t$
21	$\frac{1}{\sqrt{p}}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi t}}$
22	$\frac{1}{p\sqrt{p}}$	$2\frac{1}{\sqrt{\frac{t}{\pi}}}$
23	$\frac{1}{\sqrt{p^2 + \alpha^2}}$	$J_0(\alpha t)$ (BESSEL-Funktion der Ordnung 0)
24	$\frac{1}{\sqrt{p^2 - \alpha^2}}$	$I_0(\alpha t)$ (modifizierte BESSEL-Funktion der Ordnung 0)
25	$\arctan \frac{\alpha}{p}$	$\frac{\sin(\alpha t)}{t}$
26	$\arctan \frac{2\alpha p}{p^2 - \alpha^2 + \beta^2}$	$\frac{2}{t} \sin(\alpha t) \cdot \cos(\beta t)$

5.3.3 Lösung von Differentialgleichungen mittels LAPLACE-Transformation

5.3.3.1 Lösungsweg

Dieser Lösungsweg besteht aus drei Teilschritten:

- Anwendung der LAPLACE-Transformation auf die DGL (oder das System der DGL) unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen
- Lösung der resultierenden algebraischen Gleichung (oder des Gleichungssystems) mit $F(p)$ als Unbekannte
- Rücktransformation von $F(p)$ und Bestimmung der gesuchten Funktion, d.h. Lösungsfunktion der DGL.

5.3.3.2 Beispiele

1. Gesucht ist die Lösung der DGL $\ddot{y}(t) + y(t) = 1$ mit den Anfangsbedingungen $y(0) = 1$ und $\dot{y}(0) = 0$:

- Anwendung der LAPLACE-Transformation:

$$\text{Ausgangs-DGL : } \ddot{y}(t) + y(t) = 1$$

$$\text{LAPLACE-Transformation : } L\{\ddot{y}(t) + y(t)\} = L\{1\}$$

$$\text{Additionssatz : } L\{\ddot{y}(t)\} + L\{y(t)\} = L\{1\}$$

$$\text{Einf. der LAPLACE-Transformierten : } p^2 F(p) - f(0)p - f'(0) + F(p) = \frac{1}{p}$$

$$\text{Berücks. der Anfangsbedingungen : } p^2 F(p) - p + F(p) = \frac{1}{p}$$

- Lösung der algebraischen Gleichung nach $F(p)$:

$$(p^2 + 1) F(p) = \frac{1}{p} + p$$

$$(p^2 + 1) F(p) = \frac{p^2 + 1}{p}$$

$$F(p) = \frac{1}{p}$$

- Rücktransformation und Bestimmung von $y(t)$ mittels Korrespondentafel (siehe Tabelle 5.5, Seite 146, Zeile 2):

$$y(t) = L^{-1}\{F(p)\} = L^{-1}\left\{\frac{1}{p}\right\} = 1$$

2. Man löse mittels der LAPLACE-Transformation

$$\ddot{y} - 3\dot{y} + 2y = 2e^{-t}$$

Die Anfangsbedingungen sind $y(0) = 2$ und $\dot{y}(0) = -1$.

- Anwendung der LAPLACE-Transformation:

$$\text{Ausgangs-DGL : } \quad \ddot{y} - 3\dot{y} + 2y = 2e^{-t}$$

$$\text{LAPLACE-Transformation : } \quad L\{\ddot{y} - 3\dot{y} + 2y\} = L\{2e^{-t}\}$$

$$\text{Additionssatz : } \quad L\{\ddot{y}(t)\} + L\{-3\dot{y}\} + L\{2y(t)\} = L\{2e^{-t}\}$$

$$\text{Einf. der LAPLACE-Transf. : } \quad p^2 F(p) - f(0)p - f'(0)$$

$$: \quad -3pF(p) + 3f(0) + 2F(p) = \frac{2}{p+1}$$

$$\text{Berücks. der Anfangsbed. : } \quad p^2 F(p) - 2p + 1 - 3pF(p) + 6 + 2F(p) = \frac{2}{p+1}$$

- Lösung der algebraischen Gleichung nach $F(p)$:

$$(p^2 - 3p + 2) F(p) = \frac{2}{p+1} + 2p - 7$$

$$F(p) = \frac{2 + (2p - 7)(p + 1)}{(p^2 - 3p + 2)(p + 1)}$$

- Rücktransformation und Bestimmung von $y(t)$:

Die Rücktransformation erfolgt in diesem Fall durch Partialbruchzerlegung. Dabei werden die Nullstellen des Nennerpolynoms gesucht und dieses als Produkt von Summen dargestellt. Im vorliegenden Fall wird der Nenner gleich Null, wenn:

$$p + 1 = 0 \implies p_1 = -1$$

$$p^2 - 3p + 2 = 0 \implies p_{2,3} = -\left(\frac{-3}{2}\right) \pm \sqrt{\left(\frac{-3}{2}\right)^2 - 2}$$

$$p_2 = +1, \quad p_3 = +2$$

Die Gleichung für $F(p)$ kann damit geschrieben werden:

$$F(p) = \frac{2p^2 - 5p - 5}{(p+1)(p-1)(p-2)}$$

Damit lautet die Partialbruchzerlegung:

$$\frac{2p^2 - 5p - 5}{(p+1)(p-1)(p-2)} = \frac{A}{p+1} + \frac{B}{p-1} + \frac{C}{p-2}$$

Zur Bestimmung der Faktoren A , B und C wird mit $(p+1)(p-1)(p-2)$ erweitert, so dass rechts und links der gleiche Hauptnenner entsteht:

$$\frac{2p^2 - 5p - 5}{(p+1)(p-1)(p-2)} = \frac{A(p-1)(p-2) + B(p+1)(p-2) + C(p+1)(p-1)}{(p+1)(p-1)(p-2)}$$

Diese Gleichung ist nur dann erfüllt, wenn neben den Nennern auch die Zähler gleich sind, d.h. es muss gelten:

$$2p^2 - 5p - 5 = A(p-1)(p-2) + B(p+1)(p-2) + C(p+1)(p-1)$$

$$2p^2 - 5p - 5 = (A+B+C)p^2 + (-3A-B)p + (2A-2B-C)$$

Dies muss eine Identität und somit gültig für alle Werte von p sein. Das ist erfüllt, wenn die Koeffizienten der Glieder der Potenzreihe von p jeweils identisch sind. Daraus folgt:

$$p^2 \quad 2 = A + B + C$$

$$p^1 \quad -5 = -3A - B$$

$$p^0 \quad -5 = 2A - 2B - C$$

Dieses LGS kann durch die bekannten Methoden gelöst werden, so dass die Lösung

$$A = \frac{1}{3}, \quad B = 4, \quad C = -\frac{7}{3}$$

lautet.

Dann kann $F(p)$ auf folgende Weise geschrieben werden:

$$F(p) = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{p+1} + 4 \cdot \frac{1}{p-1} - \frac{7}{3} \cdot \frac{1}{p-2}$$

Aus der Korrespondenztabelle (siehe Tabelle 5.5, Seite 146, Zeile 4) ist die Rücktransformation abzulesen. Damit ist

$$L^{-1} \left\{ \frac{1}{(p-a)^n} \right\} = \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} e^{at} \quad \text{für } n = 1 \text{ gilt}$$

$$L^{-1} \left\{ \frac{1}{(p-a)^1} \right\} = e^{at}$$

für $a_1 = -1$, $a_2 = 1$, $a_3 = 2$ gilt

$$L^{-1} \{F(p)\} = y(t) = \frac{1}{3} \cdot e^{a_1 t} + 4 \cdot e^{a_2 t} - \frac{7}{3} \cdot e^{a_3 t}$$

$$y(t) = \frac{1}{3} e^{-t} + 4e^t - \frac{7}{3} e^{2t}$$

Bemerkung:

Dasselbe Verfahren kann auch zur Lösung von Systemen linearer DGL mit konstanten Koeffizienten eingesetzt werden.

5.3.3.3 Beispiel von Systemen von DGL

Gesucht ist die Lösung des Systems:

$$\ddot{x} = -\dot{y}$$

$$\ddot{y} = \dot{x}$$

mit den Anfangsbedingungen $x(0) = 0$, $\dot{x}(0) = 1$, $y(0) = 0$, $\dot{y}(0) = 0$.

- Anwendung der LAPLACE-Transformation

Sei $F(p) = L\{x(t)\}$ und $G(p) = L\{y(t)\}$ dann liefert die Anwendung der LAPLACE-Transformation auf das System (unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen)

$$p^2 F(p) - 1 = -pG(p)$$

$$p^2 G(p) = pF(p)$$

- Lösung des linearen Gleichungssystems nach $F(p)$, $G(p)$

Nach den bekannten Regeln oder durch einfache Umwandlung, z.B. aus der 2. Gleichung

chung, folgt:

$$G(p) = \frac{1}{p} F(p)$$

$$\text{Einsetzen in obere Gleichung : } p^2 F(p) - 1 = -F(p)$$

$$\text{Auflösen nach } F(p) : F(p) = \frac{1}{p^2 + 1}$$

$$G(p) = \frac{1}{p} F(p) = \frac{1}{p(p^2 + 1)}$$

- Rücktransformation und Bestimmung von $x(t)$, $y(t)$ mittels der Korrespondenztabelle (siehe Tabelle 5.5, Seite 146, Zeile 3 und 7)

$$x(t) = L^{-1}\{F(p)\} = L^{-1}\left\{\frac{1}{p^2 + 1}\right\} = \sin t$$

$$y(t) = L^{-1}\{G(p)\} = L^{-1}\left\{\frac{1}{p(p^2 + 1)}\right\} = L^{-1}\left\{\frac{1}{p} - \frac{p}{(p^2 + 1)}\right\} = 1 - \cos t$$

5.3.3.4 Aufgaben zur Anwendung der LAPLACE-Transformation

1. Lösen Sie folgende DGL mittels der LAPLACE-Transformation:

a) $y'(x) + y = 0$

b) $y''(t) - 3y'(t) + 2y(t) = 4$ mit $y(0) = 1$
 $y'(0) = 0$

c) $y''(t) + 16y(t) = 32t$ mit $y(0) = 3$
 $y'(0) = -2$

d) $y''(t) + 4y'(t) + 4y(t) = 6e^{-2t}$ mit $y(0) = 3$
 $y'(0) = 8$

e) $y'''(t) + y'(t) = t + 1$ mit $y(0) =$
 $y'(0) =$
 $y''(0) =$

2. Lösen Sie folgende Gleichungssysteme mittels der LAPLACE-Transformation:

a) $y'(t) + x(t) = 0$ mit $x(0) = 0$
 $x'(t) + y(t) = 1$ mit $y(0) = 0$

b) $2x(t) - y(t) - y'(t) = 4(1 - e^{-t})$ mit $x(0) = 0$
 $2x'(t) + y(t) = 2(1 + 3e^{-2t})$ mit $y(0) = 0$

3. Für folgendes hydraulisches Schema (siehe Abbildung 5.10) und zugehöriges Blockmodell gilt die Differentialgleichung

$$h_{Fl} = R \cdot C \frac{dz_R}{dt} + z_R$$

Dabei ist von linearisierten Verhältnissen und einem homogenen, isotropen Grundwasserleiter mit folgenden Parametern auszugehen:

$$k = 5 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s}; n_0 = 0, 2; z_{Rmittel} = 20m; l = 50m$$

Es soll hier also nur die Änderung gegenüber dem stationären Zustand berechnet werden.

Berechnen Sie mit Hilfe der LAPLACE-Transformation die Änderung des Wasserstandes, wenn sich der Flusswasserspiegel in erster Näherung wie folgt ändert :

a) sprunghaft ($h_{fl} = h_{fl0} \cdot \mathbf{1}(t)$)

b) sinusförmig ($h_{fl} = h_{fla} \sin(\omega \cdot t)$, mit $\omega = 2\pi/\tau$ und $\tau = 7$ Tage).

4. Für die Konzentration C durch Sorption von Schadstoffen an der Bodenmatrix soll folgende DGL gelten:

$$T_1 \dot{C} + C = K$$

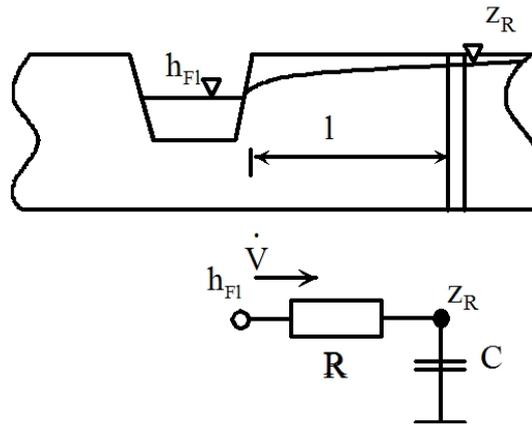


Abbildung 5.10: Schematische Darstellung des Grundwasserspiegels

wobei T_1 eine Zeitkonstante und K eine Konstante sein sollen. $T_1 = 1d^{-1}$, $K = 100$. Die Konzentrationsänderung zum Zeitpunkt $t = 0$ soll $C(0) = 0$ sein.

- Lösen Sie die DGL mittels der Methode der LAPLACE-Transformation und berechnen Sie die Konzentrationsänderung für den Zeitpunkt $t = 1d$.
 - Skizzieren Sie den prinzipiellen Zeitverlauf der Konzentrationsänderung.
5. Der Grundwasserwiederanstieg und damit die Auffüllung der Restlöcher in den ehemaligen Braunkohlentagebauen dauert unter natürlichen Bedingungen zu lange. Deshalb wird der Auffüllvorgang ($h_{t=0} = 0$) mit einer konstanten Fremdeinspeisung beschleunigt (siehe Abbildung 5.11). Die dazugehörige Differentialgleichung lautet:

$$A \frac{dh}{dt} = \dot{V}_{Zustr}$$

Überführen Sie diese Differentialgleichung mittels LAPLACE-Transformation in die Bildebene und lösen Sie diese Gleichung nach der gesuchten Größe auf.

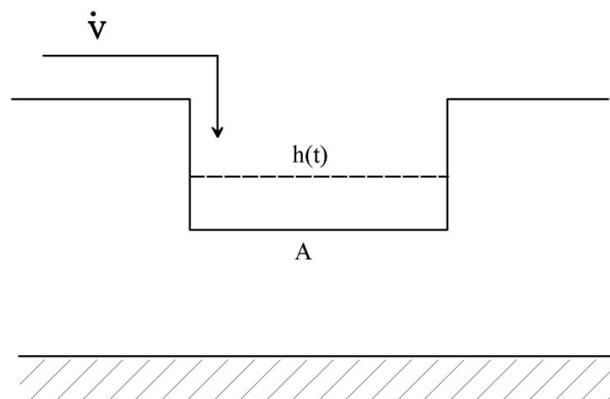


Abbildung 5.11: Füllvorgang eines Restloches

6. Es ist folgende Differentialgleichung gegeben:

$$\frac{dh}{dt} + k \cdot h = g \quad \text{mit} \quad h_{t=0} = 0$$

$$g = 0,015m \cdot s^{-1} \quad \text{und} \quad k = 0,01s^{-1}$$

Lösen Sie die Differentialgleichung mittels der LAPLACE-Transformation.

5.4 Numerische Methoden

5.4.1 Integration

Die numerische Integration liefert immer das Ergebnis eines bestimmten Integrals zwischen einer oberen und einer unteren Grenze. Wird an Stelle der oberen Grenze des Integrals eine Variable eingesetzt, so geht das bestimmte Integral in eine Funktion über, die von der unteren Grenze und der variablen oberen Grenze bestimmt wird. Das Integral einer Funktion, welches auch als Fläche zwischen der Funktion, der oberen und der unteren Grenze und der Abszisse gekennzeichnet werden kann, wird durch eine vereinfachte Flächenberechnung angenähert. Die verschiedenen numerischen Integrationsverfahren unterscheiden sich in der Methode der Flächenberechnung. Die meisten Verfahren gehen davon aus, dass die Gesamtfläche zwischen der oberen und der unteren Grenze in einzelne Teilflächen unterteilt wird und die Aufsummierung dieser Teilflächen dann das Integral liefert. Die Genauigkeit hängt stark von der Methode der Teilflächenbildung und der Quantisierungsbreite der Abszisse ab. Dabei ist die Näherung durch Summation der Teilflächen bei der Rechteckmethode am schlechtesten und bei gleicher Quantisierungsschrittweite beim Predictor-Corrector-Verfahren bzw. bei dem RUNGE-KUTTA-Verfahren höherer Ordnung am besten. Der Vorteil der trivialen Verfahren besteht in der einfachen, schnellen und stabilen Berechnung der Teilflächen auch bei komplizierten, z. B. unstetigen, Funktionen.

5.4.1.1 Rechteckregel

Die Rechteckregel als einfachste Methode geht von der Bildung von Rechtecken als Teilflächen aus (siehe Abbildung 5.12). Die Fläche der Rechtecke ergibt sich aus der Multiplikation des Funktionswertes (y_n) der linken Stützstelle (x_n) mit der Quantisierungsschrittweite $\Delta x = |x_n - x_{n+1}|$. Diese Rechtecke liefern bei konvexen Funktionen zu kleine, bei konkaven Funktionen zu große Werte. Ein wesentlicher Vorteil der Rechteckmethode besteht darin, dass für die Abszisse keine äquidistante Quantisierung notwendig ist:

$$F_{links} = \int_a^b y(x) dx \approx \sum_{n=0}^m (|x_n - x_{n-1}|) y_n \quad (\text{für } m \text{ Teilintervalle}) \quad (5.70)$$

Man kann statt des linken Funktionswertes auch den rechten verwenden. In diesem Fall

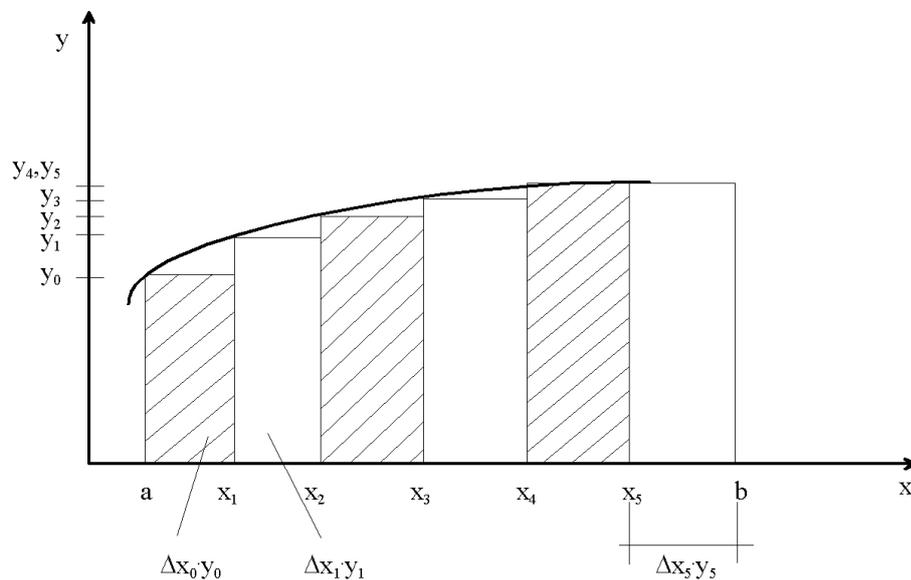


Abbildung 5.12: Bildung von Rechtecken zur numerischen Integration

liefern die Rechtecke bei konvexen Funktionen zu große, bei konkaven Funktionen zu kleine Werte. Die Berechnung der Fläche liefert:

$$F_{rechts} = \int_a^b y(x) dx \approx \sum_{n=0}^m (|x_{n+1} - x_n|) y_{n+1} \quad (5.71)$$

Der korrekte Wert des Integrals muß zwischen F_{links} und F_{rechts} liegen.

Beispiele zur Anwendung der Rechteckregel:

1. Man berechne das Integral $\int_1^2 \frac{1}{x} dx$ auf Grund der Werte der nachfolgenden Tabelle. Man verwende die Rechteckregel (links und rechts) und vergleiche die Ergebnisse mit dem analytischen Wert

$$\int_1^2 \frac{1}{x} dx = \ln 2 = 0,693$$

x	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
$\frac{1}{x}$	1,000	0,833	0,714	0,625	0,556	0,500

Die Schrittweite soll als konstant angenommen werden, $h = \Delta x = 0,2$.

Dann ist:

$$F_{links} = 0,2 (1,000 + 0,833 + 0,714 + 0,625 + 0,556) = 0,746$$

$$F_{rechts} = 0,2 (0,833 + 0,714 + 0,625 + 0,556 + 0,500) = 0,646$$

$f(x) = \frac{1}{x}$ ist eine konkave Funktion, so ist $F_{links} > F_{anal} > F_{rechts}$. Der Mittelwert der beiden Ergebnisse ist:

$$F_{mittel} = \frac{0,746 + 0,646}{2} = 0,696$$

$$F_{anal} = 0,693$$

Dieser Wert nähert sich tatsächlich dem analytischen Wert an.

Bemerkung:

Die Schrittweite spielt eine wichtige Rolle zur genauen Bestimmung des Integrals. Je kleiner sie ist, desto mehr nähert sich der numerische Wert dem analytischen an, d.h. der numerische Wert konvergiert. Dies gilt nicht nur für die Rechteckregel, sondern für alle numerische Verfahren.

2. Man berechne das Integral $\int_1^2 \frac{1}{x} dx$ mit der Schrittweite $h = 0,1$ an Hand der Tabelle und vergleiche die Ergebnisse mit den Ergebnissen des Beispiels 1.

x	$\frac{1}{x}$	F_{links}	F_{rechts}
1,0	1,000	1,000	
1,1	0,909	0,909	0,909
1,2	0,833	0,833	0,833
1,3	0,769	0,769	0,769
1,4	0,714	0,714	0,714
1,5	0,667	0,667	0,667
1,6	0,625	0,625	0,625
1,7	0,588	0,588	0,588
1,8	0,556	0,556	0,556
1,9	0,526	0,526	0,526
2,0	0,500		0,500
	Teilsumme	7,187	6,669

$$\mathbf{F}_{links} = 0,1 \cdot (7,187) = 0,719$$

$$\mathbf{F}_{rechts} = 0,1 \cdot (6,669) = 0,667$$

$$F_{mittel} = 0,694$$

Es ist deutlich zu merken, dass alle drei Werte, mit der Schrittweite 0,1 berechnet, dem analytischen Wert $F_{anal} = 0,693$ näher liegen, als die im Beispiel 1 mit einer Schrittweite von 0,2.

5.4.1.2 Trapezregel

Die Approximation durch Polynome spielt bei einer Vielzahl von Verfahren eine Rolle. Die Grundidee ist, dass, wenn $p(x)$ eine Näherung für $y(x)$ ist, auch $\int_a^b p(x) dx \cong \int_a^b y(x) dx$ ist.

Abhängig von der gewählten Approximation kommen verschiedene Verfahren zustande.

Bei der Trapezregel wird die Funktion zwischen den Stützstellen x_n und x_{n+1} linear interpoliert (siehe Abbildung 5.13). Dadurch wird die gesuchte Fläche in Trapezflächen unterteilt, deren Inhalt aus der Geometrie

$$I = h \frac{a+b}{2} \quad \text{oder} \quad I = |x_n - x_{n+1}| \frac{y_n + y_{n+1}}{2} \quad (5.72)$$

ist. Durch Aufsummierung der Teilflächen folgt:

$$F = \int_a^b y(x) dx \approx \sum_{n=0}^m (|x_n - x_{n+1}|) \left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2} \right) \quad (\text{für } m \text{ Teilintervalle}) \quad (5.73)$$

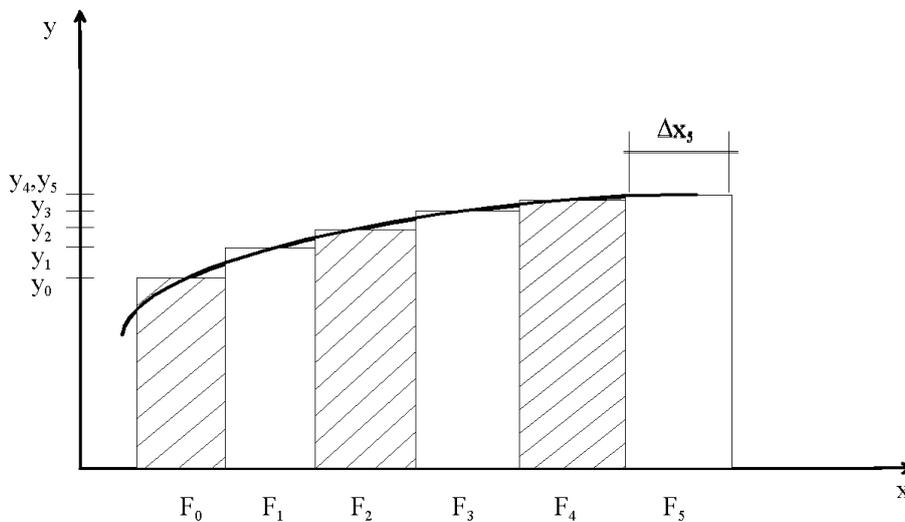


Abbildung 5.13: Numerische Integration mittels Trapezregel

Bei äquidistanter Teilung Δx vereinfacht sich die Berechnung zu:

$$F = \int_a^b y(x) dx \approx \sum_{n=0}^m F_n = \Delta x \cdot \sum_{n=0}^{m-1} (y_{n+1}) + \frac{\Delta x}{2} (y_0 + y_m) \quad (5.74)$$

Auch bei der Trapezregel hat man noch eine einfache Möglichkeit unregelmäßige Schrittweiten, d.h. nicht äquidistante Quantisierung, zu berücksichtigen.

5.4.1.3 SIMPSONSche Regel

Die SIMPSONSche Regel lautet:

$$F = \int_{x_0}^{x_{2k}} f(x) dx = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + \dots + 2y_{2k-2} + 4y_{2k-1} + y_{2k}) \quad (5.75)$$

Sie ist ebenfalls eine zusammengesetzte Formel, da Parabelbögen als Ersatz für $y(x)$ verwendet werden.

Zu beachten ist:

- Die Stützstellen müssen äquidistant (konstante Schrittweite h) sein.
- Die Anzahl der Stützstellen x_n muss ungerade sein ($n = 0 \dots 2k$).

5.4.1.4 NEWTONSche Formel

Bei dieser Methode wird die NEWTONSche Interpolationsfunktion (siehe auch Abschnitt 3.1.3, Seite 76) mit folgenden Ergebnissen integriert:

Gleichung	Stützstellenanz.	Interpolationsart
$\int_{x_0}^{x_1} p(x) dx = \frac{h}{2} (y_0 + y_1)$	2	linear
$\int_{x_0}^{x_2} p(x) dx = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2)$	3	quadratisch
$\int_{x_0}^{x_3} p(x) dx = \frac{3h}{8} (y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$	4	kubisch

5.4.1.5 Beispiel zur Anwendung der numerischen Integration

Man wende die Trapezregel und die SIMPSONSche Regel an, um das Integral $\int_0^{\pi/2} \sin x \cdot dx$ aus der folgenden Tabelle zu ermitteln. Man vergleiche die Ergebnisse mit dem analytischen Wert $I_{anal} = 1$.

x	0	$\frac{\pi}{12}$	$\frac{2\pi}{12}$	$\frac{3\pi}{12}$	$\frac{4\pi}{12}$	$\frac{5\pi}{12}$	$\frac{\pi}{2}$
sin x	0	0,259	0,500	0,707	0,866	0,966	1,000

Trapezregel

$$I_{tr} = \frac{\pi}{12} (0 + 0,259 + 0,5 + 0,707 + 0,866 + 0,966 + 0,5) = 0,994$$

SIMPSONSche Regel

$$I_s = \frac{\pi}{3 \cdot 12} (0 + 4 \cdot 0,259 + 2 \cdot 0,5 + 4 \cdot 0,707 + 2 \cdot 0,866 + 4 \cdot 0,966 + 1) = 1,000$$

Es ist ersichtlich, dass die Anpassung durch quadratische Polynome ein bis auf drei Kommastellen genaues Ergebnis liefert.

Newton'sche Interpolationsfunktion

a) linear

$$I_{NI} = \frac{\pi}{2 \cdot 12} \left(\begin{array}{l} (0 + 0,259) + \\ (0,259 + 0,500) + \\ (0,500 + 0,707) + \\ (0,707 + 0,866) + \\ (0,866 + 0,966) + \\ (0,966 + 1,000) \end{array} \right)$$

$$= 0,994$$

b) quadratisch

$$I_{Nq} = \frac{\pi}{3 \cdot 12} \begin{pmatrix} (0 + 4 * 0,259 + 0,500) + \\ (0,500 + 4 * 0,707 + 0,866) + \\ (0,866 + 4 * 0,966 + 1,000) \end{pmatrix}$$

$$= 1,00003$$

c) kubisch

$$I_{Nk} = \frac{3 \cdot \pi}{8} \begin{pmatrix} (0 + 3 * 0,259 + 3 * 0,500 + 0,707) + \\ (0,707 + 3 * 0,866 + 3 * 0,966 + 1,000) \end{pmatrix}$$

$$= 1,00006$$

Es ist ersichtlich, dass die Anpassung durch quadratische Polynome ein bis auf drei Kommastellen genaues Ergebnis liefert.

Bemerkung:

Die Genauigkeit der numerischen Verfahren muss immer auf die Anzahl der signifikant berechneten und dargestellten Stellen bezogen werden. Wenn man z.B. dasselbe Problem mit sieben signifikanten Stellen rechnet, dann liefert die SIMPSONSche Regel $I = 1,000003$, was nicht dem analytischen Wert von $I_{anal} = 1$ entspricht.

5.4.1.6 Aufgaben zur Anwendung der numerischen Integration

1. Berechnen Sie unter Verwendung der Trapezregel das Integral $I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x}$ mit der Schrittweite $h = 0,1$
2. Berechnen Sie folgende Integrale.
Verwenden Sie dabei mindestens zwei numerische Verfahren und zwei unterschiedliche Schrittweiten und vergleichen Sie die Ergebnisse:
 - a) $\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$ und
 - b) $\int_1^2 \frac{e^x}{x} dx$
3. Berechnen Sie das Integral $\int_1^{1,3} \sqrt{x} dx$ mittels der drei NEWTONSchen Formeln und vergleichen Sie die Ergebnisse.
4. Berechnen Sie das Integral $I = \int_1^{10} \frac{1}{x} dx$ näherungsweise.
Wählen Sie dazu $h = 1$.
Verwenden Sie für das Intervall $[1, 9]$ die SIMPSONSche Regel und für das Intervall $[9, 10]$ die Trapezregel.

5. Eine Messreihe der Spezifischen Wärme c des Al_2O_3 in Abhängigkeit von der Temperatur T liefert die in der Tabelle aufgeführten Werte.

Ermitteln Sie die Wärmemenge $Q = \int_{-200}^{1000} c(T) \cdot dT$, die man einem Gramm Al_2O_3 zuführen muss, um es von $-200^\circ C$ auf $1000^\circ C$ zu erwärmen.

Die Integration ist numerisch nach

- der Trapezregel
- der SIMPSONSchen Regel mit der Schrittweite $h = 200^\circ C$ durchzuführen.

$T [^\circ C]$	$c [c/(g \cdot K)]$
-260	0
-200	0,04
-100	0,012
0	0,18
100	0,22
200	0,24
300	0,25
400	0,26
600	0,27
800	0,275
1000	0,28

6. Bei einem Pumpversuch wurden folgende Grundwasserstände gemessen (siehe Abbildung 5.14)

Berechnen Sie das Wasserdefizit (Volumen) des Absenkungstrichters, wenn der Grundwasserleiter folgende Kennwerte besitzt.

$$h_n = 16m, M = 10m, k = 0,001m \cdot s^{-1}, S_0 = 0,0001, n_0 = 0,20$$

Benutzen Sie dazu die Methode der numerischen Integration

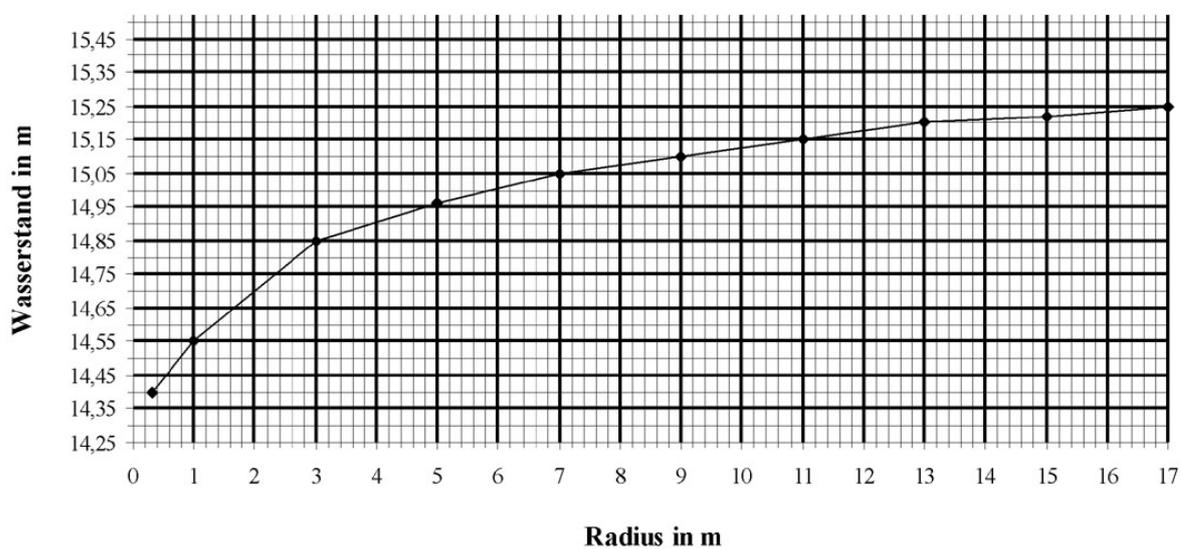


Abbildung 5.14: Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius

5.4.2 Lösung von Differentialgleichungen

Während in den vorangegangenen Abschnitten die Lösung von bestimmten Integralen im Vordergrund stand, soll bei dem EULER-Verfahren, dem RUNGE-KUTTA-Verfahren und dem Predictor-Corrector-Verfahren gezeigt werden, wie Lösungen von gewöhnlichen Differentialgleichungen gewonnen werden. Dabei wird im Unterschied zu analytischen Methoden bei den numerischen stets von den Grenzbedingungen, d.h. den Anfangs- und Randbedingungen, ausgegangen. Speziell bei den DGL 1. Ordnung wird von den Anfangswerten ausgegangen; dies führt zu dem Begriff der **Anfangswertaufgaben**.

Für die DGL 1. Ordnung

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (5.76)$$

mit der Anfangsbedingung für den Anfangspunkt $x = a$ und dem Funktionswert an dieser Stelle $y_{(x=a)} = y_a$ liefert die formale Integration der DGL in den Grenzen $x = a$ bis $x = b$:

$$\int_a^b \frac{dy}{dx} dx = \int_a^b f(x, y) dx \quad (5.77)$$

$$[y]_a^b = \int_a^b f(x, y) dx$$

$$y_b = y_a + \int_a^b f(x, y) dx$$

Damit erhält man den gesuchten Funktionswert y_b an der Stelle $x = b$ aus dem Funktionswert am Anfangspunkt plus dem bestimmten Integral über die Funktion y (siehe Abbildung 5.15). Das Problem besteht jetzt darin, dass die Funktion y nicht bekannt ist. Aus diesem Grund müssen für dieses Integral wieder Näherungslösungen, wie sie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben wurden, angewendet werden. Die nachfolgenden Methoden unterscheiden sich in der Anwendung dieser Näherungsverfahren.

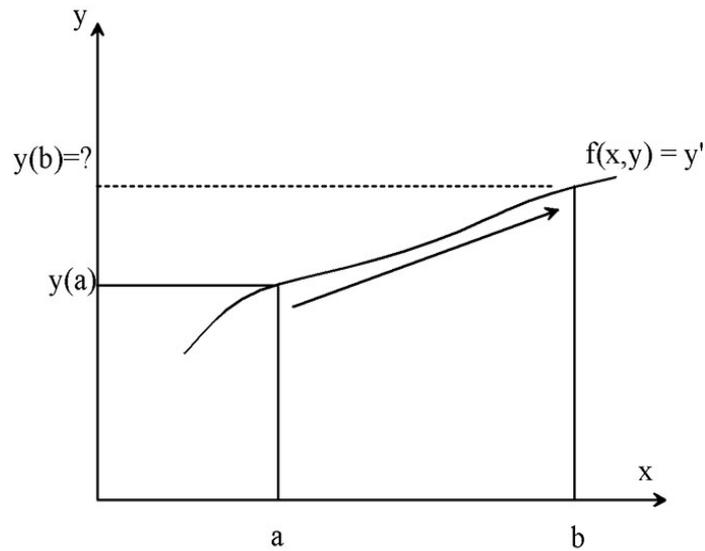


Abbildung 5.15: Berechnung des Funktionswertes $y(b)$ aus dem Anfangswert $y(a)$

Diese Verfahren können verbessert werden, wenn diese Näherung nur abschnittsweise benutzt und dann iterativ auf das ganze Integrationsintervall ausgedehnt werden (siehe Abbildung 5.16).

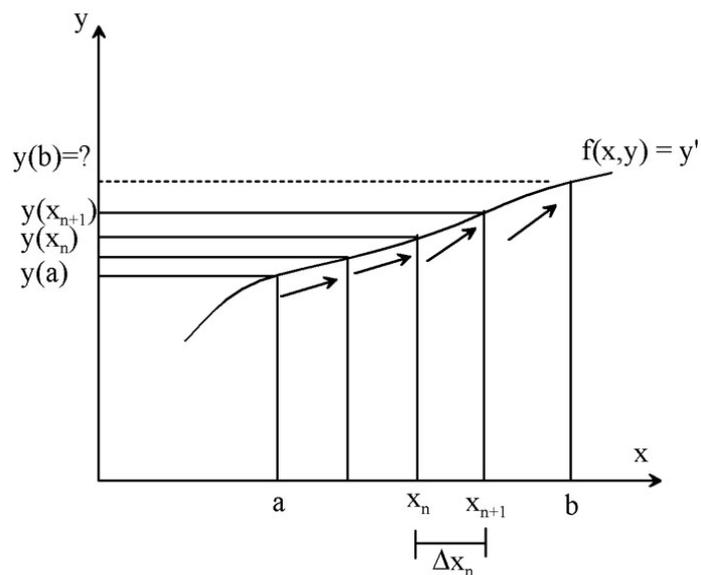


Abbildung 5.16: Schrittweise Lösung der Differentialgleichung

$$y_1 \approx y_a + \int_a^{x_n} f(x, y) dx \quad (5.78)$$

$$y_{n+1} \approx y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx \quad (5.79)$$

$$y_b \approx y_m + \int_{x_m}^b f(x, y) dx \quad (5.80)$$

Man erkennt daraus, dass die Schreibweisen der Integrationsgrenzen:

untere Grenze: $x = a$ oder $x = x_n$

obere Grenze: $x = b$ oder $x = x_{n+1}$

gleichbedeutend sein können. Die indizierte Schreibweise wird meist für die Zwischenintervalle benutzt und bringt den Vorteil, dass sie in einer Programmiersprache leicht umgesetzt werden kann.

5.4.2.1 EULER-Verfahren

Das EULER-Verfahren ist die einfachste Methode und nutzt die Tatsache aus, dass das Integral näherungsweise mittels der Rechteckformel bestimmt werden kann. Diese Näherung ist um so schlechter, je größer der Abstand zwischen a und b , d.h. die Schrittweite h bzw. Δx , ist.

$$h = b - a$$

$$\Delta x_n = x_{n+1} - x_n$$

Damit erhält die Lösung folgende Gestalt:

$$y_b = y_a + \int_a^b f(x, y) dx \approx y_a + f(a, y_a) \cdot (b - a) \quad (5.81)$$

$$\approx y_a + f(a, y_a) \cdot h \quad (5.82)$$

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx \approx y_n + f(x_n, y_n) \cdot (x_{n+1} - x_n) \quad (5.83)$$

$$\approx y_n + f(x_n, y_n) \cdot \Delta x_n \quad (5.84)$$

Bei diesem Verfahren ist es möglich, mit unterschiedlichen Schrittweiten, d.h. mit einer nicht äquidistanten Teilung, zu arbeiten. Auch eignet es sich gut für eine automatische Schrittweitensteuerung, denn der Fehler, der durch die Näherung entsteht, ist abhängig vom Anstieg

der Funktion y und von der Schrittweite $(b - a) = \Delta x$. Setzt man in obige Gleichung die Ausgangsdifferentialgleichung ein, so erhält man:

$$y_b = y_a + \int_a^b f(x, y) dx \approx y_a + \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=a} \cdot (b - a) \quad (5.85)$$

Beispiel zur Anwendung des EULER-Verfahrens (siehe auch Abbildung 5.17):

Gesucht ist eine Näherungslösung für die DGL $y' = xy^{1/3}$ mit $y(1) = 1$.

Die Formel von EULER kann auch in der Form

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot y'_n$$

$$y_{n+1} = y_n + (x_{n+1} - x_n) \cdot x_{n+1} \cdot y_n^{1/3}$$

geschrieben werden.

Der Abbruchfehler $O(h^2)$, der im Intervall von x_n bis x_{n+1} gemacht wird, ist beim EULER-Verfahren ziemlich groß (d. h. proportional zu h^2), so dass für eine hohe Genauigkeit sehr kleine Schrittweiten h notwendig sind. Z.B. für $h = 0,01$ folgt:

$$y_1 \approx 1 + (0,01) 1 = 1,0100$$

$$y_2 \approx 1,0100 + (0,01) (1,01) (1,0033) \approx 1,0201$$

$$y_3 \approx 1,0201 + (0,01) (1,02) (1,0067) \approx 1,0304$$

Der Abbruchfehler bei jedem Intervall liegt in der ungefähren Größe von 0,00007. Die vierte Dezimalstelle ist also schon mit Vorsicht zu betrachten. Wenn man eine höhere Genauigkeit wünscht, dann ist eine kleinere Schrittweite h notwendig.

Die analytischen Werte sind

$$y_1 = 1,01007$$

$$y_2 = 1,02027$$

$$y_3 = 1,03060$$

d.h die vierte Dezimalstelle ist tatsächlich ungenau gewesen.

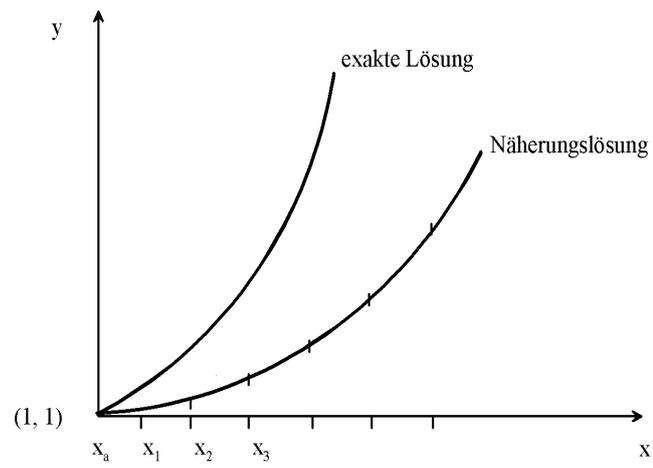


Abbildung 5.17: Entwicklung des Ergebnisses beim EULER-Verfahren

5.4.2.2 RUNGE-KUTTA-Verfahren

Das RUNGE-KUTTA-Verfahren geht von dem gleichen Ansatz, der Näherung des Integrales durch eine näherungsweise Flächenberechnung, wie das EULER-Verfahren aus. Der Unterschied besteht im Grad der Approximationsfunktion zur Flächenberechnung, der beim EULER-Verfahren ein linearer Ansatz ist. Hier beim RUNGE-KUTTA-Verfahren wird entsprechend eines TAYLOR-Reihen-Ansatzes ein Polynom höherer Ordnung benutzt.

$$y_b = y_a + y'_a \cdot h + y''_a \cdot \frac{h^2}{2!} + y'''_a \cdot \frac{h^3}{3!} + y''''_a \cdot \frac{h^4}{4!} + \dots \quad (5.86)$$

mit $h = |b - a|$

Je nach Grad der berücksichtigten Ableitung in der TAYLOR-Reihe unterscheidet man die RUNGE-KUTTA-Verfahren in verschiedener n-ter Ordnungen.

Im Folgenden soll die indizierte Schreibweise benutzt werden, da meistens das gesamte Integrationsintervall (a bis b) in Teilintervalle zerlegt wird und außerdem diese Verfahren in der Praxis programmtechnisch umgesetzt werden.

$$y_{n+1} = y_n + k_n \quad (5.87)$$

Dabei unterscheiden sich die unterschiedlichen RUNGE-KUTTA-Verfahren in den Methoden der Bestimmung des k_n . In diese Klassifizierung lässt sich auch das EULER-Verfahren einordnen, wenn

$$k_n = \Delta x_n \cdot f(x_n, y_n)$$

$$\Delta x_n = |x_{n+1} - x_n|$$

gesetzt wird.

Das einfachste Verfahren, welches sich vom EULER-Verfahren hinsichtlich der Genauigkeit unterscheidet, ist das RUNGE-KUTTA-Verfahren 2. Ordnung. In diesem Fall ist:

$$y_{n+1} = y_n + k_2 \quad (5.88)$$

mit $k_1 = \Delta x_n \cdot f(x_n, y_n) \quad (5.89)$

$$k_2 = \Delta x_n \cdot f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \quad (5.90)$$

$$\Delta x_n = |x_{n+1} - x_n|$$

Der Fehler dieses Verfahren wächst proportional mit der 3. Potenz von h ($0(h^3)$) und ist damit um eine Potenz besser als das EULER-Verfahren ($0(h^2)$).

Das RUNGE-KUTTA-Verfahren 4. Ordnung stellt ein häufig benutztes Verfahren dar, welches einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und numerischem Aufwand darstellt. Für die allgemeine Form

$$y_b = y_a + k \quad (5.91)$$

schreibt man beim RUNGE-KUTTA-Verfahren 4. Ordnung:

$$k = \frac{1}{6} \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (5.92)$$

$$k_1 = h \cdot f(a, y_a)$$

$$k_2 = h \cdot f\left(a + \frac{h}{2}, y_a + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = h \cdot f\left(a + \frac{h}{2}, y_a + \frac{k_2}{2}\right)$$

$$k_4 = h \cdot f(a + h, y_a + k_3)$$

mit $h = |b - a|$

Der Fehler dieses Verfahren ist von 5. Ordnung ($O(h^5)$). Auch hier kann man zur Verbesserung der Genauigkeit das Gesamtintervall a bis b in Teilintervalle x_n mit y_n zerlegen und so iterativ die Lösung y_b herbeiführen. Da man innerhalb der Teilintervalle die Schrittweite nicht ändern kann, erhält man so die Möglichkeit der Schrittweitensteuerung in Abhängigkeit vom Gradienten:

$$y_2 = y_a + \frac{1}{6} (k_{1,1} + 2k_{2,1} + 2k_{3,1} + k_{4,1}) \quad (5.93)$$

⋮

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_{1,n} + 2k_{2,n} + 2k_{3,n} + k_{4,n})$$

⋮

$$y_b = y_{b-\Delta x_n} + \frac{1}{6} (k_{1,b-\Delta x_n} + 2k_{2,b-\Delta x_n} + 2k_{3,b-\Delta x_n} + k_{4,b-\Delta x_n})$$

Wenn $n = 1$ ist, ergibt sich x_1 zu a und

$$\Delta x_n = |x_{n+1} - x_n|$$

$$k_{1,n} = \Delta x_n \cdot f(x_n, y_n) \tag{5.94}$$

$$k_{2,n} = \Delta x_n \cdot f\left(x_n + \frac{\Delta x_n}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_{3,n} = \Delta x_n \cdot f\left(x_n + \frac{\Delta x_n}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right)$$

$$k_{4,n} = \Delta x_n \cdot f(x_n + \Delta x_n, y_n + k_3)$$

Beispiel zur Anwendung des RUNGE-KUTTA-Verfahren:

Gesucht ist eine Näherungslösung für die DGL $y' = xy^{1/3}$ mit $y(1) = 1$.

Mit $x_0 = 1$ und $h = 0,1$ erhält man aus den obigen Formeln des RUNGE-KUTTA-Verfahren 4. Ordnung (siehe Gleichung 5.94):

$$k_1 = 0,1 \cdot f(1,1) = 0,1$$

$$k_2 = 0,1 \cdot f(1,05; 1,05) = 0,10672$$

$$k_3 = 0,1 \cdot f(1,05; 1,05336) = 0,10684$$

$$k_4 = 0,1 \cdot f(1,1; 1,10684) = 0,11378$$

Daraus errechnet man:

$$y_1 = 1 + \frac{1}{6} (0,1 + 0,21344 + 0,21368 + 0,11378) = 1,10682$$

Der analytische Wert ist $y = 1,10326$. Der entsprechende Wert mit dem Verfahren von EULER ist $y = 1,10000$, d.h. das RUNGE-KUTTA-Verfahren liefert bessere Werte. Wenn aber eine höhere Genauigkeit gewünscht wird, dann muss ebenfalls die Schrittweite kleiner gewählt werden.

5.4.2.3 Predictor-Corrector-Verfahren

Das Predictor-Corrector-Verfahren ist ein Zweischrittverfahren. In einem ersten Schritt wird ein Hilfswert y_b^* und im zweiten der gesuchte Wert y_b berechnet. Damit entsteht zwar ein erhöhter numerischer Aufwand, aber die Genauigkeit steigt wesentlich gegenüber den Einschrittverfahren. Neben dem RUNGE-KUTTA-Verfahren stellt das Predictor-Corrector-Verfahren das wesentlichste Integrationsverfahren dar. Als **Predictor-Schritt** wird in der einfachsten Form, so wie bei dem EULER-Verfahren, eine Rechteckformel für die Berechnung des Integrals verwendet:

$$y_b^* = y_a + \int_a^b f(x, y) dx \approx y_a + f(a, y_a) \cdot (b - a) \quad (5.95)$$

Laut der Ausgangsdifferentialgleichung kann man auch schreiben:

$$y_b^* = y_a + \int_a^b f(x, y) dx \approx y_a + \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=a} \cdot (b - a) = y_a + y'_a (b - a) \quad (5.96)$$

Der Unterschied besteht darin, dass beim Predictor-Schritt nicht der gesuchte Wert y_b berechnet wird, sondern dies als erste Näherung des Wertes, als y_b^* , betrachtet wird. Als zweiter

Schritt, dem **Corrector-Schritt**, wird jetzt das Integral durch die Trapez-Formel berechnet, wobei der Wert y_b^* als oberer Wert in die Trapez-Formel eingesetzt wird:

$$y_b = y_a + \frac{(b-a)}{2} \cdot (f(a, y_a) + f(b, y_b^*)) \quad (5.97)$$

Analog zum Predictor-Schritt lässt sich hier aus der Basis der Ausgangsdifferentialgleichung formulieren.

$$y_b = y_a + \frac{(b-a)}{2} \cdot (y'_a + y'_b) \quad (5.98)$$

Auch dieses Verfahren lässt sich auf n Teilintervalle des Bereiches a bis b ausdehnen und iterativ berechnen. Dann lauten der Predictor- und der Corrector-Schritt für das $n + 1$ -ste Intervall:

$$\begin{aligned} y_{n+1}^* &= y_n + \Delta x \cdot (f(x_n, y_n)) = y_n + \Delta x \cdot y'_n \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{\Delta x}{2} \cdot (f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)) = y_n + \frac{\Delta x}{2} \cdot (y'_n + y'_{n+1}) \end{aligned} \quad (5.99)$$

mit $\Delta x = |x_{n+1} - x_n|$

Auf dieser Basis sind eine Reihe von Verfahren entwickelt worden. Das obige Verfahren besitzt den Nachteil, dass ein relativ großes Residuum, d.h. ein Restwertfehler, entsteht, der proportional zu Δx^2 wächst ($O(\Delta x^2)$). Der Vorteil liegt in einer relativ einfachen Schrittweitensteuerung, da nur der Wert $f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)$ oder die Ableitung von y_{n+1} neu zu berechnen ist. Ein sehr weit verbreitetes Predictor-Corrector-Verfahren ist das **ADAMS-BASHFORTH-MOULTON-Schema**. Dieses Verfahren besitzt eine sehr gute Stabilität. Im Gegensatz zu dem einfachen Predictor-Corrector-Verfahren werden hier mehrere Stützpunkte vorhergehender Integrationsschritte benötigt. Damit wird die Berechnung der Näherungsfläche nicht mehr über ein Rechteck erfolgen, sondern es wird zur Begrenzung ein Polygonzug verwendet. Bei dem häufig benutzten ADAMS-BASHFORTH 3. Ordnung erfolgt dies in folgender Art.

Für den Predictor-Schritt gilt:

$$\begin{aligned} y_{n+1}' &= y_n + \frac{\Delta x}{12} (5f(x_{n-2}, y_{n-2}) - 16f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 23f(x_n, y_n)) \\ &= y_n + \frac{\Delta x}{12} (5y'_{n-2} - 16y'_{n-1} + 23y'_n) \end{aligned} \quad (5.100)$$

Der Corrector-Schritt lautet dann:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{\Delta x}{12} (-f(x_{n-1}, y_{n-1}) + 8f(x_n, y_n) + 5f(x_{n+1}, y_{n+1}')) \\ &= y_n + \frac{\Delta x}{12} (-y'_{n-1} + 8y'_n + 5y'_{n+1}) \end{aligned} \quad (5.101)$$

Diese Methode liefert ein Residuum, das proportional mit der 4. Potenz von Δx ($\sim \Delta x^4$) läuft, d.h. $O(\Delta x^4)$. Der Nachteil besteht darin, dass bei einer Schrittweitenänderung für das

Intervall n auch die Intervalle $n - 1$ und $n - 2$ neu berechnet werden müssen. Damit ergibt sich die Notwendigkeit, die Intervalle n , $n - 1$ und $n - 2$ mit der gleichen Schrittweite Δx zu berechnen. Dies kann zu einem erhöhten Rechenaufwand bei starken Gradientenschwankungen führen.

Beispiel zur Anwendung des Predictor-Corrector-Verfahrens:

Es wird eine Näherungslösung für die DGL $y' = xy^{\frac{1}{3}}$ mit $y(1) = 1$ gesucht. Die Genauigkeit soll $\varepsilon \leq 10^{-5}$ betragen.

Für jeden Vorwärtsschritt wird die einfache EULERSche Formel als ein Predictor benutzt. Es setzt eine erste Schätzung von y_{n+1} voraus. Hier ergibt sich aus $x_0 = 1$ und $h = 0,05$

$$y(1,05) \approx 1 + 0,05 \cdot 1 = 1,05$$

Die DGL, die sich dann ergibt, lautet:

$$y'(1,05) = 1,05 \cdot 1,05^{\frac{1}{3}} = 1,0661$$

Zum Corrector wird die (nach der Trapezregel) modifizierte EULERSche Formel:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(y'_n + y'_{n+1})$$

Sie ergibt:

$$y(1,05) \approx 1 + 0,025(1 + 1,0661) = 1,05165$$

Mit diesem neuen Wert der DGL wird $y'(1,05)$ zu 1,0678 korrigiert, danach wird der Corrector neu angewandt und liefert als Ergebnis

$$y(1,05) \approx 1 + 0,025(1 + 1,0678) = 1,0517$$

Weitere Rechnungen bestätigen diese vier Dezimalstellen, so dass die gewünschte Genauigkeit erreicht ist. Es ist zu bemerken, dass dieselbe Genauigkeit mit der einfachen EULERSchen Formel mit der Schrittweite $h = 0,01$ erreicht wird.

Im Allgemeinen iteriert man so lange, bis sich die Konvergenz einstellt, falls eine vorliegt. Danach kann mit dem nächsten Intervall fortgefahren werden, indem man wieder mit einer einfachen Anwendung der Predictor-Formel beginnt.

5.4.2.4 Aufgaben zur numerischen Lösung von DGL

1. Wenden Sie die einfache EULERSche Methode auf die DGL

$$y' = -xy^2 \quad \text{mit} \quad y(0) = 2$$

an, indem Sie bis $x = 1$ mit wenigen Intervallen, z.B. $0,5$, $0,2$ und $0,1$ rechnen. Konvergieren die Ergebnisse gegen den exakten Lösungswert $y(1) = 1$?

2. Wenden Sie das RUNGE-KUTTA-Verfahren 4. Ordnung und ein Predictor-Corrector-Verfahren auf das oben genannte Problem an und vergleichen Sie die Ergebnisse.
3. Für die Konzentrationsänderung C [mg] durch Sorption von Schadstoffen an der Bodenmatrix soll folgende DGL gelten:

$$T_1 \dot{C} + C = K$$

wobei T_1 eine Zeitkonstante und K eine Konstante sein sollen. $T_1 = 1d^{-1}$, $K = 100$. Die Konzentrationsänderung zum Zeitpunkt $t = 0$ soll $C(0) = 0$ sein.

- a) Lösen Sie die DGL mittels EULER-Verfahren (Rechteckregel mit $h = 0,1d$) und berechnen Sie die Konzentrationsänderung für den Zeitpunkt $t = 1d$.
 - b) Skizzieren Sie den prinzipiellen Zeitverlauf der Konzentrationsänderung
4. Der Grundwasserwiederanstieg und damit die Auffüllung der Restlöcher in den ehemaligen Braunkohlentagebauen dauert unter natürlichen Bedingungen zu lange. Deshalb wird der Auffüllvorgang ($h_{t=0} = 0$) mit einer konstanten Fremdeinspeisung beschleunigt (siehe Abbildung 11.13). Stellen Sie für den Auffüllvorgang $h(t)$, ohne Berücksichtigung des Grundwasserleiters und eventueller Grundwasserneubildungsrate, die Differentialgleichung auf. Beschreiben Sie die Lösung mittels numerischer Methoden.

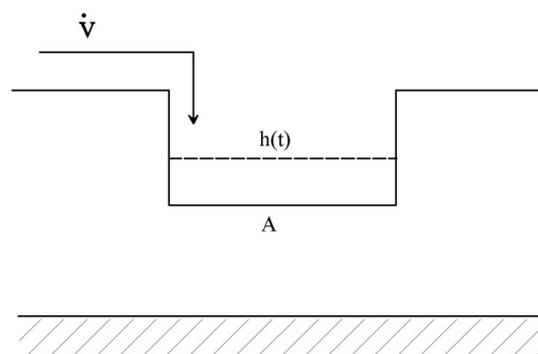


Abbildung 5.18: Füllvorgang eines Restloches

5. Es ist folgende Differentialgleichung gegeben:

$$\frac{dh}{dt} + k \cdot h = g \quad \text{mit} \quad h_{t=0} = 0$$

$$g = 0,015m \cdot s^{-1} \text{ und } k = 0,01s^{-1}$$

Lösen Sie die Differentialgleichung mittels numerischer Methoden.

Teil II

Partielle Differentialgleichungen der unterirdischen Prozesse

Kapitel 6

Überblick

Für die partiellen Differentialgleichungen (**Partial Differential Equation - PDE**), die durch die Berücksichtigung der funktionalen Abhängigkeiten von mehreren unabhängigen Variablen gekennzeichnet sind, gibt es keinen allgemein gültigen Lösungsansatz.

Aus diesem Grund werden im Folgenden ausgewählte PDE, die für die Hydrogeologie eine Rolle spielen, behandelt. Dabei stehen die Gleichungen der Grundwasserströmung und die Konvektions-Dispersions-Gleichungen im Vordergrund.

Je nach Grad der Kompliziertheit der Gleichung, bestimmt durch die Anzahl der unabhängigen Parameter, Berücksichtigung von Inhomogenitäten, Anisotropien und Nichtlinearitäten, werden die verschiedenen mathematischen Methoden, wie **analytische** oder **numerische** Lösungen, zur Anwendung gebracht.

Die physikalischen Prozesse lassen sich in die so genannten Mengenströmungs- und die Stofftransportprozesse einteilen. Die Benutzung des Energie- und Massenerhaltungsgesetzes führt auf folgendes System von gekoppelten partiellen Differentialgleichungen, bei denen für die Stoffprozesse nur der Transport angesetzt wird:

- die **dynamische Grundgleichung** des **Strömungsprozesses**:

$$\vec{v} = -k \text{ grad } h \quad (6.1)$$

- die **Bilanzgleichung** des **Strömungsprozesses**:

$$\text{div } \vec{v} = S_0 \frac{\delta h}{\delta t} - w \quad (6.2)$$

- die **Grenzbedingungen** des **Strömungsprozesses**:

Anfangs- und Randbedingungen 1., 2. und 3. Art

Bei der Modellbildung für den Stoff- und Energietransport muss für jeden Wasserinhaltsstoff, bzw. bei nichtmischbaren Stoffprozessen für jede Stoffgruppe und für jede Phase im Mehrphasensystem Boden (flüssig (Wasser, Öle), fest (Gesteinsmatrix), gasförmig (Luft, Gase)), dieses Gleichungssystem aufgestellt werden. Für jedes Teilsystem müssen die Bilanzgleichungen definiert werden, die sich aus folgenden Teilen zusammensetzen:

- den **dynamischen Grundgleichungen** für den **Transportprozess**:

$$\text{Transport durch Dispersion: } \vec{g}_1 = \vec{D} \text{ grad } P \quad (6.3)$$

$$\text{Transport durch Konvektion: } \vec{g}_2 = \vec{v}P \quad (6.4)$$

- den **Bilanzgleichungen** für den **Transportprozess**:

$$\text{div } \vec{g} = (n_0 + \alpha) \frac{\delta P}{\delta t} - w_g \quad (6.5)$$

- den **Grenzbedingungen** für den **Transportprozess**:

Anfangs- und Randbedingungen 1., 2. und 3. Art

Die Verkopplung der Gleichungen innerhalb eines jeden Teilsystems ist durch die Austauschterme gegeben. Über die Teilsysteme hinweg erfolgt sie durch interne Reaktionsterme. In einem Bilanzraum, auch als **repräsentatives Elementarvolumen (REV)** bezeichnet, gilt folgende Bilanzgleichung:

Transport = interne Reaktion + Speicherung + Austausch + externe Quellen

Zu diesen Grundgleichungen kommen noch die chemischen Reaktionsgleichungen (Stoffwandlungsprozesse) und biologische Wachstumsprozesse hinzu. Das mathematische Modell besteht damit aus einem System von gewöhnlichen bzw. partiellen Differentialgleichungen und algebraischen Gleichungen, deren Koeffizienten meist eine Funktion des Ortes, der Zeit und des Potentials sind. Damit ist das System nichtlinear und sowohl orts- als auch zeitvariant. Die Prozesse im Boden- und Grundwasserbereich sind durch eine hohe Komplexität, eine schlechte Kondition, einen großen Bereich der Zeitkonstanten und eine hohe Unsicherheit der Eingangsparameter gekennzeichnet.

Die Grundgleichungen lassen sich jeweils für den Strömungs- und den Stoffprozess zusammenfassen, und man erhält zwei nichtlineare partielle Differentialgleichungen (PDGL) zweiter Ordnung:

- die **Leitungsgleichung** für den **Strömungsprozess** (parabolische PDE):

$$\operatorname{div} (k_{(x,y,z)} \operatorname{grad} h) = S_0 \frac{\delta h}{\delta t} - w \quad (6.6)$$

- die **Konvektions-Diffusions-Gleichung** für den **Transportprozess** (hyperbolische PDE):

$$\operatorname{div} \left(\vec{D} \operatorname{grad} P - \vec{v} P \right) = (n_0 + \alpha) \frac{\delta P}{\delta t} - w_g \quad (6.7)$$

Je nach Verhältnis des Dispersionsanteiles $\left(\vec{D} \operatorname{grad} P \right)$ zur Konvektion $\left(\vec{v} P \right)$ am Gesamttransportprozess ändert sich die Eigenschaft dieser PDE zwischen überwiegend parabolischen, hyperbolischen oder PDE ersten Grades. Wenn die Konvektion gegen Null geht $\left(\vec{v} P \rightarrow 0 \right)$ entsteht die PDE parabolischen Typs, bei $\left(\vec{D} \operatorname{grad} P \rightarrow 0 \right)$ erhält man die PDE erster Ordnung.

Die Verkopplung des Mengen- und des Stoffstromes erfolgt über die Kennwerte der Wasserbeschaffenheit (Temperatur T , Stoffkonzentration C , kinematische Zähigkeit ν und Dichte

ρ) und über die Kennwerte der unterirdischen Strömungsvorgänge (Filtergeschwindigkeit \vec{v} , Speicherinhaltsänderung $C \cdot \frac{\delta p}{\delta t}$ sowie innere Strömungsquellen und -senken w).

Diese komplexe Form der Systembeschreibung wird oft durch vereinfachte Formen, bei denen der eine oder andere Prozess vernachlässigt wird oder die Abhängigkeit von der einen oder anderen unabhängigen Variablen außer acht gelassen wird, angenähert. Eine grundlegende Vereinfachung entsteht durch die entkoppelte Betrachtungsweise von Strömungs- und Transportprozessen und chemischer Kinetik. Wesentliche Vereinfachung erhält man auch durch die Reduzierung des mehrdimensionalen Raumes auf eine Ortskoordinate und/oder die Zeitvariable.

Diese Vorgehensweise soll exemplarisch an oft verwendeten und ingenieurmäßig bedeutungsvollen Beispielen durch folgende Kapitel demonstriert werden.

6.1 Eindimensionale Strömungsgleichung

Unter der Voraussetzung vereinfachter Strömungsbedingungen, der Betrachtung im Zylinderkoordinatenraum sowie der Integration über die Höhe z durch eine Transformation, z. B. das so genannte GIRINSKIJ-Potential Φ , erhält man für das **rotationssymmetrische Strömungsfeld** folgende Gleichungen:

$$\text{stationäre Strömung:} \quad \frac{d^2\Phi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} + \frac{w}{k} = 0 \quad (6.8)$$

$$\text{“undichter” Strömungsleiter (Leakyaquifer):} \quad \frac{d^2Z}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dZ}{dr} - \frac{Z}{B^2} = 0 \quad (6.9)$$

$$\text{nichtstationäre Strömung:} \quad \frac{\partial^2 Z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Z}{\partial r} - \frac{Z}{B^2} = a \frac{\partial Z}{\partial t} \quad (6.10)$$

Für diese Gleichungen sind von THEIS u. a. analytische Lösungen (siehe Abschnitt 8.1 THEISSche Brunnengleichung, Seite 204) gefunden worden. Diesen Gleichungen kommt die große Bedeutung zu, dass sie für viele ingenieurmäßige Untersuchungen, die lokalen Charakter tragen (ca. 200 m Ausdehnung, z. B. Baugruben) und für die die hydrogeologischen Voraussetzungen erfüllt sind, brauchbare Ergebnisse liefern. Außerdem bilden sie die Grundlage für Verfahren zur indirekten Parametererkundung, z.B. für die so genannten Pumpversuchsauswertungen (siehe Abschnitt 14.1 Pumpversuchsauswertung, Seite 390).

Ähnliche Voraussetzungen trifft man auch bei der **parallelen Grabenströmung** an, wobei die PDE folgende Form hat:

$$\text{parallele Grabenanströmung:} \quad \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2} - \frac{w}{k} = a \frac{\partial Z}{\partial t} \quad (6.11)$$

Bedeutung haben die eindimensionalen Prozesse auch bei der Untersuchung der Transportvorgänge in so genannten Stromröhren im Zusammenhang mit Schadstoffeinträgen.

6.2 Horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung

Die horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung stellt neben den Brunnengleichungen (siehe Gleichungen 6.8 bis 6.10) einen Fundamentalsatz für die Betrachtung der Strömungsprozesse dar. Mittels der DUPUIT-Annahmen (siehe Abschnitt 7.1 DUPUIT-Annahmen und Bilanzgleichung, Seite 192), die einen vereinfachten Grundwasserleiter charakterisieren, und einer Integraltransformation zur Beschreibung der Profildurchlässigkeit, der Transmissibilität T , ergibt sich die Strömungsgleichung zu:

$$\operatorname{div} (T_{(x,y)} \operatorname{grad} z_R) = S \frac{\partial z_R}{\partial t} - w_N \quad (6.12)$$

Diese Gleichung kann für jedes Grundwasserstockwerk getrennt angesetzt und die Kopplung zwischen den Grundwasserleitern über hydraulische Fenster erzielt werden. Diese Gleichung bildet die Grundlage der meisten hydrogeologischen Großraummodelle, so auch für die Bergbaugebiete des Mitteldeutschen und des Lausitzer Raumes.

6.3 Eindimensionaler Stofftransport

Für den Stofftransport spielt die Modellierung der eindimensionalen Prozesse eine ebenso große Rolle, da sie einerseits teilweise analytisch lösbar sind und zum anderen für die Modelleichung (z. B. bei so genannten Säulenversuchen) die Basis bilden. Auch greift die indirekte Parameterestimation darauf zurück (z. B. Tracerversuche). Als Beispielsgleichungen lassen sich ableiten:

- **Wärmetransport** infolge von Niederschlägen in der ungesättigten Bodenzone durch:

$$\text{Wasser (Index } w\text{): } \frac{\partial}{\partial z} \left(k_w \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p_w}{p_w} + z \right) \right) = \frac{dn_w}{dt} - w_w \quad (6.13)$$

$$\text{Luft (Index } L\text{): } \frac{\partial}{\partial z} \left(k_L \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{p_L}{p_L} + z \right) \right) = \frac{dn_L}{dt} - w_L \quad (6.14)$$

- **eindimensionaler Transport** durch:

$$\text{Konvektion: } \varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = -q \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6.15)$$

$$\text{Dispersion: } \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = a \frac{\partial C}{\partial t} \quad (6.16)$$

$$\text{Dispersion und Konvektion: } MD_1 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - q \frac{\partial C}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C - w \quad (6.17)$$

Dabei werden die drei Fälle unterschieden, bei denen λ und/oder w gleich bzw. ungleich von Null sind.

6.4 Mehrphasenströmung

Bei der Modellierung der Mehrphasenströmung wird das gleichzeitige Wirken mehrerer Phasen im porösen Medium, dem Boden bzw. dem Grundwasserleiter, berücksichtigt. In der Literatur werden an einem Dreiphasensystem die Beziehungen aufgestellt. Entsprechend der Gleichung 6.7 auf Seite 185 folgt bei Vernachlässigung des Dispersionsanteiles:

$$\operatorname{div} (p_\alpha \vec{v}_\alpha) + \frac{\partial(\Phi p_\alpha S_\alpha)}{\partial t} = p_\alpha \quad (6.18)$$

In diesem Fall stellt α eine allgemeine Fluidphase dar. Bei dem Dreiphasensystem werden die Phasen Wasser ($\alpha = w$), NAPL (n) und Luft (a) berücksichtigt. Dabei ist NAPL die Abkürzung für Mineralölprodukte (**Non-Aqueous-Phase-Liquid - NAPL**).

Unter Vernachlässigung des Impulssatzes zwischen den Fluidphasen kann das DARCY-Gesetz auf das Mehrphasensystem erweitert werden:

$$\vec{v}_\alpha = -\frac{k \cdot k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} (\operatorname{grad} p_\alpha + p_\alpha \cdot \vec{g}) \quad (6.19)$$

Die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Phasen werden durch zusätzliche Gleichungen, die Nebenbedingungen, beschrieben:

$$s_w + s_n + s_a = 1 \quad (\text{der Porenraum wird von der Summe der drei Phasen ausgefüllt})$$

$$p_n \cdot p_w = P_{Cnw}(S_w, S_a) \quad (\text{Kapillardruck-Sättigungsbeziehung})$$

$$p_a \cdot p_n = P_{Can}(S_w, S_a)$$

$$k_{r\alpha} = k_{r\alpha}(S_w, S_a) \quad (\text{Relative Permeabilitäts-Sättigungsbeziehung})$$

Das nichtlineare Gleichungssystem lässt sich in vielen praktischen Anwendungsfällen unter der Annahme, dass Luft unendlich mobil ist, auf jeweils eine Bewegungsphase für die Wasserphase und für die NAPL-Phase beschränken.

Bei dem **eindimensionalen Verdrängungsvorgang** von Öl durch Wasser wird die analytische Lösung von BUCKLEY und LEVERETT, die die instationären Vorgänge beschreibt, verwendet. Zur Beschreibung der relativen Permeabilitäts-Sättigungskurve kann die COREY-Funktion angesetzt werden:

$$k_{rw} = S^{*4} \quad (6.20)$$

$$k_{rn} = (1 - S^*)^2 \cdot (1 - S^{*2}) \quad (6.21)$$

$$\text{mit : } S^* = \frac{(S_w - S_{wr})}{(1 - S_{wr} - S_{nr})}; \quad S_{wr} = S_{nr} = 0, 2$$

Für den **zweidimensionalen Fall** und die Untersuchung des Dreiphasensystems Luft/NAPL/-Wasser werden folgende Ansätze untersucht:

Für die **Kapillardruck-Sättigungsbeziehung** wird der Ansatz von PARKER zur Parametrisierung verwendet:

$$P_{Cnw} = p_n - p_w = \frac{1}{\alpha_{vG} \cdot -\beta_{nw}} \left(S_e \frac{n_{vG}}{1 - n_{vG}} - 1 \right)^{\frac{1}{n_{vG}}} \quad (6.22)$$

$$P_{Can} = p_a - p_n = \frac{1}{\alpha_{vG} \cdot -\beta_{an}} \left(\left(\frac{S_n + S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right)^{\frac{n_{vG}}{1 - n_{vG}}} - 1 \right)^{\frac{1}{n_{vG}}} \quad (6.23)$$

$$\text{mit : } S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}}; \beta_{nw} = \frac{\sigma_{aw}}{\sigma_{nw}}; \beta_{an} = \frac{\sigma_{aw}}{\sigma_{an}}$$

Für die **relative Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung** für die nichtbenetzende Flüssigkeit (NAPL) wird ein Modell von STONE benutzt:

$$k_{rn} = \frac{S_n(1 - S_{wr})k_{rnw} \cdot k_{ran}}{(1 - S_w)(S_n + S_w - S_{wr})} \quad (6.24)$$

wobei k_{rnw} und k_{ran} die relative Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung der NAPL-Phase in einem Zweiphasensystem (Wasser/NAPL) und (Luft/NAPL) darstellen. Die in der ursprünglichen Form des STONESchen Modells vorkommenden Parameter S_{nr} und k_{rncw} wurden mit den Werten "0" und "1" belegt. Für die Wasserphase wird die Beziehung von PARKER verwendet:

$$k_{rw} = \sqrt{S_e} \left(1 - \left(1 - S_e \frac{n_{vG}}{n_{vG} - 1} \right)^{\frac{(n_{vG}-1)}{n_{vG}}} \right)^2 \quad (6.25)$$

$$\text{mit: } S_e = \frac{S_w - S_{wr}}{(1 - S_{wr})}$$

Kapitel 7

Horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung

7.1 DUPUIT-Annahmen und Bilanzgleichung

Die Beschreibung des rotationssymmetrischen Grundwasserströmungsfeldes erfolgt auf Basis von horizontalebene Strömungsvorgängen, bei denen der vertikale Strömungsvektor zu vernachlässigen ist. Die Überführung des dreidimensionalen Strömungsregimes in eine zweidimensionale mathematische Beschreibung erfolgt unter Berücksichtigung der

DUPUIT-Annahmen:

- Die Potentiallinien $h = const$ verlaufen parallel zur z -Achse. Das ist gleichbedeutend damit, dass die vertikale Komponente der Grundwasserströmung ($v_z \rightarrow 0$) gleich Null ist. Dies kann durch einen unendlich großen vertikalen Strömungswiderstand (spezifischer Durchlässigkeitskoeffizient in z -Richtung ($k_z \rightarrow \infty$)) oder durch einen fehlenden Gradienten der Standrohrspiegelhöhe entstehen:

$$v_z = \frac{\partial h}{\partial z} = 0$$

- Die horizontale Geschwindigkeit ist über die gesamte durchströmte Höhe des Grundwasserleiters konstant. Das heißt, die vertikalen Gradienten der horizontalen Strömungskomponenten sind gleich Null:

$$\frac{\partial v_x}{\partial z} = \frac{\partial v_y}{\partial z} = 0 \quad (7.1)$$

- Die horizontale Geschwindigkeit ist dem Gefälle der freien Oberfläche entsprechend dem DARCY-Gesetz proportional:

$$v_y = -k_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \quad (7.2)$$

$$v_x = -k_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \quad (7.3)$$

Das **Kräftegleichgewichtsgesetz** wird unter der Voraussetzung, dass nur Druckkraft, Schwerkraft, Kapillarkraft und innere Reibung wirken, aufgestellt. Trägheitskräfte, Haftkräfte, turbulente Reibungskräfte und andere sollen dagegen vernachlässigbar klein sein. Da die Grundwasserbewegung als gesättigte Filterströmung angesehen wird, erhält man nach DARCY folgendes Gesetz :

$$\vec{v} = -k \cdot \text{grad } h \quad (7.4)$$

Das **DARCY-Gesetz** ist nur so lange gültig, wie die bei seiner Ableitung vorhandenen Voraussetzungen zutreffen. So verliert es beim Anwachsen der oben vernachlässigten Kräfte seine Gültigkeit. Für die praktisch interessierenden Grundwasserströmungsvorgänge kann jedoch die Gültigkeit des DARCY-Gesetzes mit hinreichender Genauigkeit angenommen werden.

Nur in unmittelbarer Brunnennähe kann bei großen Filtergeschwindigkeiten eine Verletzung dieses Gesetzes auftreten.

Mit den DUPUIT-Annahmen lässt sich die Bilanzgleichung für die horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung aufstellen. Der spezifische Volumenstrom \vec{q} , bezogen auf eine Strömungsfeldbreite von $1m$, berechnet sich nach:

$$\vec{q} = \int_{z=a}^D \vec{v} dz \quad (7.5)$$

D durchströmte Mächtigkeit

$$D = \left. \begin{array}{l} M \quad \text{Mächtigkeit des Aquifers bei gespanntem} \\ z_R \quad \text{Lage der freien Grundwasseroberfläche bei ungespanntem} \end{array} \right\} \text{GWL}$$

und damit lautet die **Bilanzgleichung**:

$$\text{div } \vec{q} = \left(n_0 + \int_{z=a}^D S_0 dz \right) \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - w \quad (7.6)$$

w Quell-/Senkenterm

n_0 Speicherkoeffizient an der freien Grundwasseroberfläche auf Grund von gravimetrischen Effekten

S_0 elastischer Speicherkoeffizient, der innerhalb des Grundwasserleiters wirkt

Der summarische Ausdruck für die Speicherfähigkeit wird auch mit S als **allgemeiner Speicherkoeffizient** bezeichnet:

$$S = \left(n_0 + \int_{z=a}^D S_0 dz \right) \quad (7.7)$$

$$S = \left. \begin{array}{ll} n_0 + \int_{z=0}^{z_R} S_0 dz & \text{bei ungespanntem} \\ \int_{z=0}^M S_0 dz & \text{bei gespanntem} \end{array} \right\} \text{GWL} \quad (7.8)$$

Für den Fall, dass der gravimetrische Speicherkoeffizient wesentlich größer als die Summe aller elastischen Effekte in vertikaler Richtung ist, kann man schreiben:

$$n_0 \gg \int_{z=a}^{z_R} S_0 dz \quad (7.9)$$

Der Speicherkoeffizient S kann folgende Werte annehmen:

$$S = \left\{ \begin{array}{ll} n_0 \approx n_a \approx n_e & \text{bei ungespanntem} \\ \int_{z=0}^M S_0 dz & \text{bei gespanntem} \end{array} \right\} \text{GWL} \quad (7.10)$$

Daraus resultiert, dass bei Vorhandensein einer freien Grundwasseroberfläche und einer kleinen durchströmten Mächtigkeit des GWL ($D \ll 100m$) der Speicherkoeffizient nur von dem gravimetrischen Koeffizienten abhängt.

Für die wirkende Wasserhöhe h gelten entsprechend den Grundwasserverhältnissen folgende Beziehungen:

$$h = \left\{ \begin{array}{ll} h & \text{bei gespanntem} \\ z_R & \text{bei ungespanntem} \end{array} \right\} \text{GWL}$$

Damit schreibt sich die Bilanzgleichung, auch als Kontinuitätsgleichung bezeichnet, in der Form:

$$\text{div } \vec{q} = S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - w \quad (7.11)$$

Mit den Gleichungen 7.5 und 7.6 erhält man die horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung in folgender Form:

$$\text{div} \left(\int_{z=a}^D k dz \text{ grad } h \right) = S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - w \quad (7.12)$$

Definitionsgemäß ist h , damit auch $\text{grad } h$, unabhängig von z und kann somit aus dem Integral herausgezogen werden. Als weitere vereinfachte Schreibweise wird für das Integral über den Durchlässigkeitsbeiwert der Begriff der **Transmissibilität** T eingeführt:

$$T = \int_{z=a}^D k dz \quad (7.13)$$

Diese Integraldarstellung der Transmissibilität lässt sich numerisch schlecht auswerten, da der Durchlässigkeitskoeffizient nur als Stufenfunktion und nicht als stetige Funktion darstellbar ist.

Damit lautet die **horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung** in der Darstellung der Wasserhöhen:

$$\left. \begin{array}{l} \text{div} (T \text{ grad } h) = S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - w \quad \text{für gespannte} \\ \text{div} (T \text{ grad } z_R) = S \cdot \frac{\partial z_R}{\partial t} - w \quad \text{für ungespannte} \end{array} \right\} \text{GWL} \quad (7.14)$$

7.2 Potentialdarstellung

Zur Lösung der partiellen Differentialgleichung der unterirdischen Strömungsvorgänge wurde im vorangegangenen Kapitel eine Integraltransformation benutzt, die zur Größe der Transmissibilität führt. In diesem siehe Abschnitt soll nun durch Anwendung einer anderen Integraltransformation, das so genannte **GIRINSKIJ-Potential** Φ , auch eine relativ einfache Lösung herbeigeführt und somit die horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung in der Potentialschreibweise dargestellt werden.

Das **GIRINSKIJ-Potential** Φ ist definiert als:

$$\Phi(x, y) = \int_{z=a}^D g(z) \cdot (h(x, y, z) - z) dz \quad (7.15)$$

In dieser Gleichung charakterisiert die Funktion $g(z)$ die Abhängigkeit des Durchlässigkeitsbeiwertes k von der Höhe z :

$$k(x, y, z) = k(x, y) \cdot g(z) \quad (7.16)$$

Für den im Folgenden zu betrachteten **ungeschichteten** Grundwasserleiter gilt:

$$g(z) = 1$$

Unter Beachtung der auch hier geltenden DUPUIT-Annahmen ($\frac{\partial h}{\partial z} = 0$; $h \neq f(z)$) und der Annahme, dass die untere Begrenzung des Grundwasserleiters a gleich Null ist ($a = 0$) ergibt das Integral die beiden Lösungen:

$$\Phi(x, y) = \int_{z=0}^D (h - z) dz = \left[h \cdot z - \frac{z^2}{2} \right]_0^D \quad (7.17)$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} M \cdot h - \frac{M^2}{2} & \text{gespannter} \\ \frac{z_R^2}{2} & \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL} \quad (7.18)$$

Der spezifische Volumenstrom ergibt sich unter Beachtung des DARCY-Gesetzes zu:

$$\vec{q} = \int_{z=0}^D \vec{v} dz \quad (7.19)$$

und mit: $\vec{v} = -k \text{ grad } h$ ergibt sich

$$\vec{q} = \int_{z=0}^D (-k \cdot \text{grad } h) dz \quad (7.20)$$

Da definitionsgemäß k und h keine Funktionen von z sind, kann man k vor das Integral schreiben und die Reihenfolge der Differentiation (*grad*) und der Integration vertauschen.

Man erhält:

$$\vec{q} = -k \cdot \text{grad} \int_{z=0}^D h dz \quad (7.21)$$

$$\vec{q} = -k \cdot \text{grad} \Phi \quad (7.22)$$

Die horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung lautet in Potentialform:

$$\left. \begin{aligned} \text{div} (k \text{ grad } \Phi) &= S \frac{\partial h}{\partial t} - w && \text{gespannter} \\ \text{div} (k \text{ grad } \Phi) &= S \frac{\partial z_R}{\partial t} - w && \text{ungespannter} \end{aligned} \right\} \text{GWL} \quad (7.23)$$

Diese PDE lassen sich in eine einheitliche Potentialschreibweise überführen, wenn die Definition für das GIRINSKIJ-Potential, getrennt nach gespannten und ungespannten Verhältnissen, eingeführt wird:

$$\begin{aligned} S \frac{\partial h}{\partial t} &= S \cdot \frac{\partial h}{\partial \Phi} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t} && (7.24) \\ &= \left\{ \begin{array}{ll} S \cdot \frac{1}{M} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{S}{M} \frac{\partial \Phi}{\partial t} & \text{mit } \Phi = Mh - \frac{M^2}{2} \quad \text{gespannter} \\ S \cdot \frac{1}{\sqrt{2\Phi}} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{S}{z_R} \frac{\partial \Phi}{\partial t} & \text{mit } \Phi = \frac{z_R^2}{2} \quad \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL} \end{aligned} \quad (7.25)$$

Dabei gilt:

$$h = \frac{\Phi}{M} + \frac{M}{2} \quad (7.26)$$

$$\frac{\partial h}{\partial \Phi} = \frac{1}{M} \quad (7.27)$$

bzw.

$$z_R = \sqrt{2\Phi} \quad (7.28)$$

$$\frac{\partial z_R}{\partial \Phi} = \frac{1}{\sqrt{2\Phi}} \quad (7.29)$$

Setzt man einen homogenen, isotropen Grundwasserleiter voraus, d.h. $k = \text{const.}$, so kann k aus der Divergenz herausgenommen und durch Division auf die rechte Seite gebracht werden. Man erhält mit der Einführung der Transmissibilität und der geohydraulischen Zeitkonstanten dann:

$$\text{div} (\text{grad } \Phi) = a \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \frac{w}{k}$$

mit:

$$a = \frac{S}{T} \quad (7.30)$$

$$T = \int_{z=0}^D k dz = \left\{ \begin{array}{ll} k \cdot M & \text{gespannter} \\ k \cdot z_R & \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL} \quad (7.31)$$

Damit hat man eine allgemeingültige PDE gefunden, die linear und damit analytisch lösbar ist.

Beachtet werden muss allerdings, dass die Linearität bei Grundwasserverhältnissen mit freier Grundwasseroberfläche, d.h. bei ungespannten Grundwasserleitern, nicht exakt gilt, da die geohydraulische Zeitkonstante a eine Funktion von z_R ist. In diesem Fall ist für T und damit auch für a mit dem zeitlichen Mittelwert zu arbeiten. Dabei hat sich für a folgende Näherung gut bewährt:

$$\tilde{a} \approx \frac{a_{t=0} - 2a_t}{3} \quad (7.32)$$

Für extreme Absenkungsverhältnisse über 10% der Grundwasserspiegelhöhe gilt diese Gleichung also nur näherungsweise. An Stelle des GIRINSKIJ-Potentials ist sehr oft die Veränderung des Standrohrwasserspiegels, d.h. die Absenkung, von Interesse. Deshalb wird die Potentialdifferenz zwischen dem Ausgangspotential Φ_0 und dem aktuellen Potential Φ benutzt. Bei ungeschichtetem Grundwasserleiter, d.h. bei $k(z) = \text{const.}$ und damit $g(z) = 0$, gilt:

$$Z = \Phi_{t=0} - \Phi = \int_{z=0}^D (h_{t=0} - z) dz - \int_{z=0}^D (h_t - z) dz \quad (7.33)$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} M(h_{t=0} - h) & \text{gespannter} \\ \frac{(z_{Rt=0}^2 - z_R^2)}{2} & \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL}$$

Der Index 0 steht dabei für die Verhältnisse zum Zeitpunkt $t = 0$, d.h. $\Phi_0 = \Phi_{t=0}$, $h_0 = h_{t=0}$, $z_{R0} = z_{Rt=0}$. In einigen Literaturstellen wird dafür auch der Index n (Φ_n , h_n , z_{Rn}) benutzt.

Setzt man dies in die PDE ein, so erhält man:

$$\text{div}(\text{grad } Z) = a \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{w'}{k} \quad (7.34)$$

Definitionsgemäß ist darin w' die Speisungsgröße, die durch die Potentialänderung Z verursacht wird, während w die Speisungsgröße darstellt, die von außen auf den Grundwasserleiter wirkt, z. B. die natürliche Grundwasserneubildung:

$$\frac{w'}{k} = \frac{w}{k} - \left(\frac{w}{k} \right)_{t=0} \quad (7.35)$$

Praktisch interessieren folgende zwei Fälle:

- $w' = 0$,
d.h. die Speisungsverhältnisse werden durch die betrachtete Änderung des Grundwasserspiegels nicht verändert, und
- $\frac{w'}{k} = \frac{Z}{B^2}$,
d.h. die Potentialdifferenz Z verursacht eine zusätzliche proportionale Speisung (siehe Abschnitt 8.1.3 Speisung aus benachbarten Schichten, Seite 230)

Setzt man in allen Fällen einen Speisungsfaktor B an, der für den ersten Fall gegen unendlich geht ($B \Rightarrow \infty$), erhält man die allgemeine Form, die **Standardform** der horizontalebenen Grundwasserströmungsgleichung:

$$\operatorname{div} (\operatorname{grad} Z) = a \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{Z}{B^2} \quad (7.36)$$

Zur Lösung dieser PDE ist es notwendig, die allgemeine vektorielle Differentialschreibweise in eine koordinatenbezogene Schreibweise zu überführen (siehe Abschnitt 2.2 Rechenregeln der Vektoralgebra, Seite 51).

Bei Einführung der kartesischen Koordinaten erhält man eine PDE, mit deren Hilfe man Grundwasserströmungsprozesse im Zusammenhang mit der Grabenanströmung (siehe Abschnitt 6.1 Eindimensionale Strömungsgleichung, Seite 186) untersuchen kann. Die Zylinderkoordinaten führen zu einer Darstellung, die bei der Untersuchung von rotationssymmetrischen Problemen (siehe Abschnitt 8.1 THEISSche Brunnengleichung, Seite 204) sehr nützlich ist.

7.3 Grenzbedingungen

Jeder Strömungsvorgang findet in einem örtlich und zeitlich abgegrenzten Raum statt, d.h. er stellt ein in sich abgeschlossenes System dar, welches mit seiner Umgebung über bestimmte Bedingungen verbunden ist. Über solche Koppelbedingungen können sowohl Informationen und Energien als auch Materie ausgetauscht werden. Sie werden als **Grenzbedingungen** bezeichnet. Während das System durch die PDE beschrieben wird und im Allgemeinen für alle Zustände gilt, werden durch die Grenzbedingungen eindeutige Lösungen erzwungen. Die Wirkung der Grenzbedingungen ist identisch mit dem Bestimmen der Integrationskonstanten bei der Lösung von DGL. Grenzbedingungen werden dem betrachteten System von außen aufgeprägt und wirken unabhängig von dessen Zustandsgrößen.

Dabei werden **Randbedingungen** (Grenzbedingungen an bestimmten Ortspunkten) und **Anfangsbedingungen** (Grenzbedingungen zum Bezugszeitpunkt) unterschieden. Neben dem Kräftegleichgewichtsgesetz und dem Massenerhaltungsgesetz dienen die Anfangs- und Randbedingungen zur eindeutigen mathematischen Beschreibung des Originalprozesses, dem Strömungsvorgang. Sie sind als Bestandteil des mathematischen Modells zu sehen.

7.3.1 Anfangsbedingungen

Bei der Betrachtung von dynamischen Systemen wird von Relativzeiten gesprochen. Der absolute Zeitpunkt, zu dem das System aus seinem statischen Verhalten ausgelenkt wird, wird als Startpunkt mit der Relativzeit $t = 0$ betrachtet. Zur Definition des Zustandes des dynamischen Systems zu diesem Zeitpunkt dienen die Anfangsbedingungen. Da die Zustandsvariable der horizontalebene Grundwasserströmung die Piezometerhöhe h oder die Lage der freien Oberfläche ist, handelt es sich bei den Anfangsbedingungen innerhalb des Systems um Potentiale, d.h. um die Grundwasserhöhe bzw. das dazugehörige transformierte Potential. Im Modell wird dies eine Funktion h , z_R oder Φ in Abhängigkeit vom Ort sein. Zur Aufrechterhaltung des stationären Zustandes sind an den Rändern auch noch andere Bedingungen notwendig. Diese sind von derselben Art wie die Randbedingungen. Der Unterschied besteht darin, dass sie bereits zur Zeit $t < 0$ gelten.

7.3.2 Randbedingungen

Bei der Grundwasserströmung werden drei verschiedene Arten von Randbedingungen entsprechend ihrer physikalischen Wirkungsart unterschieden (siehe Abbildung 7.1):

1. Art (DIRICHLET-Bedingungen)
2. Art (NEUMANN-Bedingungen)
3. Art (CAUCHY-Bedingungen)

Randbedingungen sind im Allgemeinen Funktionen des Ortes und der Zeit. Man unterscheidet Randbedingungen, die im Inneren des Strömungsfeldes wirken (z. B. Brunnen, Seen, Flüsse, Niederschlag, Verdunstung), von denen, die am äußeren Rand angreifen (z. B. Begrenzung des Strömungsfeldes durch Flüsse oder Barrieren). Kennzeichnend für Randbedingungen ist es, dass ihre Wirkung unabhängig von den Strömungsverhältnissen (z. B. Grundwasserstand) des Untersuchungsgebiets ist. Im Allgemeinen ist es kaum möglich, für die geohydraulischen Randbedingungen einen geschlossenen analytischen Ausdruck zu finden.

- **Randbedingungen 1. Art (DIRICHLET-Bedingungen)** wirken, wenn das hydraulische Potential (z. B. h, z_R, Z, Φ) auf der Berandung in Abhängigkeit von der Zeit t bekannt und unabhängig vom Potential, d.h. der Systemvariablen des Untersuchungsgebietes, ist. Dies tritt z. B. bei Flüssen, Seen oder Drainagen auf:

$$\varphi = \varphi(x, y, t) \quad (7.37)$$

- **Randbedingungen 2. Art (NEUMANN-Bedingungen)** wirken, wenn die Quellintensitätsverteilung und damit das hydraulische Potentialgefälle auf der Berandung in Abhängigkeit von der Zeit t bekannt ist. Dies wird beispielsweise hervorgerufen durch Brunnen mit konstanter Förderleistung, Einspeisungen auf Grund von Grundwasserneubildungen, Abdichtungen durch Spundwände oder Untergrundbauwerke:

$$\text{grad } \varphi = \text{grad } \varphi(x, y, t) \quad (7.38)$$

- **Randbedingungen 3. Art (CAUCHY-Bedingungen)** wirken, wenn sich zwischen einer Fläche mit bekannter Potentialverteilung und der Berandung des Strömungsfeldes ein im Allgemeinen zeitlich konstanter Strömungswiderstand befindet. Solche Randbedingungen wirken bei Flüssen mit kolmatierter Sohlschicht sowie Anströmwiderständen von Heberbrunnen:

$$\varphi + A \text{ grad } \varphi = B \quad (A \text{ und } B \text{ sind bestimmte Konstanten}) \quad (7.39)$$

In der Abbildung 7.1 ist die Wirkung von Randbedingungen auf einen Grundwasserleiter dargestellt. Man kann erkennen, dass die Volumenströme der Randbedingungen 1. und 3. Art von der Differenz zwischen wirkendem Potential (Wasserstand h) im Grundwasserleiter und dem der Randbedingung abhängen. Deshalb kann sich der Volumenstrom in seiner Größe und seiner Richtung ändern.

Bei einer Randbedingung 2. Art kann sich das Potential der Randbedingung (eventuell als Unter- oder Überdruck betrachtet) entsprechend mit dem Potential des Grundwasserleiters ändern.

Bei den numerischen Modellen (siehe Abschnitt 9.1.1 Numerische Methoden, z.B. Finite Differenzen Methoden, Seite 247) entstehen im Zuge der Festlegung der Modellgrenzen zusätzliche Randbedingungen. Im Gegensatz zu dem Originalvorgang, der eine unendliche räumliche Ausdehnung besitzt, sind die numerischen Modelle auf Grund der endlichen Rechnerkapazität (Speicherplätze, Rechengeschwindigkeit) räumlich begrenzt. Damit entstehen an den Rändern der Modelle meist künstliche Randbedingungen 2. Art mit $\text{grad } \varphi = 0$, d.h. der Modellrand wirkt wie eine künstliche Barriere, über die keine Volumenströme mit der Umgebung ausgetauscht werden können. Damit entsteht schon bei der Modellbildung ein beträchtlicher Fehler, der durch geeignete Maßnahmen verkleinert oder eliminiert werden muss (siehe Abschnitt 9.1.1 Finite Differenzen Methode, Seite 247).

Ein andersartiges Problem im Zusammenhang mit den Randbedingungen entsteht bei der Untersuchung des Zusammenspiels von Oberflächen- und Grundwasserleitersystemen. Zwischen den Oberflächengewässern und den Grundwasserleitern und/oder der ungesättigten Bodenzone kommt es zu einem Volumenstrom. Je nach Potentialverhältnissen kann es zu einer Ex- oder Infiltration von Oberflächenwasser aus oder in den Grundwasserleiter kommen. Ist dieser Filtrationsstrom wesentlich kleiner als der Mengenstrom innerhalb des Gewässers, bzw. die Filtrationsmenge wesentlich kleiner als das gesamte Speichervolumen des Oberflächengewässers, so hat das Oberflächengewässer die Wirkung einer Randbedingung auf das Grundwasser. Im anderen Fall, wenn sich die Potentiale der Oberflächengewässer durch die Filtrationserscheinung verändern, dürfen die Oberflächengewässer nicht als Randbedingung betrachtet werden, sondern als Bestandteile des Systems und sind über geeignete mathematische Beziehungen an das Grundwasserleitermodell anzukoppeln.

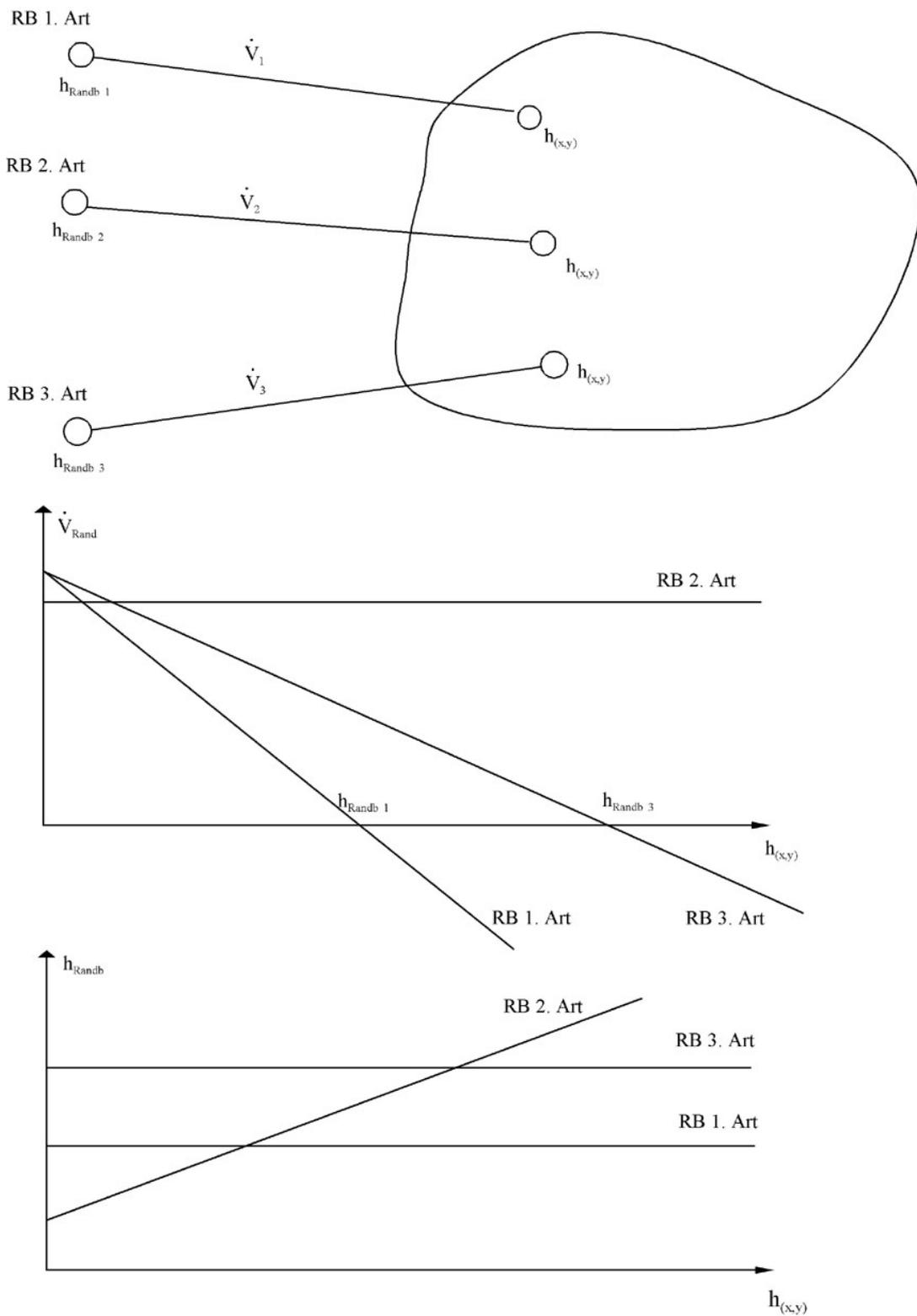


Abbildung 7.1: Wirkung von Randbedingungen auf einen Grundwasserleiter

Kapitel 8

Analytische Lösungen

8.1 THEISSche Brunnengleichung (Rotationssymmetrische Strömung)

Die Berechnung des rotationssymmetrischen Strömungsfeldes, d.h. die Lösung der partiellen Differentialgleichung, stellt eine Grundaufgabe der Geohydraulik dar.

Mittels der **Standardform** der horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung, hergeleitet im Abschnitt 7.2 Potentialdarstellung, Seite 195:

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad} Z) = a \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{Z}{B^2}$$

können derartige Vorgänge beschrieben werden. Veränderungen der Grundwasserströmungsverhältnisse beim Einsatz von Vertikalfilterbrunnen wurden unter Benutzung obiger PDE erstmals von THEIS im Jahre 1935 berechnet und von mehreren weiteren Autoren vervollständigt (z.B. THIEM, JACOB, COOPER, NEUMANN, HANTUSH u.a.). Auf Grund der Wichtigkeit dieser Aufgabenstellung liegen zahlreiche Veröffentlichungen und Lehrbücher zu diesem Thema vor (z.B. von BUSCH/LUCKNER/TIEMER, Geohydraulik, u.a.).

8.1.1 Allgemeine Lösung

Ausgehend von der partiellen Differentialgleichung, der Standardform der horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung, wird die Lösung, d.h. die Absenkung des Grundwasserspiegels in Abhängigkeit von Ort und Zeit, gesucht, wenn zum relativen Zeitpunkt $t = 0$ eine Randbedingungsänderung erfolgt. Nach Überführung der vektoriellen in koordinatenge-

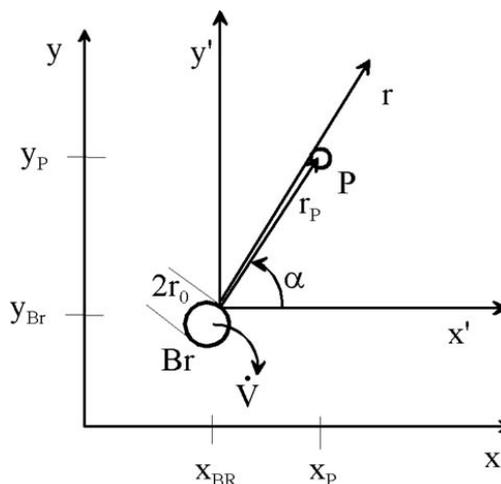


Abbildung 8.1: Koordinatensystem für rotationssymmetrische Brunnenanordnung

bundene Differentialoperatoren, hier in die Zylinderkoordinaten (siehe Abbildung 8.1, siehe

Abschnitt 2.2 Rechenregeln der Vektoralgebra, Seite 51), erhält man unter Beachtung, dass das Strömungsfeld rotationssymmetrisch ist ($Z(\alpha) = 0$) und keine Abhängigkeit von der Ortskoordinate z ($Z(z) = 0$) existiert:

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad} Z) = a \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{Z}{B^2} \quad (8.1)$$

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Z}{\partial r} = a \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{Z}{B^2} \quad (8.2)$$

Damit ist die Lösung dieser PDE, das Absenkungspotential Z , nur von der Zeit t und dem Radius r (Abstand zwischen Brunnen und Berechnungspunkt) abhängig. Aus obigen Voraussetzungen folgt auch, dass sich die Parameter des Grundwasserleiters, der Durchlässigkeitsbeiwert k und der Speicherkoeffizient S , im betrachteten Gebiet nicht über die Höhe z und/oder über den Winkel α ändern.

Die einfachste Lösung erhält man, wenn man folgende Anfangs- und Randbedingungen betrachtet und den Grundwasserleiter als unendlich ausgedehntes, homogenes und isotropes Strömungsfeld annimmt (siehe Abbildung 8.2).

$$\text{Anfangsbedingung:} \quad Z_{(r,t=0)} = 0 \quad (8.3)$$

$$\text{äußere Randbedingung:} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} Z_{(r,t)} = 0 \quad (8.4)$$

$$\text{innere Randbedingung:} \quad \lim_{r \rightarrow 0} 2\pi r k \frac{\partial Z}{\partial r} = -\dot{V} = \text{const} \quad (8.5)$$

Die innere Randbedingung kann technisch realisiert werden, wenn im Koordinatenursprung der Zylinderkoordinaten ($r = 0$) ein Vertikalfilterbrunnen angeordnet wird, der ab dem Zeitpunkt $t = 0$ einen konstanten Volumenstrom \dot{V} fördert (siehe Abbildung 8.1).

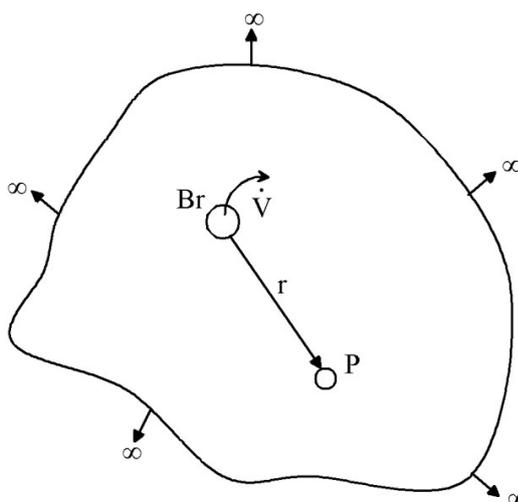


Abbildung 8.2: Unendlich ausgedehnter Grundwasserleiter

Die Lösung der entsprechend vereinfachten PDE

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Z}{\partial r} = a \frac{\partial Z}{\partial t} \quad (8.6)$$

wurde von THEIS unter o.g. Bedingungen zu:

$$Z(r, t) = \frac{\dot{V}}{4\pi k} W(\sigma), \quad \text{mit } \sigma = \frac{ar^2}{4t} \quad \text{und } a = \frac{S}{T} \quad (8.7)$$

gefunden.

Sowohl Grundwasserneubildungsraten als auch die Speisung aus den benachbarten Schichten werden hier nicht betrachtet. Ausführungen dazu befinden sich im Abschnitt 8.1.3 Speisung aus benachbarten Schichten, Seite 230.

Die so genannte **Brunnenfunktion** $W(\sigma)$ stellt das Integral über eine Exponentialfunktion dar, die in der Analysis als **Exponentialintegral** $\text{Ei}(x)$ bekannt und wie folgt definiert ist:

$$\text{Ei}(x) = \int_1^{\infty} \frac{e^{-xt}}{t} dt \quad (8.8)$$

$$\text{Ei}(x) = \gamma + \ln x + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n \cdot n!}, \quad (8.9)$$

γ wird als **EULER-Konstante** bezeichnet und beträgt:

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} \right) - \ln(n) \right) \quad (8.10)$$

$$\gamma \approx 0,5772156649$$

mit $x = -\sigma$ ergibt sich $W(\sigma)$ zu:

$$W(\sigma) = -\text{Ei}(-\sigma) = \int_1^{\infty} \frac{e^{\sigma}}{\sigma} d\sigma \quad (8.11)$$

Dieses Integral ist nicht elementar lösbar, sondern wird über eine unendliche Reihe berechnet.

$$W(\sigma) = -\gamma - \ln(\sigma) + \sigma - \frac{\sigma^2}{2 \cdot 2!} + \frac{\sigma^3}{3 \cdot 3!} - \frac{\sigma^4}{4 \cdot 4!} + \dots (-1)^{n+1} \frac{\sigma^n}{n \cdot n!} \quad (8.12)$$

$$W(\sigma) = -\ln(C\sigma) + \sigma - \frac{\sigma^2}{2 \cdot 2!} + \frac{\sigma^3}{3 \cdot 3!} - \frac{\sigma^4}{4 \cdot 4!} + \dots (-1)^{n+1} \frac{\sigma^n}{n \cdot n!}$$

$$W(\sigma) = -\ln(C\sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\sigma^n}{n \cdot n!}$$

mit $C = e^\gamma$

$$\gamma \approx 0,5772156649$$

$$C \approx 1,7810724$$

Die Lösung Gleichung 8.6 kann mittels Reihenentwicklung und Ansatzmethode erfolgen und ähnelt der Methodik zur Gewinnung der BESSEL-Funktion (siehe Abschnitt 5.2.2.3 DGL vom Typ c, Seite 137).

Tabelle 8.1 enthält die Werte der Brunnenfunktion $W(\sigma)$ für den σ -Bereich von:

$$1 \cdot 10^{-12} \leq \sigma \leq 9$$

Tabelle 8.1: Brunnenfunktion $W(\sigma)$ für den Bereich $1 \cdot 10^{-12} \leq \sigma \leq 9$

σ	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Exponent									
$1 \cdot 10^{+00}$	0, 2194	0, 0496	0, 0143	0, 00378	0, 00115	$3, 60 \cdot 10^{-4}$	$1, 16 \cdot 10^{-4}$	$3, 77 \cdot 10^{-5}$	$1, 24 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-01}$	1, 8229	1, 2227	0, 9057	0, 7024	0, 5598	0, 4544	0, 3738	0, 3106	0, 2602
$1 \cdot 10^{-02}$	4, 0379	3, 3547	2, 9591	2, 6813	2, 4679	2, 2953	2, 1508	2, 0269	1, 9187
$1 \cdot 10^{-03}$	6, 3315	5, 6394	5, 2349	4, 9482	4, 7261	4, 5448	4, 3916	4, 2591	4, 1423
$1 \cdot 10^{-04}$	8, 6332	7, 9402	7, 5348	7, 2472	7, 0242	6, 8420	6, 6879	6, 5545	6, 4368
$1 \cdot 10^{-05}$	10, 9357	10, 2426	9, 8371	9, 5495	9, 3263	9, 1440	8, 9899	8, 8563	8, 7386
$1 \cdot 10^{-06}$	13, 2383	12, 5451	12, 1397	11, 8520	11, 6289	11, 4465	11, 2924	11, 1589	11, 0411
$1 \cdot 10^{-07}$	15, 5409	14, 8477	14, 4423	14, 1546	13, 9314	13, 7491	13, 5950	13, 4614	13, 3437
$1 \cdot 10^{-08}$	17, 8435	17, 1503	16, 7449	16, 4572	16, 2340	16, 0517	15, 8976	15, 7640	15, 6462
$1 \cdot 10^{-09}$	20, 1460	19, 4529	19, 0474	18, 7598	18, 5366	18, 3543	18, 2001	18, 0666	17, 9488
$1 \cdot 10^{-10}$	22, 4486	21, 7555	21, 3500	21, 0623	20, 8392	20, 6569	20, 5027	20, 3692	20, 2514
$1 \cdot 10^{-11}$	24, 7512	24, 0581	23, 6526	23, 3649	23, 1418	22, 9595	22, 8053	22, 6718	22, 5540
$1 \cdot 10^{-12}$	27, 0538	26, 3607	25, 9552	25, 6675	25, 4444	25, 2620	25, 1079	24, 9744	24, 8566

Aus der Definition des Absenkungs- bzw. des GIRINSKIJ-Potentials heraus lässt sich die Rücktransformation zu den physikalischen Größen Wasserstand h bzw. z_R und der Absenkung s durchführen:

$$Z = \Phi_n - \Phi = \frac{\dot{V}}{4\pi k} W(\sigma) \quad (8.13)$$

$$\Phi = \int_{z=a}^D (h - z) dz = \left\{ \begin{array}{ll} Mh - \frac{M^2}{2} & \text{gespannter} \\ \frac{z_R^2}{2} & \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL} \quad (8.14)$$

und

$$s = \left\{ \begin{array}{ll} h_n - h & \text{gespannter} \\ z_{Rn} - z_R & \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL} \quad (8.15)$$

Für **gespannte** Strömungsverhältnisse erhält man damit:

$$\begin{aligned} Z &= \Phi_n - \Phi \\ &= \left(Mh_n - \frac{M^2}{2} \right) - \left(Mh - \frac{M^2}{2} \right) \\ &= M(h_n - h) \\ s_{gesp.} &= \frac{Z}{M} = \frac{\dot{V}}{4\pi T} W(\sigma) \quad \text{mit } T = k \cdot M \end{aligned} \quad (8.16)$$

bzw.

$$h = h_n - \frac{Z}{M} = h_n - \frac{\dot{V}}{4\pi T} W(\sigma) \quad (8.17)$$

Für **ungespannte** Strömungsverhältnisse erhält man:

$$\begin{aligned} Z &= \Phi_n - \Phi \\ &= \frac{z_{Rn}^2}{2} - \frac{z_R^2}{2} \\ s_{ungesp.} &= z_{Rn} - \sqrt{z_{Rn}^2 - 2Z} = z_{Rn} - \sqrt{z_{Rn}^2 - \frac{\dot{V}}{2\pi k} W(\sigma)} \end{aligned} \quad (8.18)$$

bzw.

$$z_R = \sqrt{z_{Rn}^2 - 2Z} = \sqrt{z_{Rn}^2 - \frac{\dot{V}}{2\pi k} W(\sigma)} \quad (8.19)$$

Diese scharfe Trennung zwischen gespannten und ungespannten Grundwasserverhältnissen und deren Modellierung mittels der THEIS-Lösung wird nicht in aller Literatur so konsequent ausgeführt. Dies trifft vor allem auch auf die Anwendung der grafischen Methoden

zur Pumpversuchsauswertung zu. Für den Fall, dass sehr mächtige Grundwasserleiter vorliegen, wie sie z. B. in Norddeutschland anzutreffen sind und die Absenkung nur wenige Prozente der Mächtigkeit beträgt, kann eventuell mit der Formel für gespannte Grundwasserleiter gerechnet werden.

Aus den oben abgeleiteten Formeln der Absenkung für die unterschiedlichen Grundwasserleiter ersieht man, dass die Änderung der Lage der freien Oberfläche bei ungespannten Grundwasserverhältnissen einen stark nichtlinearen Prozess darstellt.

Es ist zu beachten, dass die Brunnenformel in der unmittelbaren Brunnennähe bei $r \rightarrow r_0$ nicht gilt. Dies hat Ursachen vor allem in den nicht erfüllten Voraussetzungen, die zur Herleitung der rotationssymmetrischen Strömungsgleichung gemacht wurden. So gilt in Brunnennähe nicht, dass die vertikale Strömungskomponente $v_z = 0$ sein soll. Auch ist der effektive Brunnenradius r_0^* meistens nicht exakt bestimmbar. Sowohl die Speichereffekte als auch die Anströmwiderstände des Brunnenraumes sind kaum vorhersagbar (siehe Abschnitt 14.2 Pumpversuchssimulator, Seite 398). Trotz dieser Einschränkungen stellt die Brunnenformel zur Berechnung der Absenkung der Grundwasserspiegelhöhe infolge eines Volumenstromes eine grundlegende Berechnungsformel in der Geohydraulik dar.

Die Potenzreihe $W(\sigma)$ (siehe Gleichung 8.12, Seite 206) konvergiert für Werte von $\sigma < 0,03$ bereits so stark, dass Glieder mit höheren Potenzen von σ vernachlässigbar kleine Werte liefern. Damit kann $W(\sigma)$ bei einem Fehler von $\varepsilon < 1\%$ nur mit der Logarithmus-Funktion berechnet werden. Diese Näherung wurde von COOPER & JACOB 1946 vorgeschlagen:

$$W(\sigma) \approx -\ln(C \cdot \sigma) \quad (8.20)$$

$$W(\sigma) \approx \ln\left(\frac{2,246 T \cdot t}{S \cdot r^2}\right) \quad (8.21)$$

Diese vereinfachte Formel hat für viele praktische Anwendungen große Bedeutung. Insbesondere beruhen alle grafischen Verfahren der Pumpversuchsauswertung (siehe Abschnitt 14.1 Pumpversuchsauswertung, Seite 390) auf der Anwendung dieser Formel (siehe auch Tabelle 8.2).

Der relative Fehler, der durch die Näherung entsteht, lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$\varepsilon = \left| \frac{W(\sigma)_{C\&J} - W(\sigma)}{W(\sigma)} \right| = \left| \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \sigma^n}{n \cdot n!}}{\left(-\ln(C\sigma) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} \sigma^n}{n \cdot n!}\right)} \right| \quad (8.22)$$

Da die Reihe für Werte von $\sigma < 1$ sehr schnell konvergiert, ist es nur notwendig, das erste Glied der Reihe in die Fehlerabschätzung einzubeziehen. Für diese Werte von σ werden alle weiteren Glieder wesentlich kleiner als das lineare Glied sein und sind damit zu vernachlässigen. Das zweite Glied trägt nur mit einem Anteil, der quadratisch kleiner als das

erste Glied ist, bei.

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{-\ln(C\sigma) + \sigma}$$

In Tabelle 8.2 ist der Fehler für die Näherung von COOPER & JACOB in Abhängigkeit von σ dargestellt.

Tabelle 8.2: Fehler der Formel von COOPER und JACOB in Abhängigkeit von σ

σ	$\varepsilon = \frac{\sigma}{(\sigma - \ln(C \cdot \sigma))}$	Minimale Zeit t
$C = 1,7811$		
0,25000	23,61%	$1,00 \cdot r^2 \cdot a$
0,20000	16,23%	$1,25 \cdot r^2 \cdot a$
0,15000	10,20%	$1,67 \cdot r^2 \cdot a$
0,10000	5,48%	$2,50 \cdot r^2 \cdot a$
0,07500	3,59%	$3,33 \cdot r^2 \cdot a$
0,05000	2,03%	$5,00 \cdot r^2 \cdot a$
0,03000	1,01%	$8,33 \cdot r^2 \cdot a$
0,02500	0,80%	$10,00 \cdot r^2 \cdot a$
0,01000	0,25%	$25,00 \cdot r^2 \cdot a$
0,00750	0,17%	$33,33 \cdot r^2 \cdot a$
0,00500	0,11%	$50,00 \cdot r^2 \cdot a$
0,00250	0,05%	$100,00 \cdot r^2 \cdot a$
0,00100	0,02%	$250,00 \cdot r^2 \cdot a$
0,00075	0,01%	$333,33 \cdot r^2 \cdot a$

Gleichzeitig erhält man eine Abschätzung für die Relation von Berechnungsort (r), Berechnungszeitpunkt (t) und Näherungsfehler (ε). Es ist auch zu erkennen, dass die geohydraulische Zeitkonstante ($a = \frac{S}{T}$) maßgeblich die Abbruchgenauigkeit bestimmt. Damit erfolgt die Berechnung um so genauer, je mehr sich der Berechnungszeitpunkt dem stationären Zustand nähert. Für den instationären Übergangsbereich ist die Näherung von COOPER & JACOB nicht gut anwendbar und erzielt große Näherungsfehler.

Die rechentechnische Auswertung der Brunnenfunktion $W(\sigma)$ kann durch eine rekursive Auflösung der Summenformel wesentlich vereinfacht werden.

$$W(\sigma) = -\ln(C\sigma) + \sum_{n=1}^{a_n \leq \varepsilon} a_n \tag{8.23}$$

mit
$$a_n = a_{n-1} \frac{(-1) \sigma (n-1)}{n^2}$$

und
$$a_1 = \sigma$$

Damit ergibt sich:

- Es müssen nur so viele Glieder berechnet werden, wie für eine vorgegebene Genauigkeit (z. B. Änderung zwischen zwei Summengliedern) notwendig sind.
- Die Berechnung jedes Summengliedes erfordert nur eine Multiplikation.

8.1.2 Berücksichtigung spezieller Effekte

Die allgemeine Lösung der Brunnengleichung nach THEIS gilt nur für einen sehr idealisierten Grundwasserleiter. So wird er z. B. als homogen und isotrop angenommen. Weiterhin wird von einer unendlichen Ausdehnung ausgegangen. Die Lösung berücksichtigt auch nur einen Brunnen, der ab einer Zeit t_0 mit konstantem Wasserstrom fördert und als Singularität mit einem Radius von $r_{Br} = 0m$ im Koordinatenursprung angeordnet ist. Diese beispielsweise aufgeführten Idealisierungen werden in der Praxis bei realen Grundwasserleitern nicht angetroffen. Für einige praxisrelevante Bedingungen lassen sich jedoch auf der Basis der THEISSchen Lösung Ergebnisse erzielen, wenn entsprechende Zusatzberechnungen und Substitutionen durchgeführt werden.

Solche sind beispielsweise die Berücksichtigung von technischen Brunnenradien, Unvollkommenheiten der Brunnen und Randbedingungen, sowie von geschichteten Grundwasserleitern und Speisung aus benachbarten Schichten. Diese speziellen Effekte werden als zusätzliches Potential, welches auf- oder abgebaut wird, in der Brunnengleichung berücksichtigt.

8.1.2.1 Unvollkommener Brunnen

Unvollkommene Randbedingungen, insbesondere Brunnen, entstehen, wenn die Randbedingungen bzw. Brunnen nicht über die gesamte Mächtigkeit des Grundwasserleiters wirken. Bei Brunnen tritt dies dann auf, wenn die wirkende Filterrohrlänge kleiner als die Mächtigkeit des durchströmten Grundwasserleiters ist. Bei den unvollkommenen Brunnen wird davon ausgegangen, dass ein Potentialverlust dadurch entsteht, weil die durchströmte Mächtigkeit in der Nähe des unvollkommenen Brunnens kleiner als die des eigentlichen Grundwasserleiters ist. Außerdem kann man davon ausgehen, dass der mittlere Fließweg durch das Umlenken der Strombahnen länger als die geometrische Entfernung r wird. Abbildung 8.3 zeigt die Verhältnisse bei unterschiedlichem Filtereinbau.

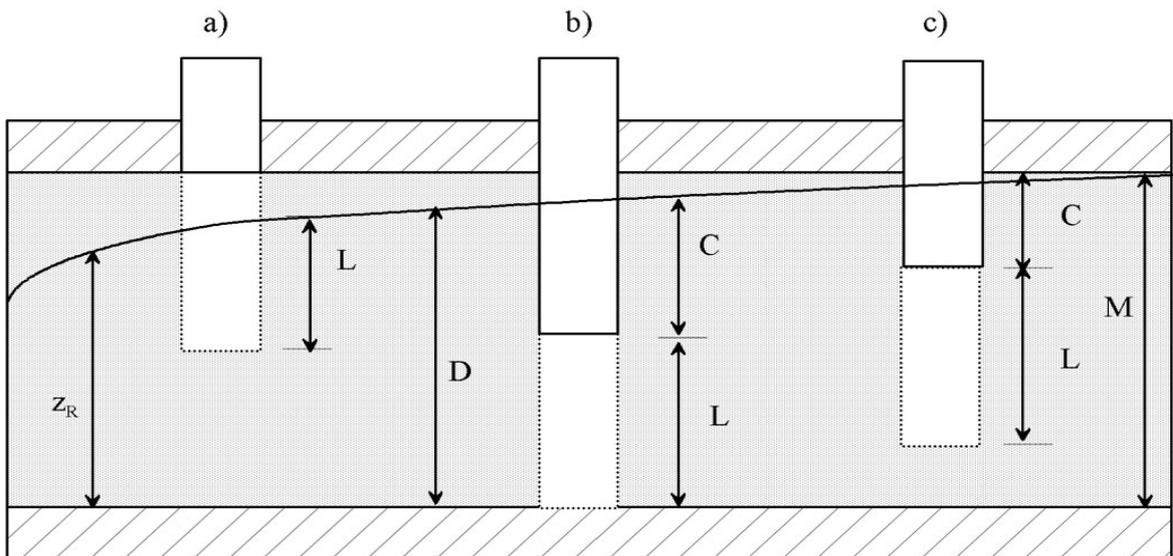


Abbildung 8.3: Unvollkommene Brunnen mit Filter im
 a) oberen, b) unteren, c) mittleren Teil des GWL

Dabei bedeuten:

- C Länge des Vollrohres
- D durchströmte Mächtigkeit
- L Länge des Filterrohres innerhalb der durchströmten Mächtigkeit
- M Mächtigkeit des Grundwasserleiters
- z_R Lage der freien Grundwasseroberfläche
- φ_V Filterverluste

Man kann den Potentialverlust wie folgt beschreiben:

$$Z(r, t) = \frac{\dot{V}}{4\pi k} (W(\sigma) + \varphi_V) \quad (8.24)$$

$$\varphi_V = 2 \left[\frac{D}{L} \ln \frac{\alpha L}{r_0} - \ln \frac{\alpha D}{r_0} \right] - \sqrt{1 - \frac{L}{D}} \quad (8.25)$$

$$\alpha = 0,735 (1 + (H - 1)^4) \quad (8.26)$$

$$H = \frac{2C}{D - L} \quad (8.27)$$

Daran erkennt man, dass durch die Unvollkommenheit eine stärkere Absenkung auftritt, als dies bei einem vollkommen ausgebauten Brunnen der Fall wäre.

8.1.2.2 Mehrbrunnenanlagen

Für praktische Aufgaben ist der Betrieb von Mehrbrunnenanlagen von Bedeutung. Nur in den seltensten Fällen wird z. B. eine Baugrubenentwässerung oder eine Grundwasserwerksanlage mit nur einem Brunnen betrieben. Die Berechnung solcher Mehrbrunnenanlagen ist auf der Basis des Superpositionsprinzips möglich. Dabei werden die Lösungen, d.h. die Teilabsenkungspotentiale, die für die einzelnen Brunnen gelten, superpositioniert, d.h. summarisch überlagert (siehe Abbildungen 8.4 und 8.5). Das Prinzip der Superposition darf nur auf lineare Systeme angewandt werden. Bezogen auf die Lösung von THEIS bedeutet dies, dass die Superposition nur in der Potentialschreibweise benutzt werden darf. Erst wenn das superpositionierte Potential gebildet ist, kann die Rücktransformation auf die physikalischen Größen Absenkung oder Wasserstand durchgeführt werden. Da der Zusammenhang zwischen Potential und Absenkung für den gespannten Grundwasserleiter linear ist, könnte die Superposition in diesem Fall ausnahmsweise auch auf die Absenkung angewendet werden.

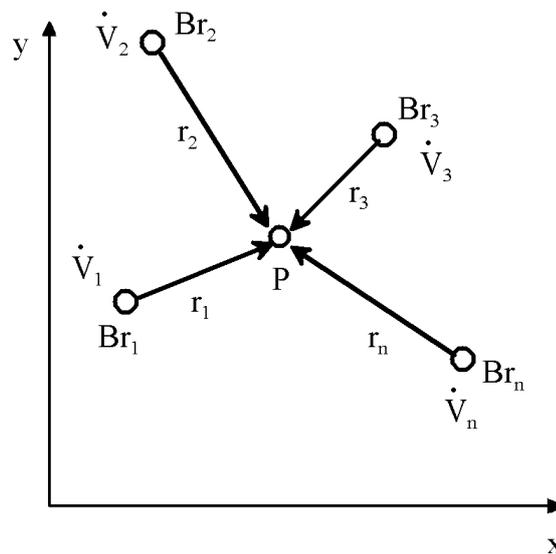


Abbildung 8.4: Mehrbrunnenanlage

Grundsätzlich gilt:

$$\begin{aligned}
 Z_{Ges.x,y,t} &= \sum_{i=1}^n Z(r_i, t) \\
 &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\dot{V}_i}{4\pi k} W_i(\sigma_i) \right) \\
 &= \frac{1}{4\pi k} \sum_{i=1}^n \left(\dot{V}_i \cdot W_i \left(\frac{r_i^2 a}{4t} \right) \right)
 \end{aligned}$$

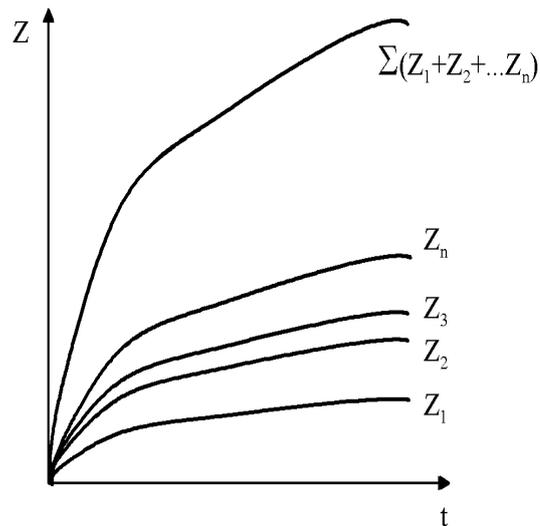


Abbildung 8.5: Superposition der Absenkungspotentiale

Dabei sind:

- r_i Entfernungen zwischen den einzelnen Brunnen und dem Berechnungspunkt $P_{x,y}$
- a geohydraulische Zeitkonstante für das gesamte Gebiet $a = const.$

Man berechnet also zuerst die einzelnen Absenkungsanteile $Z(r_i, t)$ infolge der Brunnenwirkungen \dot{V}_i und summiert diese dann. Danach erfolgt die Umrechnung in die Gesamtabsenkung entsprechend der Grundwasserverhältnisse (gespannt oder ungespannt) entsprechend Gleichungen 8.16 und 8.18 (siehe Seite 209).

8.1.2.3 Veränderliche Förderganglinie des Brunnens

Die THEIS-Lösung geht von der inneren Randbedingung aus, dass der Volumenstrom ab einem Zeitpunkt $t = 0$ auf den Grundwasserleiter wirkt. Auch hier werden in der Praxis oft Fälle anzutreffen sein, bei denen diese Voraussetzung nicht erfüllt ist. Aus technisch/technologischen Gesichtspunkten ist oft eine Variation der Pumpenleistung erforderlich. Vor allem spielen diese Fragen eine wichtige Rolle, wenn der Grundwasserstand nach dem Abschalten der Pumpe in der so genannten Wiederanstiegsphase untersucht werden soll.

Auch hier kann mittels des Superpositionsprinzips eine Lösung auf der Basis der THEIS-Formel erzielt werden. Der Grundgedanke besteht darin, dass die zeitabhängige Förderleistung als Summation zeitlich versetzter Sprungfunktionen angesetzt wird. Bildlich kann man sich dies als eine Anzahl von n fiktiven Pumpen vorstellen, die in ein und dem selben Brunnen stecken und nacheinander, entsprechend den Förderstufen, angeschaltet werden (siehe Abbildungen 8.6 und 8.7).

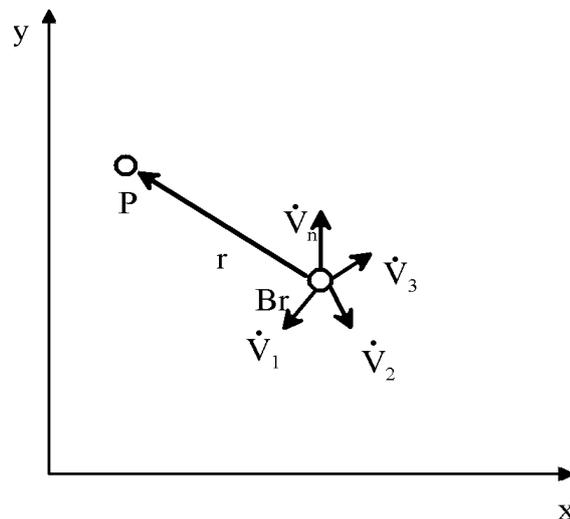


Abbildung 8.6: Virtuelle Förderströme bei zeitabhängiger Förderganglinie

Anschließend untersucht man, welchen Anteil die einzelnen fiktiven Teilförderleistungen am Gesamtabsenkungspotential haben und addiert diese entsprechend (siehe Abbildung 8.8):

$$\begin{aligned}
 Z_{Ges,r,t} &= \sum_{i=1}^m Z(r, t_i) \\
 &= \sum_{i=1}^m \left(\frac{\dot{V}_i}{4\pi k} W_i(\sigma_i) \right) \\
 &= \frac{1}{4\pi k} \sum_{i=1}^m \dot{V}_i \cdot W_i \left(\frac{r^2 a}{4t_i} \right)
 \end{aligned} \tag{8.28}$$

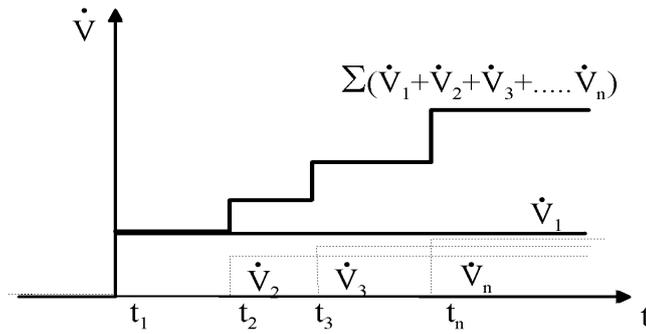


Abbildung 8.7: Zusammengesetzte Förderganglinie

Führt man die Realzeit t und die Startzeiten τ_i der Teilförderleistungen ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} Z_{Ges,r,t} &= \sum_{i=1}^m Z(r, t - \tau_i) \\ &= \frac{1}{4\pi k} \sum_{i=1}^m \dot{V}_i \cdot W_i \left(\frac{r^2 a}{4(t - \tau_i)} \right) \end{aligned} \quad (8.29)$$

Die Teilförderleistungen \dot{V}_i kann man auch aus der realen Förderleistung zum Zeitpunkt t aus $\dot{V}_{real,i,t}$ berechnen, indem man von dieser jene der vorhergehenden Zeitstufen subtrahiert:

$$\dot{V}_{i,t} = \dot{V}_{real,i,t} - \dot{V}_{real,i-1,t-\tau_i} \quad (8.30)$$

$$Z_{Ges,r,t} = \frac{1}{4\pi k} \sum_{i=1}^m \left(\dot{V}_{real,i,t} - \dot{V}_{real,i-1,t-\tau_i} \right) W_i \left(\frac{r^2 a}{4(t - \tau_i)} \right) \quad (8.31)$$

Betrachtet man diese Formel, so ist zu erkennen, dass damit auch die Wiederanstiegsphase berechnet werden kann. In diesem Fall wird die letzte Teilfördermenge negativ (siehe Abbildung 8.9). Die Vorzeichenumkehr bedeutet, dass dieser Teilstrom keine Exfiltration ist, sondern als Infiltration behandelt wird und damit nicht zu einer Absenkung, sondern zu einer Erhöhung des Grundwasserspiegels gegenüber dem vorhergehenden Zeitpunkt führt.

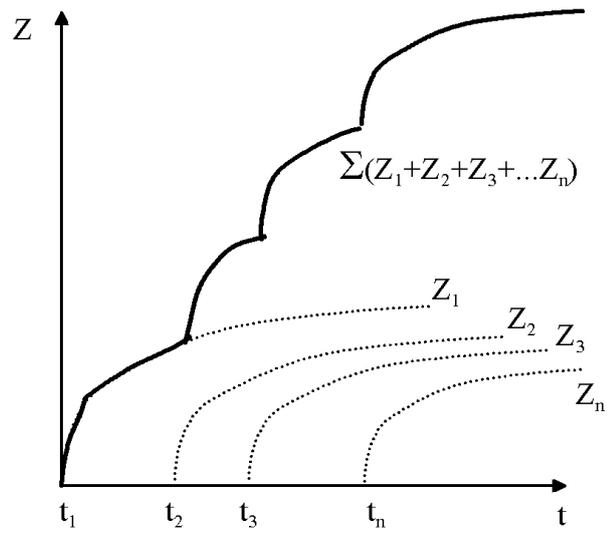


Abbildung 8.8: Absenkungspotential

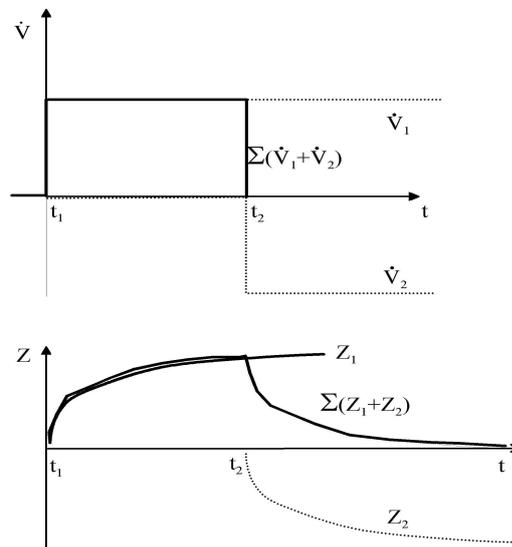


Abbildung 8.9: Grundwasserwiederanstieg

Die beschriebene Methode zur Berechnung von Absenkungspotentialen bei zeitlich veränderlichen Förderganglinien kann auch angewendet werden, wenn die Förderganglinien nicht als Stufenfunktionen, sondern als stetige, konkave oder konvexe Funktionen vorliegen. In diesem Fall wird die Funktion durch eine Stufenfunktion approximiert (siehe Abbildung 8.10), wobei Stufenhöhe und -breite nicht konstant sein müssen. Man muss also nicht von einer äquidistanten Quantisierung ausgehen (siehe Abschnitt 11.3.5 Approximation von Signalen, Seite 314). Für den Bearbeiter ist hier die Entscheidung zwischen notwendiger Genauigkeit und Aufwand von Bedeutung.

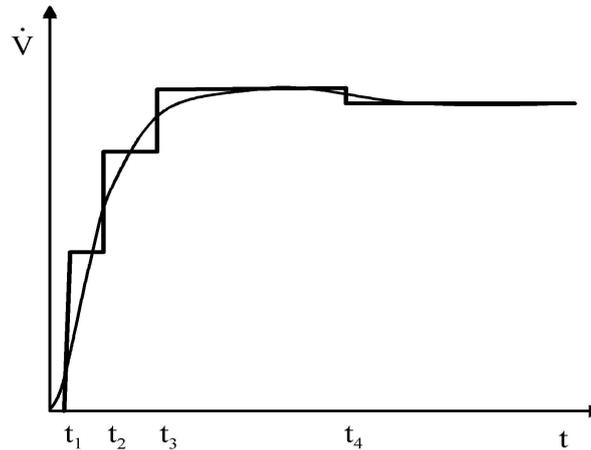


Abbildung 8.10: Approximation einer stetigen Förderganglinie

Die Methoden zur Berechnung von Mehrbrunnenanlagen und veränderlichen Förderganglinien lassen sich auch zusammenfassen, so dass man eine Lösung für die Superposition beider Effekte bekommt:

$$Z_{Ges,r,t} = \frac{1}{4\pi k} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m \dot{V}_{j,i} W_{j,i} \left(\frac{r_i^2 a}{4(t - \tau_{j,i})} \right) \right) \quad (8.32)$$

Dabei sind die Absenkungspotentiale zuerst über alle Förderstufen eines Brunnens und anschließend über die aller Brunnen zu superpositionieren.

8.1.2.4 Begrenzung

- **Randbedingungen 1. und 2. Art**

Die Lösung der Brunnengleichung nach THEIS ist für den unendlich ausgedehnten Grundwasserleiter abgeleitet. Für spezielle Begrenzungen des Grundwasserleiters, die Randbedingungen, kann man bei geometrisch einfachen Formen mittels des Superpositionsprinzips die THEISSche-Brunnengleichung so modifizieren, dass man eine Lösung findet.

Grundgedanke ist es, einen virtuellen Brunnen so anzuordnen, dass dessen virtuelles Absenkungspotential in der Überlagerung mit dem des realen Brunnens genau die gleiche hydraulische Wirkung erzielt wie eine Randbedingung 1. oder 2. Art, d.h. eine konstante Potentialänderung oder einen konstanten Zufluss an der Strömungsbegrenzung. Dies sind Spezialfälle, die in der Praxis sehr oft vorkommen.

Diese Methode der Anordnung virtueller Quellen oder Senken in einem Potentialfeld zur Modellbildung von speziellen Randbedingungen wird in der allgemeinen Potentialtheorie, die für viele verschiedene Potentialfelder gilt (z. B. Wärmeleitung, elektrostatische und magnetische Felder), als **Spiegelungsmethode** bezeichnet. Die Realisierung der verschiedenen Randbedingungsarten erfolgt durch unterschiedlich zu berücksichtigende Volumenstromrichtungen (Ex- bzw. Infiltration).

Bei einer Begrenzung durch eine **Randbedingung 1. Art** wird versucht, mittels eines virtuellen Infiltrationsbrunnens mit gleichem senkrechten Abstand l zwischen realem Brunnen und Randbedingung das Absenkungspotential an der Randbedingung auf dem Wert Null ($Z_{Rand} = 0$) zu halten (siehe Abbildungen 8.11 und 8.12).

Bei einer **Randbedingung 2. Art** wird definitionsgemäß der Volumenstrom an der Randbedingung konstant, hier auf dem Wert Null ($dZ_{Rand}/dr = 0$), gehalten. Modellieren kann man dies mit einem virtuellen Förderbrunnen, der achsensymmetrisch angeordnet und mit der gleichen Förderleistung beaufschlagt ist (siehe Abbildungen 8.13 und 8.14).

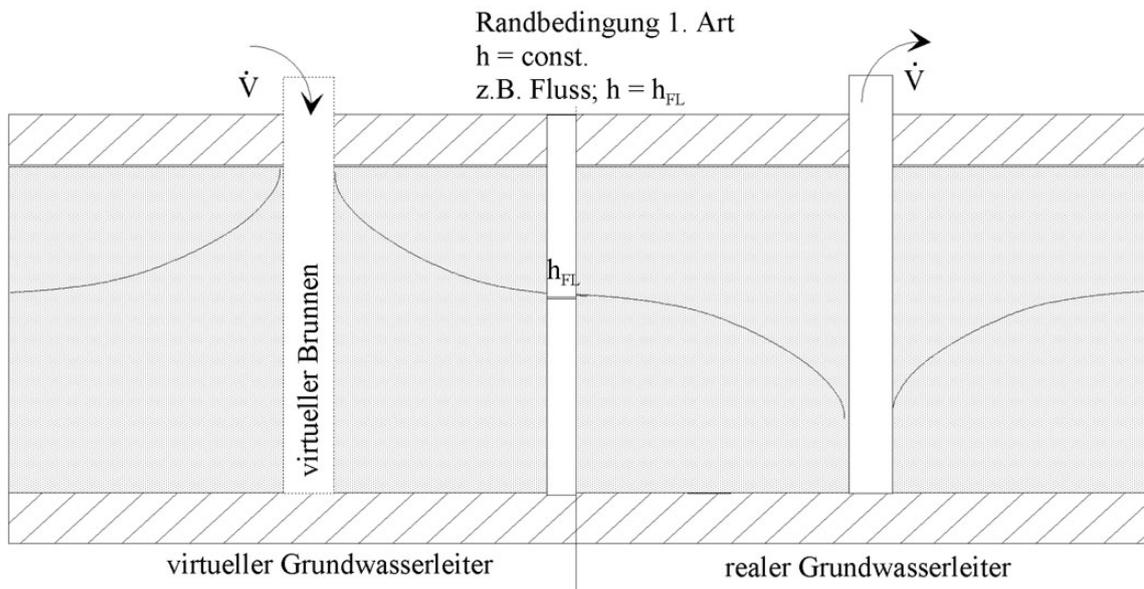


Abbildung 8.11: Modellierung einer Randbedingung 1. Art durch einen virtuellen Brunnen

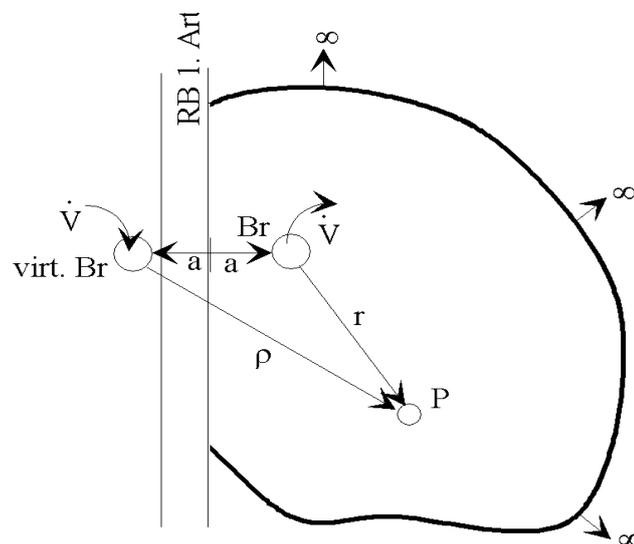


Abbildung 8.12: Berücksichtigung einer einseitigen Randbedingung 1. Art

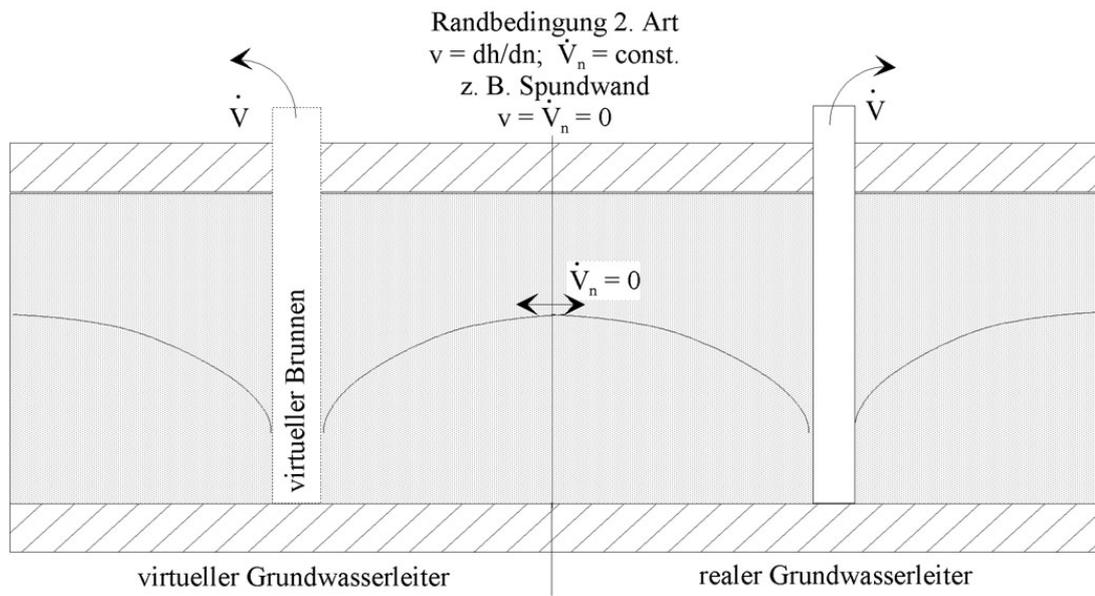


Abbildung 8.13: Modellierung einer Randbedingung 2. Art durch einen virtuellen Brunnen

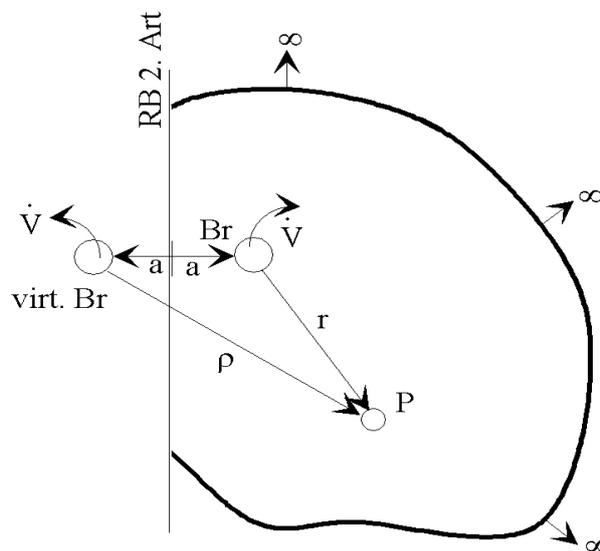


Abbildung 8.14: Berücksichtigung einer einseitigen Randbedingung 2. Art

Bei einer einseitigen, geradlinigen Begrenzung des Grundwasserleiters und einem Förderbrunnen am Punkt $Br_{(x,y)}$ ergibt sich das Absenkungspotential Z am Berechnungspunkt $P_{(x,y)}$ zu:

$$Z(r, t) = \frac{\dot{V}}{4\pi k} (W_{\text{real}}(r, t) + (-1)^m W_{\text{virt}}(\rho, t)) \quad (8.33)$$

$$m = \begin{cases} 1 & \text{Randbedingung 1. Art} \\ 2 & \text{Randbedingung 2. Art} \end{cases}$$

und die Entfernung vom Brunnen zum Berechnungspunkt:

$$r^2 = (x_{Br} - x_P)^2 + (y_{Br} - y_P)^2 \quad (8.34)$$

bzw. die Entfernung vom virtuellen Brunnen zum Berechnungspunkt:

$$\rho^2 = (x_{Br \text{ virt}} - x_P)^2 + (y_{Br \text{ virt}} - y_P)^2 \quad (8.35)$$

Bei Mehrbrunnenanordnungen und/oder variablen Förderganglinien muss die Superpositionierung entsprechend weitergeführt werden. Die Transformation des Absenkungspotentials in reale Absenkungen wird entsprechend den Rechenregeln für gespannte bzw. ungespannte Grundwasserleiter entsprechend Gleichungen 8.16 und 8.18 (Seite 209) durchgeführt (siehe Abschnitt 7.2 Potentialdarstellung, Seite 195).

Bei Randbedingungen 1. Art kann aus obiger Gleichung unter Beachtung der Näherung von COOPER & JACOB eine Methode zur Berechnung des stationären Endzustandes abgeleitet werden:

$$Z_{(r,t)} = \frac{\dot{V}}{4\pi k} (W_{\text{real}}(r, t) - W_{\text{virtuell}}(\rho, t))$$

$$Z_{\text{stat}}(r, t \rightarrow \infty) = \frac{\dot{V}}{4\pi k} (-\ln(C\sigma_r) + \ln(C\sigma_\rho))$$

$$Z_{\text{stat}}(r) = \frac{\dot{V}}{4\pi k} \left(\ln \frac{\sigma_\rho}{\sigma_r} \right)$$

$$\sigma = \frac{S \cdot r^2}{4 \cdot T \cdot t} \quad \text{bzw.} \quad \sigma = \frac{S \cdot \rho^2}{4 \cdot T \cdot t} \quad (8.36)$$

$$Z_{\text{stat}}(r) = \frac{\dot{V}}{2\pi k} \ln \frac{\rho}{r} \quad (8.37)$$

Daran erkennt man, dass der stationäre Endzustand des Absenkungspotentials bei einem einseitig mit einer Randbedingung 1. Art begrenzten Grundwasserleiter proportional vom Verhältnis der Förderleistung zur Durchlässigkeit und proportional vom Logarithmus des Entfernungsverhältnisses abhängt.

Wendet man die gleichen Überlegungen für den stationären Fall eines einseitig mit einer Randbedingung 2. Art begrenzten Grundwasserleiters an, so erhält man, dass das Absenkungspotential gegen unendlich geht. Technisch ist dies nicht möglich. Im praktischen Betrieb bedeutet dies, der durch eine Spundwand begrenzte Grundwasserleiter wird in unendlicher Zeit vollständig entwässert.

- **Randbedingungen 3. Art**

Reale Randbedingungen sind dadurch gekennzeichnet, dass sie in ihrer Wirkung nicht den Definitionen und Voraussetzungen entsprechen, die zur Herleitung des mathematischen Modells gemacht worden. Dies sind hier die Unvollkommenheit der Randbedingung 1. Art und zusätzliche Strömungswiderstände zwischen der Randbedingung 1. Art und dem Grundwasserleiter. Derartige Strömungswiderstände sind z. B. Kolmationsschichten von Oberflächengewässern. Beide Effekte verursachen einen zusätzlichen Potentialabfall zwischen der Randbedingung und des am Punkt P entstehenden Absenkungspotentials. Diese Wirkung entspricht somit der einer Randbedingung 3. Art (siehe Abschnitt 7.3.2 Randbedingungen, Seite 200). Der zusätzliche Potentialabfall ist dabei abhängig von der Strömungsmenge, die zwischen der Randbedingung 1. Art und dem Grundwasserleiter fließt. Im Zusammen-

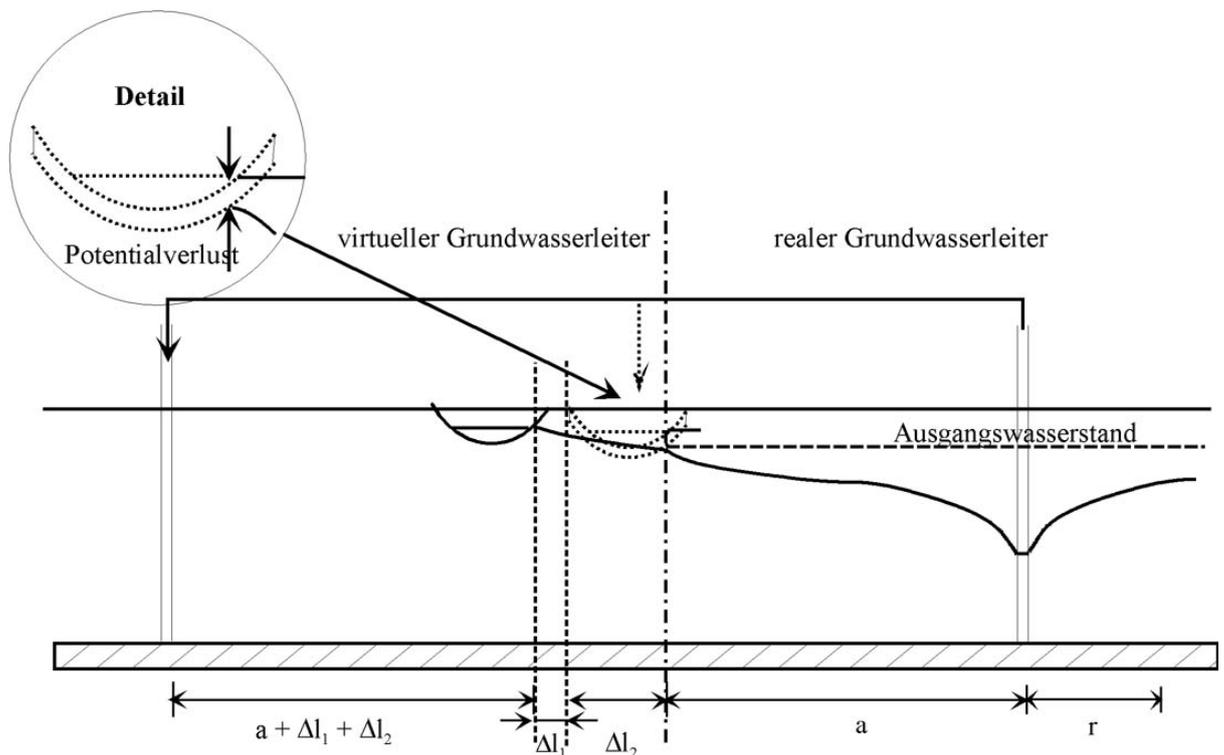


Abbildung 8.15: Berücksichtigung einer einseitigen Randbedingung 3. Art

hang mit der analytischen Lösung der Brunnengleichung werden solche Randbedingungen

3. Art modellmäßig dadurch gelöst, dass man den äquivalenten Strömungswiderstand eines Stücks Grundwasserleiter sucht, der den gleichen Potentialabfall bei idealen Randbedingungen 1. Art verursachen würde. Im Modell wird dies insofern berücksichtigt, dass man die reale Randbedingung um eine virtuelle Zusatzlänge ΔL vom Brunnen wegschiebt (siehe Abbildung 8.15). Damit verringert sich der Einfluss der Randbedingung auf das Absenkungspotential.

Man unterscheidet zwei Arten von Zusatzlängen entsprechend der Entstehung durch Unvollkommenheit oder durch kolmatierte Sohlschichten.

Beim ersten Fall der Unvollkommenheit, d.h. dass sich die Randbedingung nicht über die gesamte durchströmte Mächtigkeit erstreckt, wird die Zusatzlänge aus folgendem Diagramm bestimmt (siehe Abbildung 8.16).

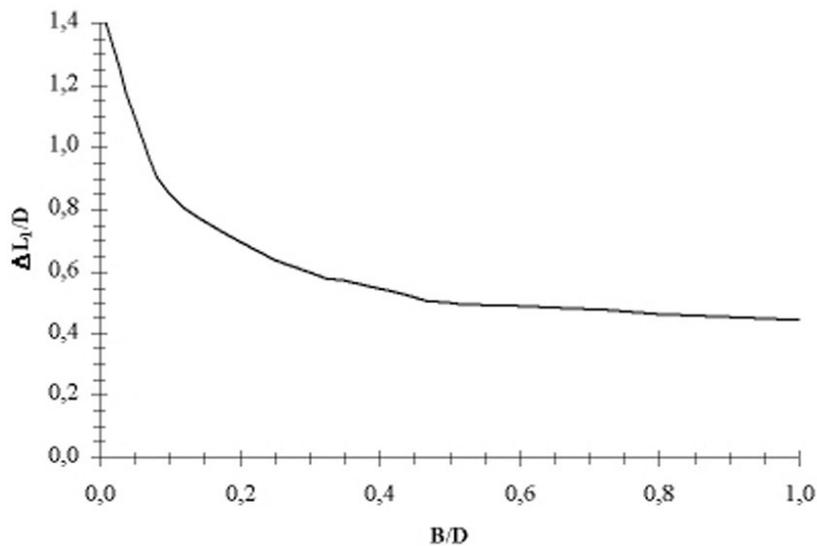


Abbildung 8.16: Abhängigkeit der Zusatzlänge von der normierten Flussbreite

Bei Seen als Randbedingungen 3. Art kann immer davon ausgegangen werden, dass die Zusatzlänge

$$\Delta L_1 = 0,43 \cdot D \quad (8.38)$$

beträgt.

Bei den kolmatierten Sohlschichten kann die Länge des äquivalenter Grundwasserleiters, der denselben Potentialabfall verursacht wie die Kolmationsschicht, derart berechnet werden, dass die hydraulischen Widerstände gleichgesetzt werden:

$$R_{hydrGWL} = \frac{1}{k} \cdot \frac{\Delta L_2}{D \cdot b} \quad (8.39)$$

$$R_{hydrKOL} = \frac{1}{k'} \cdot \frac{M'}{\Delta L_2 \cdot b} \quad (8.40)$$

Nach Gleichsetzung dieser beiden hydraulischen Widerstände errechnet sich die Zusatzlänge zu:

$$\Delta L_2 = \sqrt{\frac{k \cdot D \cdot M'}{k'}} \quad (8.41)$$

mit:

D Durchströmte Mächtigkeit des Grundwasserleiters

k' Durchlässigkeitsbeiwert der kolmatierten Schicht

k Durchlässigkeitsbeiwert des Grundwasserleiters

M' Mächtigkeit der kolmatierten Schicht

8.1.2.5 Mehrseitige Berandung

Neben den in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen einseitigen Berandungen, die geradlinig durch das zu untersuchende Gebiet gehen und entsprechend der Voraussetzungen zur Lösung der THEISSchen Brunnengleichung bis ins Unendliche reichen, sind viele Praxisfälle dadurch gekennzeichnet, dass die Randbedingungen keinen geradlinigen Verlauf haben und/oder mehrere Randbedingungen gleichzeitig auftreten. In diesen Fällen handelt es sich um mehrseitig begrenzte Grundwasserleitersysteme. Diese nichtgeradlinigen Randbedingungsverläufe, wie z. B. auch der Zusammenfluss mehrerer Vorfluter, werden durch stückweise geradlinige Randbedingungen angenähert. Dabei ist zu beachten, dass die geradlinigen Randbedingungen mit einer unendlichen Länge zu berücksichtigen sind.

Auf der Basis der Superposition lässt sich die Wirkung der Randbedingung als additive Überlagerung der verschiedenen geradlinigen Verläufe berechnen. Die Methode der Spiegelung führt hier wieder zum Erfolg (siehe Abbildung 8.17). Berücksichtigt werden muss aber, dass die virtuell entstehenden Brunnen (Spiegelbrunnen) an den jeweils weiteren geradlinigen Berandungen auch zu spiegeln sind und zu weiteren virtuellen Brunnen führen. Dabei ist die Kombination verschiedenartiger Randbedingungen (1. und 2. Art) möglich.

Prinzipiell lassen sich mathematisch auf der Basis der analytischen Geometrie beliebige Winkelanordnungen zwischen den mehrseitigen Berandungen berücksichtigen. Praktisch sind dem aber Grenzen gesetzt und nur mit komfortablen Computerprogrammen realisiert (z.B. CAE-Grundwasser/THEIS). Für einfachere Anwendungen begnügt man sich mit der Einschränkung auf zueinander rechtwinklig oder parallel stehende Berandungen. Bei den rechtwinkligen bzw. parallelen Berandungen ist die Anzahl der mehrfachen Spiegelungen abzuschätzen, d. h. wie groß der Einfluss des n -ten Spiegelungsbrunnen ist. Da das Absenkungspotential proportional zu der $W(\sigma)$ -Funktion ist und $W(\sigma)$ sehr stark mit größer werdendem σ abnimmt spielt der Abstand zwischen dem n -ten Spiegelungsbrunnen und dem Brechungspunkt eine dominierende Rolle. Es sei darauf hingewiesen, dass σ quadratisch mit

dem Abstand r wächst.

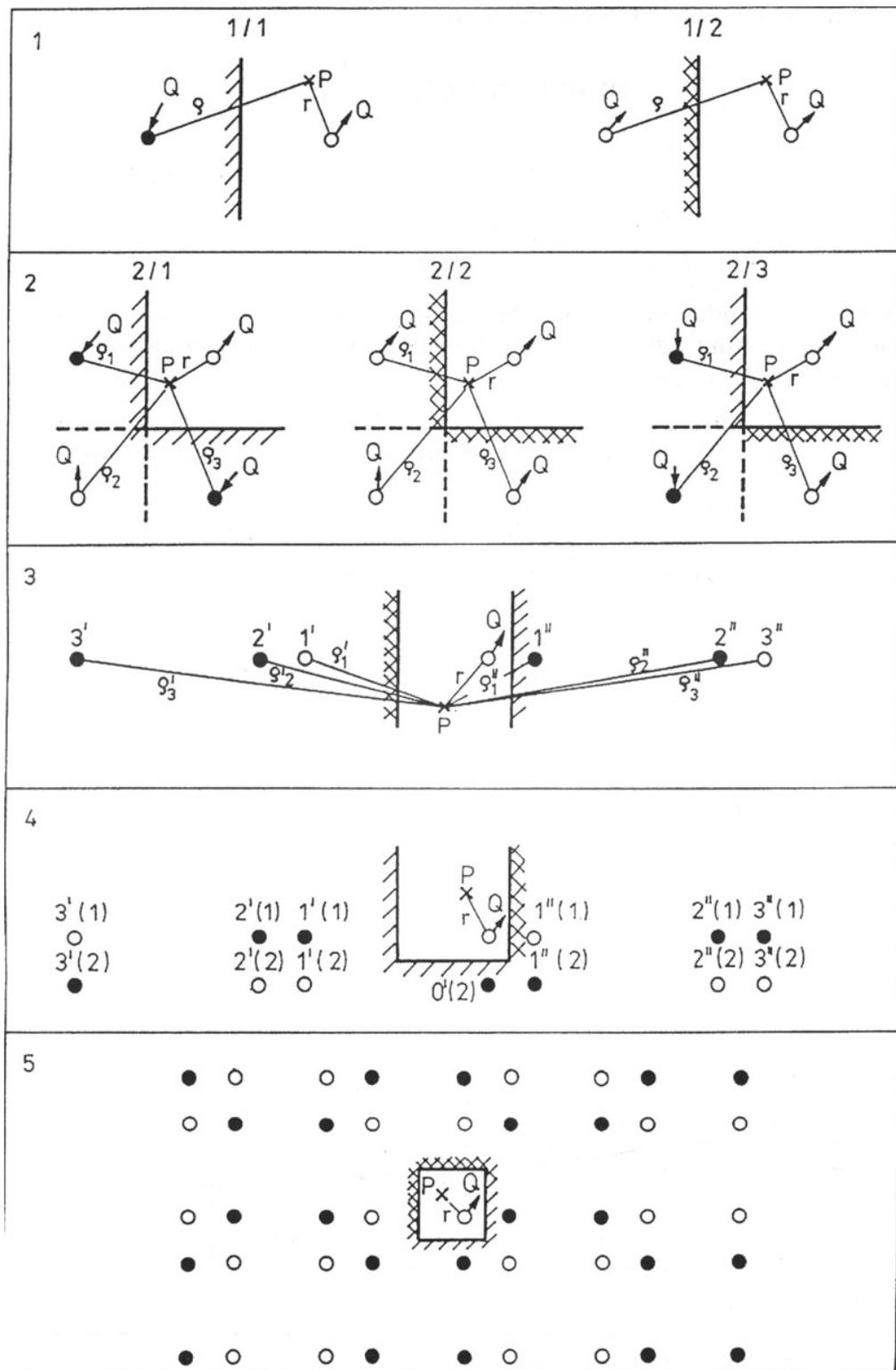


Abbildung 8.17: Mehrfache Randbedingungen mit dazugehörigen virtuellen Brunnen

8.1.3 Speisung aus benachbarten Schichten

In den vorangegangenen Abschnitten wurde ein homogener Grundwasserleiter vorausgesetzt. Dies ist aber in den seltensten Fällen gerechtfertigt. Die Frage, ob ein vertikales Bodenprofil als homogen, geschichtet oder als Grundwasserstauer anzusehen ist, hängt von der Variation der Parameter des Grundwasserleiters, dem Durchlässigkeitskoeffizienten k und dem Speicherkoeffizienten S (n_0 oder $S_0 \cdot D$) ab. In der Praxis haben sich folgende Abgrenzungen durchgesetzt. Betrachtet man zwei aneinander grenzende Bodenverhältnisse mit den Durchlässigkeitskoeffizienten k_1 und k_2 , so kann unter Beachtung realer Genauigkeitsanforderungen folgende Einteilung vorgenommen werden:

$$\frac{k_1}{k_2} = \left\{ \begin{array}{ll} \leq 20 & \text{homogener} \\ \geq 50 \text{ und } \leq 100 & \text{geschichteter} \\ \geq 150 & \text{vertikal begrenzter} \end{array} \right\} \text{ GWL}$$

Der erste Fall, der homogene Grundwasserleiter, führt zur THEIS-Lösung der Brunnen-gleichung, der dritte, der vertikal begrenzte, zu den Grundwasserstockwerken. Im zweiten Fall, dem geschichteten Grundwasserleiter, kommt es zu einer Speisung der besser durch-lässigen aus der schlechter leitenden Schicht auf Grund der größeren Kapillarkräfte in der Schicht mit dem größeren Durchlässigkeitskoeffizienten (Löschpapiereffekt). Diese Speisung wurde in der allgemeinen Brunnengleichung durch den Speisungsfaktor B berücksichtigt. Der geschichtete Grundwasserleiter wird auch als **Leakage Aquifer** und der Speisungsfaktor B als **Leakagefaktor** bezeichnet. Alle drei Fälle sind ineinander überführbar und stellen nur vereinfachte Berechnungsmöglichkeiten dar. Weiterhin sind die Grenzen zwischen den Berechnungsmöglichkeiten nicht starr, sondern gehen ineinander über.

Dieser Speisungsfaktor beschreibt den Anteil der Grundwasserneubildung, der sich durch eine Potentialänderung im Grundwasserleiter ergibt und aus der halbdurchlässigen Schicht stammt. Diese Speisungsraten werden dabei unter der Voraussetzung quasi-stationärer Po-tentialverhältnisse in der halbdurchlässigen Schicht berechnet.

Es können dabei drei Fälle der räumlichen Anordnung der gut und der halbdurchlässigen Schicht unterschieden werden: die oben liegende Speisung (aus dem Hangenden), die unten liegende Speisung (aus dem Liegenden) und die Kombination aus beiden. Der Grundwasser-leiter liegt also zwischen zwei halbdurchlässigen Schichten. Der Grundwasserspiegel wird in allen drei Fällen für die halbdurchlässige Schicht als Piezometerhöhe h aufgefasst.

Der Speisungsfaktor berechnet sich für die drei Formen wie folgt; dabei wird der Grundwas-serleiter durch die Mächtigkeit M und den Durchlässigkeitskoeffizienten k repräsentiert, die

halbdurchlässigen Schichten durch die Mächtigkeit M_n und die Durchlässigkeit k_n :

$$B = \begin{cases} \sqrt{\frac{k}{K_o}} M & \text{Speisung aus der oberen Schicht} \\ \sqrt{\frac{k}{K_u}} \frac{(h_n + h)}{2} & \text{Speisung aus der unteren Schicht} \\ \sqrt{\frac{k}{(K_o + K_u)}} M & \text{Speisung von oben und unten} \end{cases} \quad (8.42)$$

mit: $K_n = \frac{k_n}{M_n}$

Die allgemeine Brunnengleichung lautet in Polarkoordinatenschreibweise:

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial Z}{\partial r} = a \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{Z}{B^2} \quad (8.43)$$

Die Lösung des Absenkungspotentials hat HANTUSH mit:

$$Z(r, t) = \frac{\dot{V}}{4\pi k} W\left(\sigma, \frac{r}{B}\right) \quad \sigma = \frac{ar^2}{4t} \quad (8.44)$$

gefunden. Sie wird auch als Brunnenfunktion eines halbdurchlässigen Grundwasserleiters, als **Leaky aquifer**, bezeichnet. Auch hier muss noch die Rücktransformation aus der Potentialebene in die physikalischen Größen Wasserstand bzw. Absenkung erfolgen.

Die Funktion $W(\sigma, r/B)$ ist wieder die verkürzte Schreibweise des Exponentialintegrals Ei , hier mit einem erweiterten Argument. Die Herleitung dieser Lösung ist Gegenstand des Abschnittes 8.1.1 Allgemeins Lösung der Brunnengleichungen, Seite 204.

$$W\left(\sigma, \frac{r}{B}\right) = \int_{\sigma}^{\infty} e^{(-\sigma - \frac{r^2}{4B^2\sigma})} \frac{1}{\sigma} d\sigma \quad (8.45)$$

Diese Funktion liegt als grafische Darstellung vor (siehe Abbildung 8.18). Für verschiedene Bereiche der Parameter σ bzw. r/B ergeben sich Vereinfachungen, so dass nicht für alle praktischen Aufgaben diese komplizierte Formel angesetzt werden muss:

$$Z(r, t) = \begin{cases} \frac{\dot{V}}{4\pi k} W\left(\sigma, \frac{r}{B}\right) & \text{allgemeingültig} \\ \frac{\dot{V}}{4\pi k} W(\sigma) & \sigma > \frac{2r}{B} \\ \frac{\dot{V}}{2\pi k} K_o\left(\frac{r}{B}\right) & \text{große Zeiten} \\ \frac{\dot{V}}{2\pi k} \ln\left(1, 12\frac{B}{r}\right) & \text{große Zeiten und } r < 0,03B \end{cases} \quad (8.46)$$

Bei der Anwendung dieser Lösung für den Leaky aquifer muss beachtet werden, dass die Speisung als konstanter Wert angesetzt wird und damit stationäre Grundwasserströmungsverhältnisse in den weniger durchlässigen Grundwasserleitern, den halbdurchlässigen Schichten, vorausgesetzt werden. Das Speichervermögen dieser Schichten wird damit vernachlässigt.

Für das Liegende ist dieser Fehler nicht allzu groß, da dort auf alle Fälle gespannte Grundwasserverhältnisse herrschen, welche geringere Speichereffekte besitzen. Auch im Hangenden kann unter gespannten Verhältnissen nur ein kleiner Fehler auftreten. Befindet sich die freie Grundwasseroberfläche im Liegenden, dann können größere Fehler auftreten. Speziell bei der Auswertung von Pumpversuchen kann sich diese vereinfachte Annahme als nicht akzeptabel herausstellen. In diesem Fall muss der Speisungsfaktor empirisch erhöht werden.

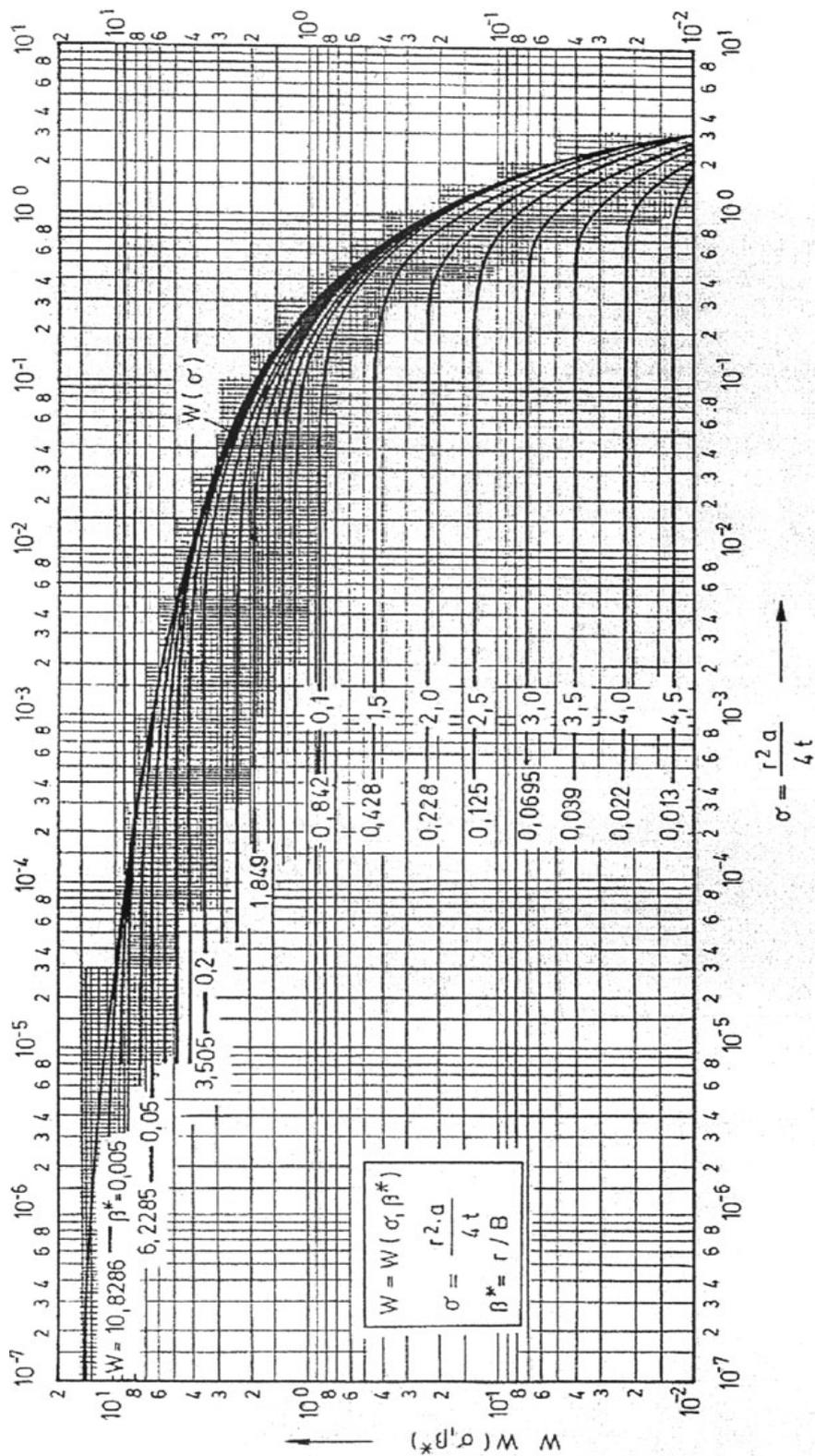


Abbildung 8.18: Funktion r/B in Abhängigkeit von σ

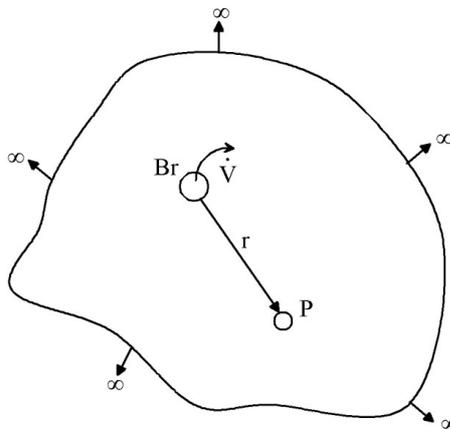
8.2 Aufgaben zur analytischen Berechnung

1. Berechnen Sie die Absenkung s für die Grundwasserbeobachtungsrohre (GWBR) in einer Entfernung r und zu den Zeiten t , die infolge einer Wasserförderung \dot{V} im Brunnen für nachfolgende unendlich ausgedehnten Grundwasserleiter (siehe Abbildung 1) auftritt und stellen Sie das Ergebnis grafisch dar.

$$k = 1 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s}; M = 10m; S = 0,001; a = \frac{S}{T} = 0,1 \frac{s}{m^2}; r_0 = 0,25m; \dot{V} = 0,015 \frac{m^3}{s}; h_n = 16m;$$

$$r = 5m; 10m; 20m; 50m$$

$$t = 1min; 2min; 5min; 10min; 20min; 30min; 45min; 60min; 90min; 120min$$



Unendlich ausgedehnter Grundwasserleiter mit Brunnen und GWBR

2. Berechnen Sie für den Grundwasserleiter aus Aufgabe 1 (siehe Abbildung 1) die Absenkung im GWBR ($r = 10m$) alle 10 Minuten bis maximal 100 Minuten, wenn der Volumenstrom des Förderbrunnens folgender Zeitstafelung unterliegt, und stellen Sie die Lösung grafisch dar.

Volumenstrom $\left[\frac{m^3}{s} \right]$	0,005	0,010	0,015	0,020	0,025	0,030	0,000
Förderbeginn [min]	0	10	20	30	40	50	60

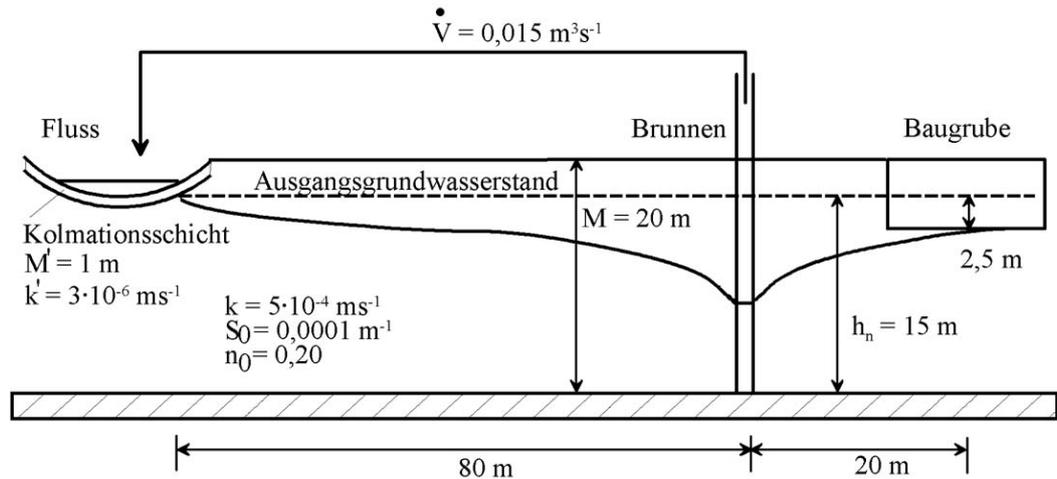
3. In einem Grundwasserleiter in der Nähe eines Flusses soll eine Baugrube abgesenkt werden. Die Mitte der Baugrube ist $100m$ vom Fluss entfernt, die Entwässerungsbrunnen $80m$. Es sind drei Brunnen parallel zum Fluss angeordnet, die jeweils $25m$ voneinander entfernt sind. Die Brunnen besitzen einen Durchmesser von $r_0 = 0,3m$ und fördern mit jeweils $\dot{V} = 0,015 \frac{m^3}{s}$.

Der Fluss besitzt eine Breite von $B = 20m$ und eine Kolmationsschicht von $k' = 3 \cdot 10^{-6} \frac{m}{s}$; $M' = 1m$. (siehe Abbildung 3)

Der Grundwasserleiter hat folgende Eigenschaften:

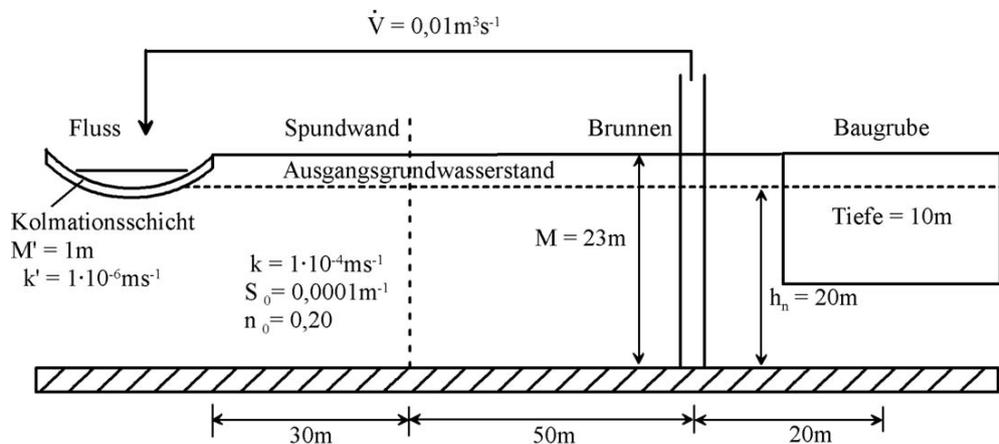
$$k = 5 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s}; n_0 = 0,20; h_n = 15m; M = 20m.$$

Wird nach 10 Tagen im Zentrum der Baugrube die Zielabsenkung von $2,5\text{ m}$ erreicht?



Grundwasserleiter mit unvollkommenem Fluss, Brunnen und Baugrube

4. Überprüfen Sie mittels der analytischen Lösung der Brunnenanströmung, ob der Mittelpunkt der Baugrube nach einer Zeit von 7 Tagen bei einer Förderleistung von $\dot{V} = 0,01 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$, $r_0 = 0,30\text{ m}$ mit einer Sicherheit von $0,5\text{ m}$ entwässert ist (siehe Abbildung 4).



Grundwasserleiter mit Brunnen und Baugrube

5. Bei einem Pumpversuch in einem unendlich ausgedehnten Grundwasserleiter wurden folgende Wasserstände in Abhängigkeit von der Entfernung zum Brunnen nach einer Pumpzeit von 120 min gemessen (siehe Abbildung 8.19). Berechnen Sie das Wasserdefizit (Volumen) des Absenkungstrichters, wenn der Grundwasserleiter folgende Kennwerte besitzt:
 $h_n = 16\text{ m}$, $M = 10\text{ m}$, $k = 0,001 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, $S_0 = 0,0001 \text{ m}^{-1}$, $n_0 = 0,20$.
6. Aus einem Brunnen, der an einem idealen Fluss ($x = 0$; $-\infty < y < +\infty$) liegt ($Br_{(100\text{ m}, 500\text{ m})}$) wird ein konstanter Volumenstrom von $25 \frac{\text{l}}{\text{s}}$ gefördert. Der Brunnen

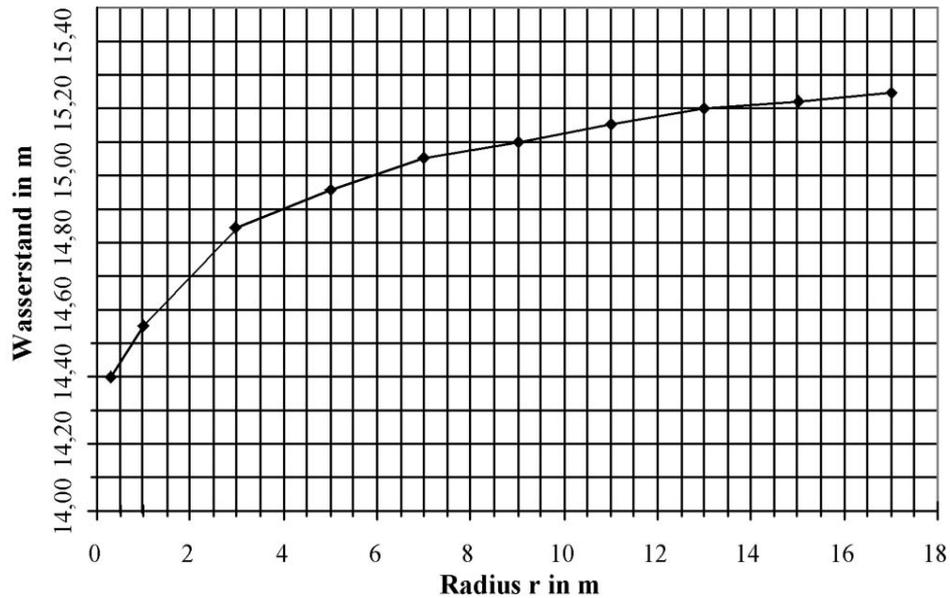


Abbildung 8.19: Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius

hat einen Radius von $r_0 = 0,35m$. Der Grundwasserleiter ist durch folgende Parameter gekennzeichnet:

$$h_n = 15m, M = 17m, k = 1 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s}, S_0 = 0,0002m^{-1}, n_0 = 0,25.$$

- Berechnen Sie den stationären Endzustand (der Anteil der zeitlichen Funktionalität soll kleiner als 0,001 sein) für den Punkt ($P_{(200m,600m)}$) und
- den Zeitpunkt, ab wann mit ihm zu rechnen ist.

Hinweis: Arbeiten Sie so lange wie möglich mit allgemeinen Formelzeichen.

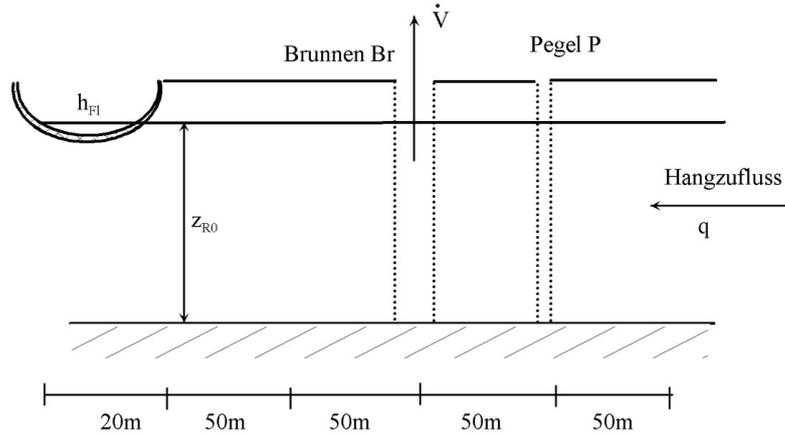
- Für ein Uferfiltratswasserwerk (siehe Abbildung 7) mit parallelem Strömungsregime ist ein Simulationssystem aufzubauen. Der Fluss soll dabei als idealisierte Randbedingung berücksichtigt werden.

Berechnen Sie für diese hydraulischen Verhältnisse den stationären Endzustand auf der Basis der analytischen Lösung der Brunnengleichung.

$$k = 1 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s}; h_{Fl} = 15m; z_{R0} = 15m; S = 0,25; \dot{V} = 50 \frac{l}{s}; q = 0,001 \frac{l}{s \cdot m^2} l; b = 100m; k_{Kolm} = 5 \cdot 10^{-5} \frac{m}{s}; M_{Kolm} = 1m;$$

Ermitteln Sie die Lösung

- mit idealisiertem Fluss und
- unter Berücksichtigung des realen Flusses (Kolmation und Unvollkommenheit).



Grundwasserleiter mit Fluss, Brunnen und Hangzufluss

8. In der Geohydraulik werden Pumpversuche zur Bestimmung der Grundwasserleiterparameter eingesetzt. Unter bestimmten Bedingungen kann die Absenkung nach der Formel von THEISS/JAKOB/COOPER

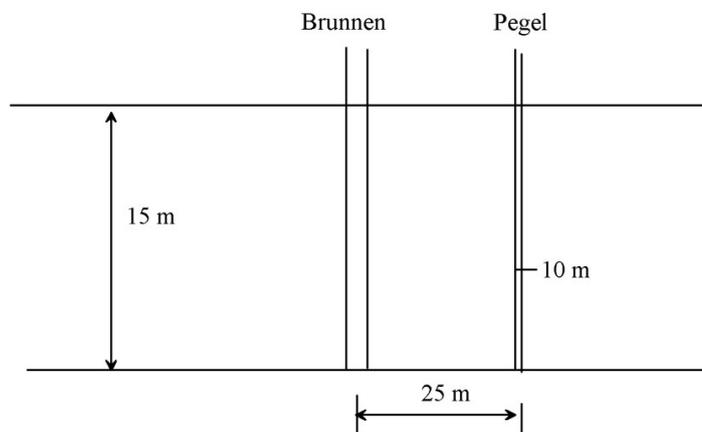
$$s = \frac{\dot{V}}{4 \cdot \pi T} \ln \left(\frac{2,25 \cdot T \cdot t}{r^2 \cdot S} \right)$$

ermittelt werden.

Leiten Sie unter Verwendung dieser Formel eine Gleichung zur Bestimmung des k -Wertes für einen Ortspunkt P , der sich in einer Entfernung r vom Brunnen befindet, ab. Die Bestimmung des k -Wertes soll dabei auf der Verwendung der Absenkungswerte s_1 zum Zeitpunkt t_1 und s_2 zum Zeitpunkt t_2 basieren. Das Verhältnis der Messzeiten $t_1 : t_2$ beträgt 1 : 10.

9. Berechnen Sie die Absenkung im GWBR (siehe Abbildung 9) für den Zeitpunkt $t = 10h$, wenn im Brunnen $5h$ lang ein Volumenstrom von $0,2 \frac{m^3}{s}$ gefördert wird und anschließend die Pumpen abgeschaltet werden.

$$h_{t=0} = 10m, M = 15m, k = 0,0001 \frac{m}{s}, S_0 = 0,0001 m^{-1}, n_0 = 0,25$$



Unendlich ausgedehnter Grundwasserleiter mit einem Förderbrunnen

10. Berechnen Sie für eine Grundwassergewinnungsanlage auf Uferfiltratbasis die Absenkung am Punkt P nach einem Jahr.

Förderrate je Brunnen: $25l \cdot s^{-1}$

$k = 2 \cdot 10^{-3}m \cdot s^{-1}$; $h_n = 15m$; $S = 0,25$

$k' = 1 \cdot 10^{-5}m \cdot s^{-1}$; $M' = 1m$; $B = 25m$; $r_1 = 250m$; $r_2 = 500m$; $r_P = 375m$

11. Aus zwei Brunnen an einem Fluss (ohne Kolmation und vollkommen) wird konstant je $25\text{ l} \cdot \text{s}^{-1}$ gefördert.

Berechnen Sie die Absenkung am Punkt P nach einem Monat und den stationären Endzustand.

Kordinaten:

Brunnen 1: $x = 750\text{ m}$ $y = 100\text{ m}$

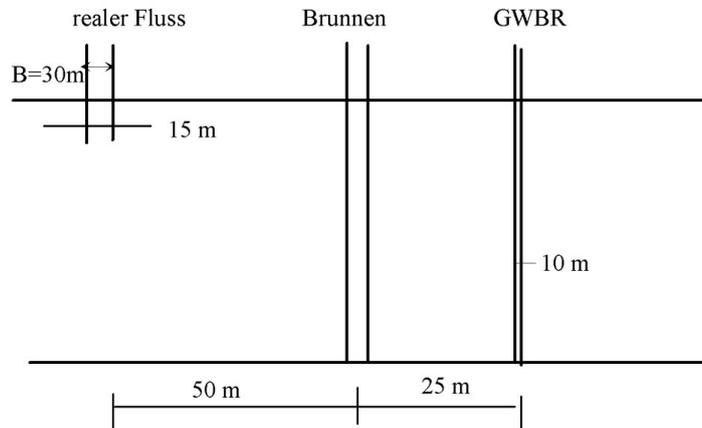
Brunnen 2: $x = 700\text{ m}$ $y = 400\text{ m}$

Punkt P: $x = 1000\text{ m}$ $y = 500\text{ m}$

$h_n = 15\text{ m}$, $n_0 = 0,25$, $k = 10^{-3}\text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

12. Berechnen Sie mittels der THEISSchen Brunnengleichung die Grundwasserstandsänderung nach 10 Tagen für folgende schematische Grundwasseranreicherungsanlage (siehe Abbildung 12).

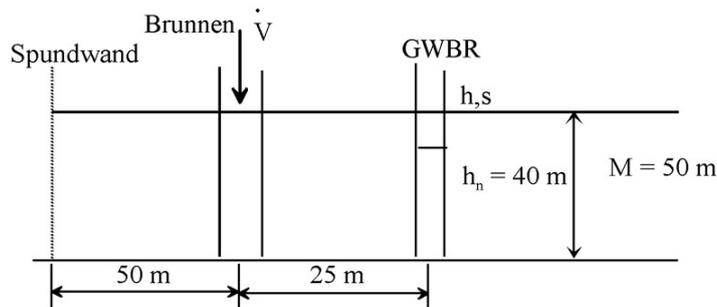
Gegeben: $\dot{V} = 0,001\text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, $S_0 = 0,001\text{ m}^{-1}$, $n_0 = 0,25$, $k = 0,001\text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$



Realer Fluss mit Entnahmebrunnen (Grundwasseranreicherungsanlage)

13. Berechnen Sie mittels der THEISSchen Brunnengleichung die Grundwasserstandsänderung nach 10 Tagen für folgende schematische Grundwasseranreicherungsanlage (siehe Abbildung 13).

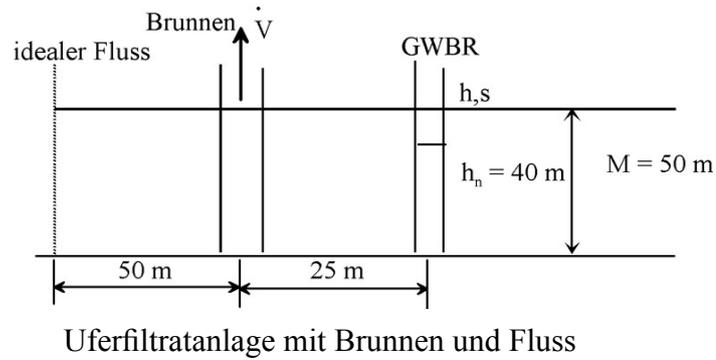
Gegeben: $\dot{V} = 0,001\text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, $S_0 = 0,001\text{ m}^{-1}$, $n_0 = 0,25$, $k = 0,001\text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$



Grundwasseranreicherungsanlage mit Brunnen und Spundwand

14. Berechnen Sie die Absenkung am Pegel für den Zeitpunkt $t = 15h$, wenn im Brunnen $10h$ lang ein Volumenstrom von $\dot{V} = 0,1m^3s^{-1}$ gefördert wird und anschließend die Pumpe abgeschaltet wird (siehe Abbildung 14).

Gegeben: $h_{t=0} = 40m$, $M = 50m$, $k = 0,0001ms^{-1}$, $S_0 = 0,0001m^{-1}$, $n_0 = 0,25$



Kapitel 9

Numerische Methoden

Die horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung ist in der allgemeinen Form einer nichtlinearen partiellen Differentialgleichung nicht geschlossen lösbar. Durch Quantisierung sowohl der Orts- als auch der Zeitkoordinaten kann ein diskontinuierliches Modell aufgestellt werden, welches numerisch lösbar ist. In der Literatur wird an Stelle von **Quantisierung** auch oft der Begriff **Diskretisierung** verwendet, und das **diskontinuierliche Modell** wird als **diskretes Modell** bezeichnet. Dieser in der Literatur falsche Gebrauch der Wörter beruht auf der unsauberen Trennung zwischen unabhängigen und abhängigen Variablen. Die **Quantisierung einer unabhängigen Variablen** führt zu den diskontinuierlichen, die **Quantisierung einer abhängigen Variablen** zu den diskreten Modellen.

Die diskontinuierlichen Modelle lassen sich einfach an die Strukturen der Datenmodelle anpassen, welche im Allgemeinen auch in Form von Stichproben vorliegen.

Die Quantisierung der Ortsvariablen soll zunächst unabhängig von der Zeitvariablen betrachtet werden. Dies ist für stationäre Prozesse auf alle Fälle berechtigt, aber auch bei instationären Vorgängen können diese Klassen der Variablen unabhängig voneinander betrachtet werden. Nur in speziellen Interpolationsschemata kann eine Verknüpfung dieser beiden Quantisierungsvorgänge entstehen und muss dann gesondert behandelt werden.

Geht man von der kontinuierlichen Funktion der Piezometerhöhe oder der Lage der freien Grundwasseroberfläche im Original ($z_{R(x,y,t)}$) aus, so erhält man durch die diskontinuierliche Simulation eine diskontinuierliche Funktion ($z_{R(x_i,y_i,t_i)}$). Anschließend wird der Problembereiber versuchen, daraus wieder eine kontinuierliche Funktion zu approximieren. Aus dieser Aufgabenstellung ergeben sich folgende Forderungen für die Durchführung der Quantisierung:

- Durch die Quantisierung der Funktion darf kein Informationsverlust auftreten, da sonst aus der diskontinuierlichen Funktion die kontinuierliche nicht eineindeutig zurückgewonnen werden kann.
- Die Quantisierung soll keine redundante Informationsverarbeitung hervorrufen, d.h. der Abstand der Tastpunkte ist nicht zu klein zu wählen.

Weitere Forderungen bezüglich der Quantisierung ergeben sich aus dem verwendeten Simulator und den vorhandenen Eingangsdaten:

- Das quantisierte Feld ist so zu gestalten, dass die hydrogeologischen und technisch/technologischen Bedingungen des Originalen übersichtlich, physikalisch anschaulich und mit hoher Genauigkeit berücksichtigt werden können.
- Die Quantisierung muss eine einfache Simulation zulassen.

Die Forderungen widersprechen sich zum Teil. So stehen vor allem die Forderungen der informationstheoretischen Seite im Widerspruch zu der praktischen Anwendung. Es wird also bei der Quantisierung auch um die Suche einer optimalen Gestaltung der Tastpunkte gehen.

9.1 Methoden der Ortsquantisierung

Die quantisierten Werte der x - und y -Achse ergeben die Tastpunkte in der x - y -Ebene, die beliebig verteilt sein können. Diese Punkte werden mit Geraden verbunden, und man erhält ein netzförmiges Gebilde. Dabei erhalten die Tastpunkte die Funktion von Netzknoten. Die Funktionswerte an den Tastpunkten bzw. den Netzknoten werden als bekannt, eventuell als Lösung der Simulation, vorausgesetzt, so dass die Werte entlang der Netzlinien und innerhalb der Netzmasche interpoliert werden können. Wird der Funktionswert (z.B. Wasserstand, Temperatur, Konzentration) als z -Achse dargestellt, so erhält man eine dreidimensionale Fläche, die an den Knoten durch die vorgegebenen Funktionswerte gestützt wird. In der Simulationspraxis unterscheidet man verschiedenen Netzformen, die nach folgenden Kriterien eingeteilt werden können (siehe Tabelle 9.1 und Abbildung 9.1).

Tabelle 9.1: Einteilung von Netzformen

Koordinatenbezug	koordinatentreu	koordinatenunabhängig
Quantisierung	äquidistant	beliebig quantisiert
Topologie	regelmäßig	unregelmäßig
Geometrie	orthogonal	dreiecksförmig

Die verschiedenen Netzformen besitzen Vor- und Nachteile bezüglich der Erfüllung der anfangs gestellten Forderungen. Die regelmäßigen Netzformen lassen eine relativ einfache Weiterverarbeitung mittels der Simulatoren zu. Sie erfüllen aber die Forderung, dass hydrogeologische Bedingungen unter minimalem Simulationsaufwand gut berücksichtigt werden sollen, schlecht. Ausserdem lässt sich eine redundante Informationsverarbeitung auf Grund zu kleiner Schrittweiten nicht vermeiden. Die unregelmäßigen Netzformen, besonders die koordinatenunabhängigen, lassen sich schlecht simulieren. Durch die beliebige Verteilung der Netzknoten lässt sich diese Netzform jedoch gut an die hydrogeologischen und technisch/technologischen Bedingungen anpassen. Der wesentliche Vorteil liegt in der beliebigen Dichteverteilung der Netzknoten, so dass sie, wo es erforderlich ist, eng beieinander liegen oder weit entfernt sein können. Damit ist eine redundanz-minimierte Informationsverarbeitung bei minimaler Netzknotenanzahl realisierbar. Der Nachteil der unregelmäßigen Netzformen liegt in einer komplizierten Durchführung der Simulation. Einen Kompromiss kann man eingehen, wenn man von den beliebigen Netzformen zu topologisch regelmäßigen, aber geometrisch unregelmäßigen Dreiecksnetzen übergeht. Entscheidend für die Durchführung der Simulation ist die topologische Gestaltung des Netzes. Bei dem topologisch regelmäßigen Dreiecksnetz gehen stets von einem Netzpunkt sechs Verbindungen zu Nachbarpunkten aus. Bei einem beliebigen Dreiecksnetz bestehen endlich viele Verbindungen zu den Nachbarknoten.

	geradlinig	krummlinig
Orthogonalnetze		
Dreiecksnetze	<p>regelmäßig</p>	<p>unregelmäßig</p>

Abbildung 9.1: Netzformen

Unabhängig von der Gestaltung der Netzform tritt bei der Modellierung hydraulischer Gebiete mittels numerischer Modelle ein weiterer Effekt auf. Durch die endliche Ausdehnung der mathematischen Modelle werden die im Allgemeinen unendlichen Strömungsverhältnisse im Grundwasserleiter künstlich begrenzt. Die Modellränder stellen Randbedingungen 2. Art ($\frac{\partial h}{\partial n} = const$) dar. Damit wird am Rand des Modells ein Volumenstrom von $\dot{V}_{Rand} = 0$ nach außen erzwungen. Damit sind die Modellränder Barrieren gleich zu setzen. Dies steht sehr oft im Widerspruch zu den hydraulischen Bedingungen des Originalprozesses. Erkennbar ist dieser Effekt daran, dass die Äquipotentiallinien, z. B. Wasserstand, die so genannten Isolines, grundsätzlich senkrecht auf dem Modellrand stehen. Diesen Fehler kann man minimieren, indem man die Modellgrenzen auf natürliche Randbedingungen 1. und 3. Art wie Flüsse und Seen, auch unter Beachtung eventueller Kolmationseffekte, legt. Bei bekannten Hangzuflussraten oder Grundwasserscheiden, insbesondere bei Grundwassereinzugsgebietsgrenzen, kann man auch diese an der Modellgrenze als Randbedingung 2. Art eingeben.

Zur Beschreibung des geohydraulischen Verhaltens innerhalb der Netzmaschen gibt es verschiedene Verfahrenswege. Die bekanntesten sind die **Methode der Finiten Differenzen (FDM)**, die **Methode der Finiten Volumen (FVM)** und die **Methode der Finiten Elemente (FEM)**. Bei der FDM wird davon ausgegangen, dass der Austausch entlang der Maschengrenzen und in den Netzknoten stattfindet. Dem gegenüber besteht der Grundgedanke der FEM darin, dass die Netzwerkmusche als Kontinuum betrachtet wird und die Wechselwirkung mit den Nachbarelementen über den Energie-, Impuls- und Massenaustausch senkrecht über die Maschenberandung erfolgt. Im Folgenden wird die FDM ausführlich beschrieben. Die anderen Quantisierungsverfahren wie FEM und FVM werden nur überblicksmäßig dargestellt.

9.1.1 Finite Differenzen Methode

Wie bereits erwähnt, werden bei der Ortsdiskretisierung keine zeitabhängigen Vorgänge betrachtet. Deshalb ist die Herleitung der Ortsquantisierungen unabhängig davon, ob ein instationäres oder stationäres Strömungsfeld untersucht werden soll. Aus diesem Grund werden die folgenden Aussagen an Hand der stationären Strömungsgleichung abgeleitet. Sie gelten dann auch, unter Berücksichtigung der mathematischen Bedingungen, für das instationäre Strömungsregime (siehe Abschnitt 9.2 Zeitquantisierung, Seite 269).

9.1.1.1 Bilanzgleichung

Die Differentialgleichung der horizontalebene Grundwasserströmung lautet für den stationären Fall:

$$\operatorname{div}(T \cdot \operatorname{grad} h) = 0 \quad (9.1)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } h &= \left. \begin{array}{l} h \text{ gespannter} \\ z_R \text{ ungespannter} \end{array} \right\} \text{Grundwasserleiter} \\ \text{und } T &= \left. \begin{array}{l} k(x, y, z)M \text{ gespannt} \\ k(x, y, z)z_R \text{ ungespannt} \end{array} \right\} = \int_{z=a}^D k(x, y, z) dz \end{aligned}$$

Die stationäre Strömung ist dadurch gekennzeichnet, dass keine Speichervorgänge auftreten. Diese partielle Differentialgleichung lässt sich in kartesischen Koordinaten wie folgt schreiben:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (9.2)$$

Wird die Methode der Finiten Differenzen auf diese Gleichung unter Einbeziehung eines koordinatentreuen, topologisch regelmäßigen Gitters angewendet, so ist dies mit der Überführung der Differentialquotienten in Differenzenquotienten gleichzusetzen:

$$\frac{\Delta}{\Delta x} \left(T \frac{\Delta h}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta}{\Delta y} \left(T \frac{\Delta h}{\Delta y} \right) = 0 \quad (9.3)$$

Der Quantisierungsfehler, der bei diesem Übergang entsteht, hat in diesem Fall eine quadratische Ordnung ($O(x, y) \sim \Delta x^2, \Delta y^2$). Diesen Fehler kann man auch als Abweichung der Sekante, die bei dem Differenzenquotient benutzt wird, von der Tangente, die durch den Differentialquotient definiert ist, beschreiben. Diese Abweichung ist abhängig von der Größe des Gradienten, d.h. von der Steigung der Tangente.

Neben diesem mathematisch begründeten Fehler lassen sich noch folgende Fehlererscheinungen aufzählen. Durch die Quantisierung wird die geometrische Lage von in der Fläche

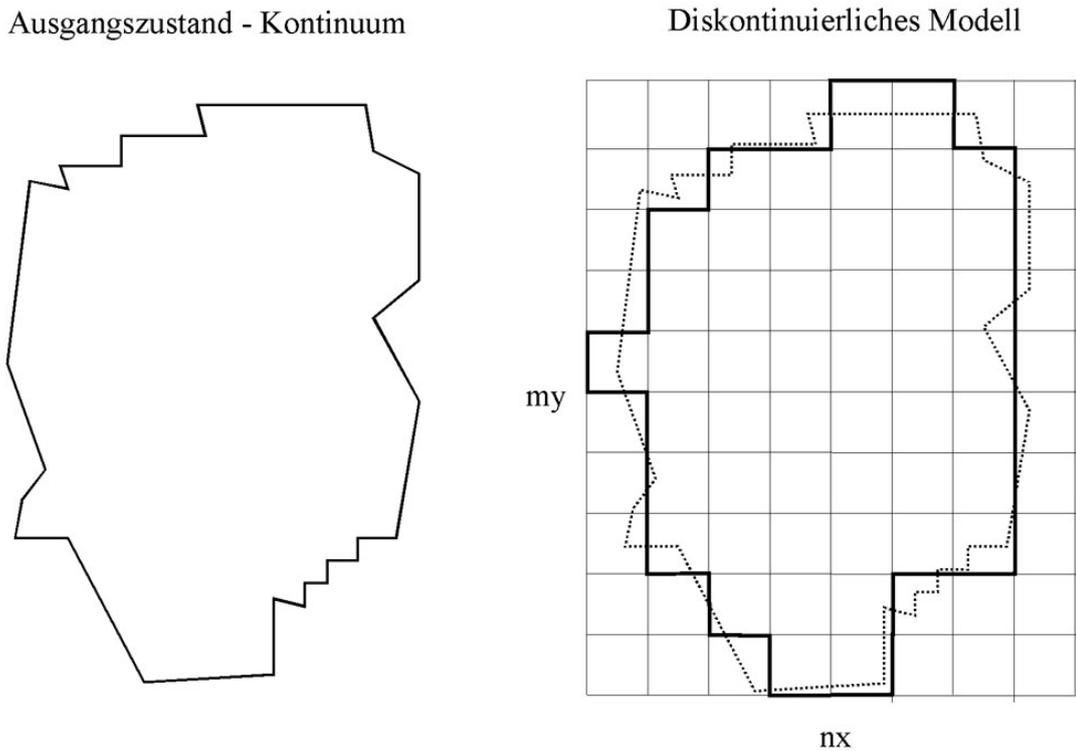


Abbildung 9.2: Übergang zwischen Kontinuum und Widerstandsnetz

beliebig angeordneten Randbedingungen verändert, da diese im diskontinuierlichen Netz nur noch an den Netzpunkten, den Kreuzungen zwischen Zeile und Spalte, angeordnet sein können (siehe Abbildung 9.2). Auch die geometrische Größe der Randbedingungen wird verändert. Im Kontinuum hat jede Randbedingung eine beliebig endliche geometrische Ausdehnung. Im diskontinuierlichen Feld kann jede Randbedingung nur eine Ausdehnung annehmen, die ein ganzzahliges Vielfaches der Quantisierungsschrittweite Δx und Δy ist. Im Allgemeinen bedeutet dies, dass den Randbedingungen eine wesentlich größere Wirkungsfläche im diskontinuierlichen Netzmodell zugeordnet wird, als dies im Original der Fall ist. In diesem Zusammenhang sei noch einmal auf die Wirkung des endlich ausgedehnten Netzes hingewiesen. Die Netzränder bewirken eine Begrenzung des Strömungsfeldes, da über die Grenzen kein Volumenstrom fließt ($\dot{V}_{Rand} = 0$). Dies muss aber im Original nicht so der Fall gewesen sein. Aus diesem Grund sollte der Modellrand möglichst mit der Lage der hydraulischen Randbedingungen übereinstimmen.

Neben der mathematischen Ableitung lässt sich der Quantisierungsvorgang auch physikalisch begründen. Zu diesem Zweck wird das Kontinuum mit einem entsprechenden Gitter überzogen. An den einzelnen Netzknoten werden die Bilanzgleichungen, hier die Massenerhaltungsgleichungen, aufgestellt. Die Verbindungen zwischen den Netzknotenpunkten werden durch Strömungswiderstände repräsentiert. Die Massenerhaltungsgleichung am Punkt $P_{n,m}$ ergibt sich aus der Summe der Wassermengen, welche entlang der Netzlinien auf den Knoten zufließen (siehe Abbildung 9.3). Diese Summe muss laut Definition (im stationären Zustand

tritt keine Speicherwirkung auf) gleich Null sein. Die **Bilanzgleichung** lautet also:

$$\dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} = 0 \quad (9.4)$$

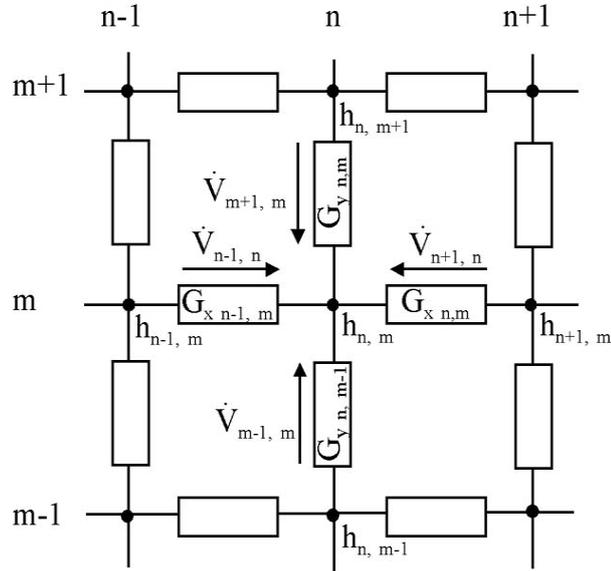


Abbildung 9.3: Bilanz für den Knoten n,m

Unter Beachtung, dass Volumenströme auch als Quotient von Differenzen des Wasserstandes bzw. Druckes und hydraulischen Strömungswiderständen oder als Produkt von Differenzen des Wasserstandes bzw. Druckes und hydraulischen Leitfähigkeiten (verallgemeinertes DARCY-Gesetz, siehe auch Theorie der Rohr- und Gerinnehydraulik) dargestellt werden können, erhält man:

$$G_{x\ n-1,m}(h_{n,m} - h_{n-1,m}) + G_{x\ n,m}(h_{n,m} - h_{n+1,m}) + \quad (9.5)$$

$$G_{y\ n,m-1}(h_{n,m} - h_{n,m-1}) + G_{y\ n,m}(h_{n,m} - h_{n,m+1}) = 0$$

bzw. nach Wasserhöhen geordnet:

$$\begin{aligned} & h_{n-1,m}(-G_{x\ n-1,m}) + \\ & h_{n,m-1}(-G_{y\ n,m-1}) + \\ & h_{n,m}(G_{x\ n-1,m} + G_{x\ n,m} + G_{y\ n,m-1} + G_{y\ n,m}) + \quad (9.6) \end{aligned}$$

$$h_{n,m+1}(-G_{y\ n,m}) +$$

$$h_{n+1,m}(-G_{x\ n,m}) = 0$$

Geht man spaltenweise durch das Gitternetz, d.h. innerhalb der Spalten 1 bis nx werden die Knoten der Zeilen 1 bis my abgearbeitet, so ergibt sich ein Gleichungssystem mit $nx \cdot my$ Zeilen und damit auch mit $nx \cdot my$ Unbekannten. Diese hochdimensionalen Gleichungssysteme, bei praktischen Aufgaben bis zu einigen Hunderttausenden oder Millionen, können im Gesamtschrittverfahren nach GAUSS, GAUSS-SEIDEL oder mittels Iterationsverfahren, insbesondere mit den Verfahren der konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung (PCG), gelöst werden (siehe Abschnitt 1.3 Lineare Gleichungssysteme, Seite 18ff).

Ordnet man diese Gleichungen nach den Elementen $h_{n,m}$ so erhält man ein Gleichungssystem (siehe Tabelle 9.3), welches die charakteristische Gestalt der Diagonalen hat. Stellt man dies als Matrixgleichung dar, so erhält man die Koeffizientenmatrix G mit $nx \cdot my$ Spalten und ebensoviel Zeilen. Diese Koeffizientenmatrix ist nur an bestimmten Stellen besetzt, nämlich in der Diagonalen, den beiden unmittelbar angrenzenden Nebendiagonalen und an zwei weiteren Nebendiagonalen, die einen Abstand von nx von der Hauptdiagonalen besitzen. Alle anderen Elemente der Matrix sind gleich Null. Da diese Matrix zusätzlich noch symmetrisch ist, reduziert sich der eigentliche signifikante Wertebraum auf $3 \cdot nx \cdot my$ Elemente (siehe auch Abschnitt 1.2.1 Bandmatrizen, Seite 8). Die Lösungsfunktion, d.h. die Wasserstände $h_{n,m}$ an den Knoten, wird durch einen Spaltenvektor der Länge $nx \cdot my$ dargestellt. Demgegenüber steht die rechte Seite ebenso als Spaltenvektor der Länge $nx \cdot my$ zur Verfügung.

An Hand eines Beispiels der Quantisierung eines zweidimensionalen Grundwasserleiters mittels eines Netzes aus vier Spalten und vier Zeilen (siehe Abbildung 9.4) soll die Aufstellung des Gleichungssystems gezeigt werden.

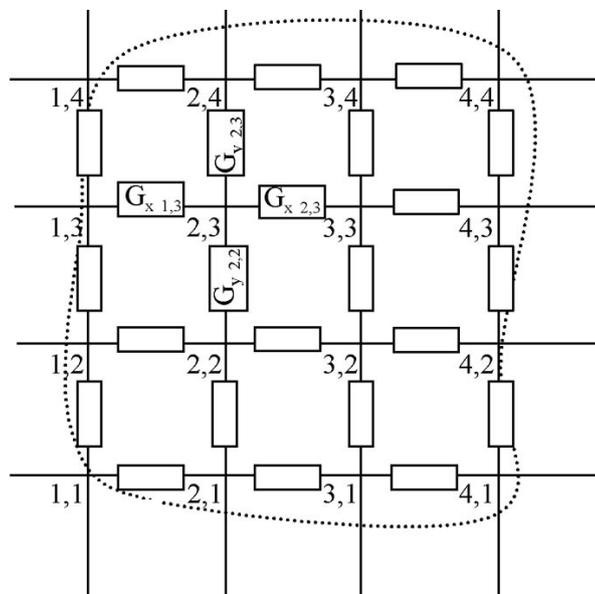


Abbildung 9.4: 4 x 4-Gitternetz

Für dieses Beispiel ergeben sich folgende 16 Gleichungen (siehe Tabelle 9.2).

Tabelle 9.2: Gleichungssystem für die Quantisierung eines zweidimensionalen GWL

Spalte	Nr.	Knotenpunktgleichung	
n	n,m	$G_{x\ n-1,m}(\mathbf{h}_{n,m} - \mathbf{h}_{n-1,m}) + G_{y\ n,m-1}(\mathbf{h}_{n,m} - \mathbf{h}_{n,m-1}) + G_{x\ n,m}(\mathbf{h}_{n,m} - \mathbf{h}_{n+1,m}) + G_{y\ n,m}(\mathbf{h}_{n,m} - \mathbf{h}_{n,m+1})$	$= 0$
1	1,1	$G_{x\ 1,1}(h_{1,1} - h_{2,1}) + G_{y\ 1,1}(h_{1,1} - h_{1,2})$	$= 0$
	1,2	$G_{x\ 1,1}(h_{1,2} - h_{1,1}) + G_{x\ 1,2}(h_{1,2} - h_{2,2}) + G_{y\ 1,2}(h_{1,2} - h_{1,3})$	$= 0$
	1,3	$G_{y\ 1,2}(h_{1,3} - h_{1,2}) + G_{x\ 1,3}(h_{1,3} - h_{2,3}) + G_{y\ 1,3}(h_{1,3} - h)$	$= 0$
	1,4	$G_{y\ 1,3}(h_{1,4} - h_{1,3}) + G_{x\ 1,4}(h_{1,4} - h_{2,4})$	$= 0$
2	2,1	$G_{x\ 1,1}(h_{2,1} - h_{1,1}) + G_{x\ 2,1}(h_{2,1} - h_{3,1}) + G_{y\ 2,1}(h_{2,1} - h_{2,2})$	$= 0$
	2,2	$G_{x\ 1,2}(h_{2,2} - h_{1,2}) + G_{x\ 2,2}(h_{2,2} - h_{3,2}) + G_{y\ 2,2}(h_{2,2} - h_{2,3})$	$= 0$
	2,3	$G_{x\ 1,3}(h_{2,3} - h_{1,3}) + G_{y\ 2,2}(h_{2,3} - h_{2,2}) + G_{x\ 2,3}(h_{2,3} - h_{3,3}) + G_{y\ 2,3}(h_{2,3} - h_{2,4})$	$= 0$
	2,4	$G_{x\ 1,4}(h_{2,4} - h_{1,4}) + G_{y\ 2,3}(h_{2,4} - h_{2,3}) + G_{x\ 2,4}(h_{2,4} - h_{3,4})$	$= 0$
3	3,1	$G_{x\ 2,1}(h_{3,1} - h_{2,1}) + G_{x\ 3,1}(h_{3,1} - h_{4,1}) + G_{y\ 3,1}(h_{3,1} - h_{3,2})$	$= 0$
	3,2	$G_{x\ 2,2}(h_{3,2} - h_{2,2}) + G_{y\ 3,1}(h_{3,2} - h_{3,1}) + G_{x\ 3,2}(h_{3,2} - h_{4,2}) + G_{y\ 3,2}(h_{3,2} - h_{3,3})$	$= 0$
	3,3	$G_{x\ 2,3}(h_{3,3} - h_{2,3}) + G_{y\ 3,2}(h_{3,3} - h_{3,2}) + G_{x\ 3,3}(h_{3,3} - h_{4,3}) + G_{y\ 3,3}(h_{3,3} - h_{3,4})$	$= 0$
	3,4	$G_{x\ 2,4}(h_{3,4} - h_{2,4}) + G_{y\ 3,3}(h_{3,4} - h_{3,3}) + G_{x\ 3,4}(h_{3,4} - h_{4,4})$	$= 0$
4	4,1	$G_{x\ 3,1}(h_{4,1} - h_{3,1}) + G_{y\ 4,1}(h_{4,1} - h_{4,2})$	$= 0$
	4,2	$G_{x\ 3,2}(h_{4,2} - h_{3,2}) + G_{y\ 4,1}(h_{4,2} - h_{4,1}) + G_{y\ 4,2}(h_{4,2} - h_{4,3})$	$= 0$
	4,3	$G_{x\ 3,3}(h_{4,3} - h_{3,3}) + G_{y\ 4,2}(h_{4,3} - h_{4,2}) + G_{y\ 4,3}(h_{4,3} - h_{4,4})$	$= 0$
	4,4	$G_{x\ 3,4}(h_{4,4} - h_{3,4}) + G_{y\ 4,3}(h_{4,4} - h_{4,3})$	$= 0$

Tabelle 9.3: Gleichungssystem in Diagonalengestalt

Spalte		Zeile 1			
		Nr.	$h_{1,1}$ ·	$h_{1,2}$ ·	$h_{1,3}$ ·
1	1,1	$\begin{pmatrix} G_{x\ 1,1} \\ +G_{y\ 1,1} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 1,1}$		
	1,2	$-G_{y\ 1,1}$	$\begin{pmatrix} G_{y\ 1,1} \\ +G_{x\ 1,2} \\ +G_{y\ 1,2} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 1,2}$	
	1,3		$-G_{y\ 1,2}$	$\begin{pmatrix} G_{y\ 1,2} \\ +G_{x\ 1,3} \\ +G_{y\ 1,3} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 1,3}$
	1,4			$-G_{y\ 1,3}$	$\begin{pmatrix} G_{y\ 1,3} \\ +G_{x\ 1,4} \end{pmatrix}$
2	2,1	$-G_{x\ 1,1}$			
	2,2		$-G_{x\ 1,2}$		
	2,3			$-G_{y\ 1,3}$	
	2,4				$-G_{y\ 1,4}$
3	3,1				
	3,2				
	3,3				
	3,4				
4	4,1				
	4,2				
	4,3				
	4,4				

Tabelle 9.4: Fortsetzung 1

		Zeile 2			
Spalte	Nr.	$h_{2,1}$ ·	$h_{2,2}$ ·	$h_{2,3}$ ·	$h_{2,4}$ ·
1	1,1	$-G_{x 1,1}$			
	1,2		$-G_{x 1,2}$		
	1,3			$-G_{x 1,3}$	
	1,4				$-G_{x 1,4}$
2	2,1	$\begin{pmatrix} G_{x 1,1} \\ +G_{x 2,1} \\ +G_{y 2,1} \end{pmatrix}$	$-G_{y 2,1}$		
	2,2	$-G_{y 2,1}$	$\begin{pmatrix} G_{x 1,2} \\ +G_{y 2,1} \\ +G_{x 2,2} \\ +G_{y 2,2} \end{pmatrix}$	$-G_{y 2,2}$	
	2,3		$-G_{y 2,2}$	$\begin{pmatrix} G_{x 1,3} \\ +G_{y 2,2} \\ +G_{x 2,3} \\ +G_{y 2,3} \end{pmatrix}$	$-G_{y 2,3}$
	2,4			$-G_{y 2,3}$	$\begin{pmatrix} G_{x 1,4} \\ +G_{y 2,3} \\ +G_{x 2,4} \end{pmatrix}$
3	3,1	$-G_{x 2,1}$			
	3,2		$-G_{x 2,2}$		
	3,3			$-G_{x 2,3}$	
	3,4				$-G_{x 2,4}$
4	4,1				
	4,2				
	4,3				
	4,4				

Tabelle 9.5: Fortsetzung 2

		Zeile 3			
Spalte	Nr.	$h_{3,1}$.	$h_{3,2}$.	$h_{3,3}$.	$h_{3,4}$.
1	1,1				
	1,2				
	1,3				
	1,4				
2	2,1	$-G_{x\ 2,1}$			
	2,2		$-G_{x\ 2,2}$		
	2,3			$-G_{x\ 2,3}$	
	2,4				$-G_{x\ 2,4}$
3	3,1	$\begin{pmatrix} G_{x\ 2,1} \\ +G_{x\ 3,1} \\ +G_{y\ 3,1} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 3,1}$		
	3,2	$G_{y\ 3,1}$	$\begin{pmatrix} G_{x\ 2,2} \\ +G_{y\ 3,1} \\ +G_{x\ 3,2} \\ +G_{y\ 3,2} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 3,2}$	
	3,3		$-G_{y\ 3,2}$	$\begin{pmatrix} G_{x\ 2,3} \\ +G_{y\ 3,2} \\ +G_{x\ 3,3} \\ +G_{y\ 3,3} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 3,3}$
	3,4			$-G_{y\ 3,3}$	$\begin{pmatrix} G_{x\ 2,4} \\ +G_{y\ 3,3} \\ +G_{x\ 3,4} \end{pmatrix}$
4	4,1	$-G_{x\ 3,1}$			
	4,2		$-G_{x\ 3,2}$		
	4,3			$-G_{x\ 3,3}$	
	4,4				$-G_{x\ 3,4}$

Tabelle 9.6: Fortsetzung 3

Spalte	Zeile 4					RS
	Nr.	$h_{4,1}$ ·	$h_{4,2}$ ·	$h_{4,3}$ ·	$h_{4,4}$ ·	
1	1,1					= 0
	1,2					= 0
	1,3					= 0
	1,4					= 0
2	2,1					= 0
	2,2					= 0
	2,3					= 0
	2,4					= 0
3	3,1	$-G_{x\ 3,1}$				= 0
	3,2		$-G_{x\ 3,2}$			= 0
	3,3			$-G_{x\ 3,3}$		= 0
	3,4				$-G_{x\ 3,4}$	= 0
4	4,1	$\begin{pmatrix} G_{x\ 3,1} \\ +G_{y\ 4,1} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 4,1}$			= 0
	4,2	$-G_{y\ 4,1}$	$\begin{pmatrix} G_{x\ 3,2} \\ +G_{y\ 4,1} \\ +G_{y\ 4,2} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 4,2}$		= 0
	4,3		$-G_{y\ 4,2}$	$\begin{pmatrix} G_{x\ 3,3} \\ +G_{y\ 4,2} \\ +G_{y\ 4,3} \end{pmatrix}$	$-G_{y\ 4,3}$	= 0
	4,4			$-G_{y\ 4,3}$	$\begin{pmatrix} G_{x\ 3,4} \\ +G_{y\ 4,3} \end{pmatrix}$	= 0

Die Berechnung der Leitwerte erfolgt nach folgendem Schema (siehe Abbildung 9.5).

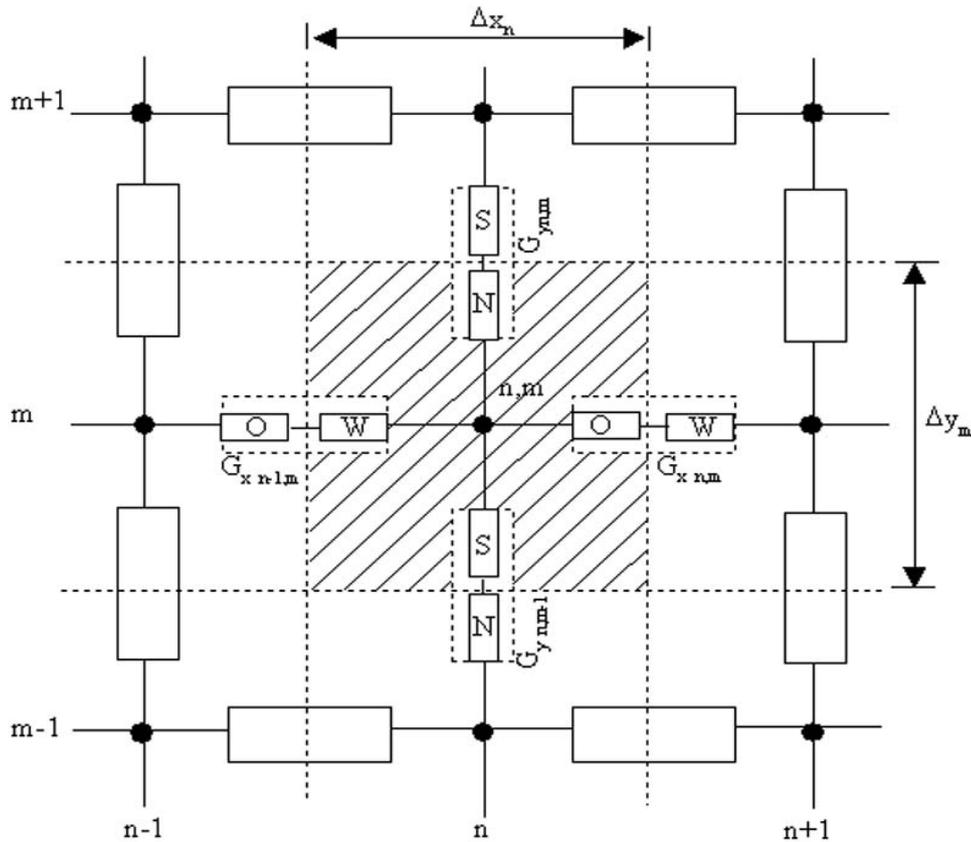


Abbildung 9.5: Zuordnung hydraulischer Parameter zu Ersatzleitwerten

Die kleinste Quantisierungsfläche ist die Fläche, die sich um den betrachteten Punkt $P_{n,m}$ mit den Kantenlängen Δx und Δy ergibt. Entsprechend den Quantisierungsvorschriften werden dieser Fläche einheitliche Parameter zugeordnet, d.h. innerhalb dieses Planungselementes werden die Parameter des Grundwasserleiters wie k -Wert, Speicherkoeffizient S , Lage des Grundwasserstauers a , durchströmte Mächtigkeit D und die aktuelle Piezometerhöhen bzw. die Lage der freien Grundwasseroberfläche z_R als unabhängig vom Ort x, y betrachtet. Eine Änderung dieser Werte kann nur an den Grenzen des Planungselementes erfolgen. Dort kann es aber zu größeren Sprüngen kommen. Damit werden die Parameter und Zustandsgrößen des Grundwasserleiters im mittels FDM quantisierten Netz durch unstetige Funktionen wiedergespiegelt. Dieses steht im Widerspruch zu meist stetigen Funktionen im Originalprozess. Für die Strömungsprozesse bedeutet dies, dass dieses Planungselement als homogener Grundwasserleiter mit horizontaler Sohle und horizontalem Grundwasserspiegel betrachtet wird. Auf Grund des Quantisierungsschrittes ist eine Interpolation zwischen den Netzknoten nicht zulässig. Dies entspricht den gleichen Aussagen, die für quantisierte Signale gelten (siehe GRÄBER: Skripte zu den Vorlesungen Automatisierungstechnik bzw. Grundwasser-messtechnik). Berücksichtigt man diese Prämissen, so können die einzelnen hydraulischen Leitwerte definiert werden.

Allgemein gilt:

$$G = k \cdot \frac{A}{l} \quad (9.7)$$

wobei A die senkrecht durchströmte Fläche und l die parallel durchströmte Länge ist. A ergibt sich aus der Strömungsbreite b und der durchströmten Mächtigkeit D , die gleich der Mächtigkeit des Grundwasserleiters für gespannte Verhältnisse bzw. der freien Grundwasserhöhe z_R ist. Der differentielle Leitwert einer Stromlinie ergibt sich zu:

$$dG = k \cdot \frac{dz \cdot b}{l} \quad (9.8)$$

bzw. der Gesamtleitwert einer senkrecht durchströmten Fläche ergibt sich als Parallelschaltung der Leitwerte der einzelnen Stromlinien. Die Parallelschaltung wird als Summation bzw. als Integration der differentiellen Leitwerte betrachtet:

$$G = \int_{z=a}^D k \frac{b}{l} dz$$

$$G = \frac{b}{l} \int_{z=a}^D k dz$$

$$G = \frac{T \cdot b}{l}$$

mit:

$$T = \int_{z=a}^D k dz$$

$$D = \left\{ \begin{array}{ll} M & \text{gespannter} \\ z_R & \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL}$$

Diese Integraldarstellung der Transmissibilität lässt sich numerisch schlecht auswerten, da der Durchlässigkeitskoeffizient eine Stufenfunktion und nicht als stetige Funktion darstellbar ist. Damit ist die Transmissibilität stets eine stückweise lineare Funktion der Variablen z und kann damit als Summenformel geschrieben werden:

$$T = \sum_{l=0}^n k_l ((z_{l+1} - z_l)\Gamma_1 + (z_R - z_l)\Gamma_2) \quad (9.9)$$

mit:

$$\Gamma_1 = \begin{cases} 0 & z_R \leq z_{l+1} \\ 1 & z_R > z_{l+1} \end{cases}$$

$$\Gamma_2 = \begin{cases} 0 & z_R > z_{l+1} \\ 1 & z_l \leq z_R \leq z_{l+1} \end{cases}$$

Dabei bedeuten z_l die absoluten Höhen der verschiedenen Bodenschichten und k_l die dazugehörige Durchlässigkeitskoeffizienten. Die Einzelleitwerte (Indizes O, W, S, N) werden damit wie folgt berechnet:

$$G_{x n, m O} = T_{n, m} \frac{\Delta y}{\frac{\Delta x}{2}} = 2 \cdot T_{n, m} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$G_{x n, m W} = G_{x n, m O} \tag{9.10}$$

Da vorausgesetzt wird, dass im Planungselement n, m alle Parameter, einschließlich der durchströmten Mächtigkeit, konstant sind, gilt, dass jeweils paarweise gleiche Leitwerte angenommen werden können:

$$G_{y n, m S} = T_{n, m} \frac{\Delta x}{\frac{\Delta y}{2}} = 2 \cdot T_{n, m} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$G_{y n, m N} = G_{x n, m S} \tag{9.11}$$

Die Zusammenschaltung zweier Teilleitwerte, z.B. des $G_{x n, m O}$ und des $G_{x n+1, m W}$, ergibt den Leitwert zwischen zwei Knoten. Aus der Strömungstechnik oder Elektrotechnik ist bekannt, dass die Reihenschaltung zweier Widerstände deren Summe ergibt:

$$R = R_1 + R_2 \tag{9.12}$$

$$G = \frac{1}{R} = \frac{1}{R_1 + R_2} \tag{9.13}$$

$$= \frac{1}{\frac{1}{G_1} + \frac{1}{G_2}}$$

$$= \frac{G_1 \cdot G_2}{G_1 + G_2}$$

damit ist:

$$\begin{aligned}
 G_{xn,m} &= \frac{G_{xn,mO} \cdot G_{xn+1,mW}}{G_{xn,mO} + G_{xn+1,mW}} & (9.14) \\
 &= \frac{2T_{n,m} \frac{\Delta y_m}{\Delta x_n} \cdot 2T_{n+1,m} \frac{\Delta y_m}{\Delta x_{n+1}}}{2T_{n,m} \frac{\Delta y_m}{\Delta x_n} + 2T_{n+1,m} \frac{\Delta y_m}{\Delta x_{n+1}}} \\
 &= \frac{2T_{n,m} \frac{1}{\Delta x_n} \cdot T_{n+1,m} \frac{\Delta y_m}{\Delta x_{n+1}}}{T_{n,m} \frac{1}{\Delta x_n} + T_{n+1,m} \frac{1}{\Delta x_{n+1}}} \\
 &= \frac{2T_{n,m} \cdot T_{n+1,m} \Delta y_m}{T_{n,m} \Delta x_{n+1} + T_{n+1,m} \Delta x_n}
 \end{aligned}$$

Bei äquidistanter Teilung, d.h.

$$\Delta x_n = \Delta x_{n+1} = \Delta x \quad \text{bzw.}$$

$$\Delta y_m = \Delta y_{m+1} = \Delta y$$

erhält man:

$$G_{xn,m} = \frac{2T_{n,m} \cdot T_{n+1,m}}{(T_{n,m} + T_{n+1,m})} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

Unter Beachtung, dass allgemein gilt:

$$G_{xn,m} = T \frac{\Delta y_m}{\Delta x_n}$$

ergibt sich damit:

$$T = 2 \frac{T_{n,m} \cdot T_{n+1,m}}{T_{n,m} + T_{n+1,m}} \quad (9.15)$$

Diese harmonische Mittelwertbildung entspricht auch sehr gut dem hydraulischen Realzustand, bei dem sich der kleinere Durchlässigkeitskoeffizient bzw. die kleinere Transmissibilität dominant durchsetzt. Die Berechnung der Transmissibilität wird auch im stationären Fall bei Vorliegen eines ungespannten Grundwasserleiter kompliziert, da es sich hier um einen Wert handelt, der von der Lösung des Gleichungssystems selbst abhängt. Im Beispiel eines ungeschichteten Grundwasserleiters ergibt sich die Transmissibilität zu:

$$T_{n,m} = k_{n,m} \cdot z_{Rn,m} \quad (9.16)$$

In diesem Fall ist es notwendig, das Gleichungssystem iterativ zu berechnen. Dazu beginnt man mit einem Schätzwert für $z_{Rn,m}^{(1)}$. Je besser dieser Schätzwert der wahren Lösung $z_{Rn,m}$ nahe kommt, umso weniger Iterationsschritte müssen ausgeführt werden. Mittels des Schätzwertes lässt sich eine erste Näherung für die Transmissibilität $T_{n,m}^{(1)}$ berechnen und damit die Koeffizientenmatrix mit den entsprechenden Leitwerten aufbauen. Sie führt zur Lösung $z_{Rn,m}^{(2)}$, einer verbesserten Näherung der exakten Lösung $z_{Rn,m}$. Diese wiederum wird nun

zur Berechnung verbesserter Transmissibilitäten $T_{n,m}^{(2)}$ benutzt. Das Verfahren wird fortgesetzt, bis die Abweichung zweier Näherungen kleiner als eine gewisse Grenze ε ist.

$$\left| \frac{z_{R n,m}^{(i)} - z_{R n,m}^{(i+1)}}{z_{R n,m}^{(i)}} \right| < \varepsilon$$

9.1.1.2 Berücksichtigung der Randbedingungen

Die vorangegangenen Ausführungen zur Quantisierung des Kontinuums galten für den Fall der unbeeinflussten Grundwasserströmung. Für eine eindeutige Simulation müssen wie im Originalvorgang Randbedingungen wirken, ohne die keine Grundwasserströmung zu Stande käme. Bei den diskontinuierlichen Modellen auf der Basis der Finiten Differenzen Methode greifen die Randbedingungen grundsätzlich an den Knoten an. Dabei stößt vor allem die Berücksichtigung von Randbedingungen 1. Art auf Schwierigkeiten.

Bei der numerischen Simulation muss mindestens an einem Knoten eine Randbedingung 1. Art wirken. Modelle, die nur über Randbedingungen 2. und/oder 3. Art verfügen, liefern keine eindeutigen Simulationsergebnisse. Den Fall des unendlich ausgedehnten Grundwasserleiters, wie mittels der analytischen Lösung nach THEIS berechenbar, existiert in den diskontinuierlichen Modellen nicht.

Im Folgenden sollen für die verschiedenen Arten von Randbedingungen die Realisierungsmöglichkeiten angegeben werden. Die **Randbedingung 2. Art**, die an einem Knoten wirkt (siehe Abbildung 9.6), kann auf der Basis der Bilanzgleichung wie folgt berücksichtigt werden:

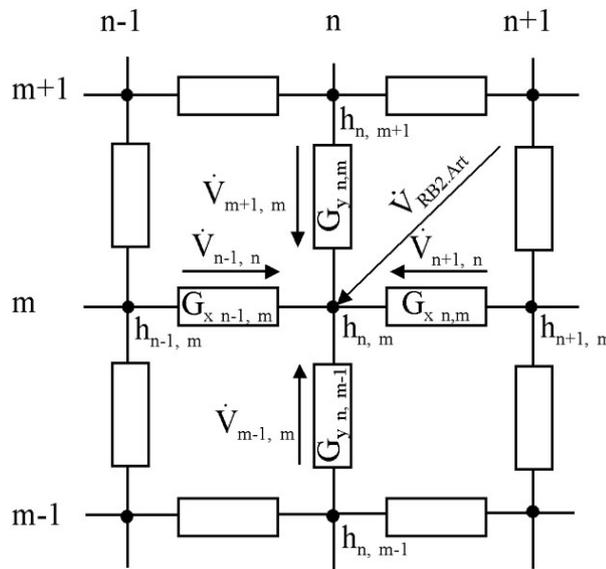


Abbildung 9.6: Berücksichtigung einer Randbedingung 2. Art

$$\dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} + \dot{V}_{RB2. Art\ n,m} = 0$$

$$\underbrace{\dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m}}_{\text{unbekannte Größen}} = \underbrace{-\dot{V}_{RB2. Art\ n,m}}_{\text{bekannte Größen}} \quad (9.17)$$

Damit kann die Randbedingung 2. Art direkt auf die rechte Seite der Gleichung geschrieben werden. Bei Einführung der Potentialdifferenzen an Stelle der Volumenströme geht diese Gleichung in die gewohnte Matrixgleichung für das Gitternetz über, wobei für die Knoten mit Randbedingungen 2. Art die rechte Seite von Null verschieden ist.

Bei **Randbedingungen 3. Art** (siehe Abbildung 9.7) geht man prinzipiell gleich vor. Die Bilanzgleichung wird für den Knoten aufgeschrieben, an dem die Randbedingung angreift. Die Randbedingung 3. Art ist definitionsgemäß ein Potentialabfall über einen Anströmwiderstand, was wiederum nichts anderes als ein veränderlicher Volumenstrom ist. Im Allgemeinen wird bei der Randbedingung 3. Art die Potentialdifferenz zwischen einem vorgegebenen Potential (z.B. Wasserstand eines Vorfluters oder eines anderen Oberflächengewässers) und dem Wasserstand an dem Punkt des Grundwasserleiters, wo die Randbedingung wirkt, gebildet:

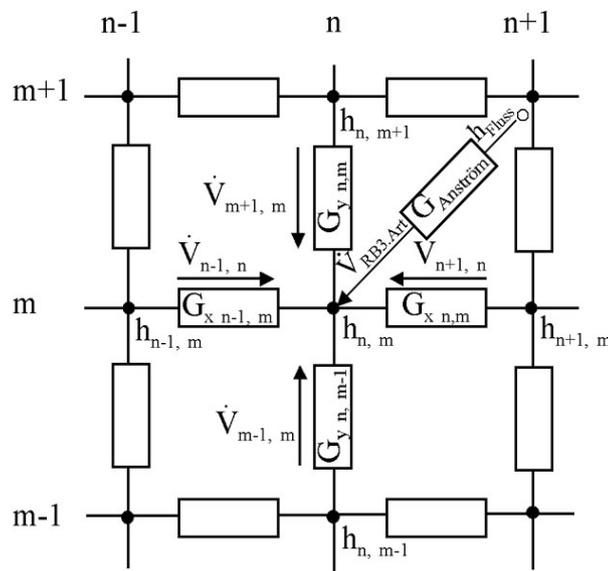


Abbildung 9.7: Berücksichtigung einer Randbedingung 3. Art

$$\begin{aligned} \dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} + \dot{V}_{RB3. Art\ n,m} &= 0 \\ \dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} + G_{anstrm\ n,m} (h_{n,m} - h_{Flu}) &= 0 \\ \underbrace{\dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} + G_{anstrm\ n,m} \cdot h_{n,m}}_{\text{unbekannte Größen}} &= \underbrace{G_{anstrm\ n,m} \cdot h_{Flu}}_{\text{bekannte Größen}} \end{aligned} \quad (9.18)$$

Bei Einführung der Potentialdifferenzen für alle Volumenströme erhält man:

$$\begin{aligned}
 &G_{x\ n-1,m}(h_{n,m} - h_{n-1,m})+ \\
 &G_{y\ n,m-1}(h_{n,m} - h_{n,m-1})+ \\
 &G_{x\ n,m}(h_{n,m} - h_{n+1,m})+ \\
 &G_{anström\ n,m}h_{n,m}+ \\
 &G_{y\ n,m}(h_{n,m} - h_{n,m+1}) = G_{anström\ n,m}h_{Fluss\ n,m}
 \end{aligned} \tag{9.19}$$

bzw. nach h geordnet:

$$\begin{aligned}
 &h_{n-1,m}(-G_{x\ n-1,m})+ \\
 &h_{n,m-1}(-G_{y\ n,m-1})+ \\
 &h_{n,m}(G_{x\ n-1,m} + G_{x\ n,m} + G_{y\ n,m-1} + G_{y\ n,m} + G_{anström\ n,m})+ \\
 &h_{n,m+1}(-G_{y\ n,m})+ \\
 &h_{n+1,m}(-G_{x\ n,m}) = G_{anström\ n,m}h_{Fluss\ n,m}
 \end{aligned} \tag{9.20}$$

Damit ist zu erkennen, dass bei Vorhandensein einer Randbedingung 3. Art neben der von Null verschiedenen rechten Seite auch die Hauptdiagonale einen weiteren Summanden erhalten hat.

Randbedingungen 1. Art werden in dem diskontinuierlichen Modell als Sonderfall der Randbedingung 3. Art mit verschwindendem Anströmwiderstand behandelt. Da die Bilanzgleichungen der Knoten auf Volumenströme orientieren, kann das Potential der Randbedingung nicht explizit auftreten. Hydraulisch ist dieser mathematische Schritt durchaus sinnvoll interpretierbar, da die Randbedingungen 3. Art auch als Kombination einer Randbedingung 1. Art und einem Anströmwiderstand anzusehen sind. Geht dieser Anströmwiderstand gegen Null, d.h. verschwindet der Potentialverlust zwischen Grundwasserstand und Oberflächengewässer, ist dies mit dem Wirken einer Randbedingung 1. Art gleichzusetzen. Aus dieser Feststellung heraus kann die Herleitung entsprechend den obigen Aussagen über die Rand-

bedingung 3. Art übernommen werden:

$$\begin{aligned}
 & h_{n-1,m}(-G_{x\ n-1,m})+ \\
 & h_{n,m-1}(-G_{y\ n,m-1})+ \\
 & h_{n,m}(G_{x\ n-1,m} + G_{x\ n,m} + G_{y\ n,m-1} + G_{y\ n,m} + G_{RB\ 1.Art\ n,m})+ \\
 & h_{n,m+1}(-G_{y\ n,m})+ \\
 & h_{n+1,m}(-G_{x\ n,m}) = G_{RB\ 1.Art\ n,m} h_{Fluss\ n,m}
 \end{aligned} \tag{9.21}$$

In dieser Gleichung ist statt $G_{anström\ n,m} = G_{RB\ 1.Art\ n,m}$ gesetzt worden, da es sich um eine mathematische Umformung der Randbedingung 1. Art handelt. Ein verschwindender Widerstand, d.h. $R_{anström} \rightarrow 0$, würde einen Leitwert $G_{RB\ 1.Art\ n,m} \rightarrow \infty$ bedeuten. Dies ist numerisch an dieser Stelle nicht realisierbar. Da $G_{RB\ 1.Art\ n,m}$ in additiver Verknüpfung zu den anderen an dem Knoten n, m angreifenden Leitwerten steht, ist es ausreichend, dass der Leitwert $G_{RB\ 1.Art\ n,m}$ die Summation der Leitwerte beherrscht. Diese ist gegeben, wenn folgende Ungleichung erfüllt wird:

$$G_{RB\ 1.Art\ n,m} \gg G_{x\ n-1,m} + G_{x\ n,m} + G_{y\ n,m-1} + G_{y\ n,m}$$

Diese Ungleichung kann als hinreichend erfüllt angesehen werden, wenn gilt:

$$G_{RB\ 1.Art\ n,m} = 100 \cdot (G_{x\ n-1,m} + G_{x\ n,m} + G_{y\ n,m-1} + G_{y\ n,m})$$

Auf Grund von numerischen Instabilitäten innerhalb der Gleichungslöser sollte $G_{RB\ 1. Art\ n,m}$ auch nicht zu groß gewählt werden.

In einigen Simulationsprogrammen werden die Randbedingungen 1. Art auch als unendlich große Speicherwirkung interpretiert. Dies funktioniert aber nur bei der Verwendung instationärer Strömungsregime.

Liegen die Randbedingungen außerhalb der Netzknotens, was meistens der Fall ist, und soll nicht das ganze Feldelement den Eigenschaften der Randbedingungen zugeordnet werden, so kann die Randbedingung über vier Widerstände an die benachbarten Knoten angeschlossen werden (siehe Abbildung 9.8). Die Berechnung der Widerstände und der damit verbundenen Aufteilung der Wirkung der Randbedingung auf die benachbarten Knoten erfolgt nach den geometrischen Verhältnissen, d.h. nach der Entfernung zwischen Randbedingung und Knoten und der entsprechenden Wirkungsbreite. Die Wirkungsbreite ergibt sich aus den Schwerpunkten der repräsentativen Flächen zwischen den Verbindungslinien des Randbedingungspunktes und des angrenzenden Knotens. Dabei soll der Schwerpunkt die Koordinaten $x_{Mn,m}; y_{Mn,m}$ haben.

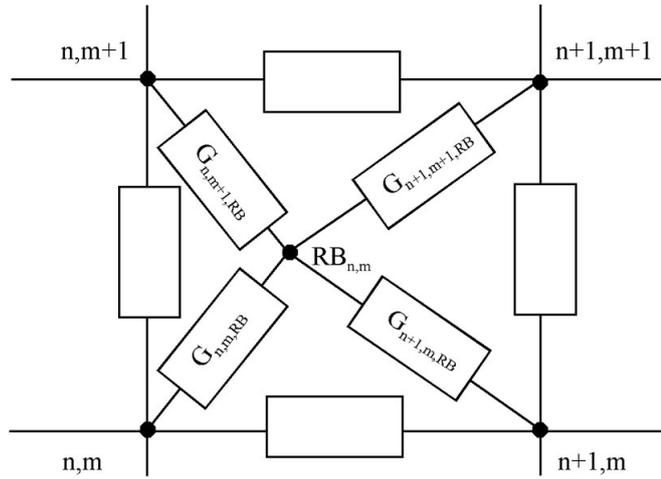


Abbildung 9.8: Außerhalb des Knotens liegenden Randbedingung

$$G_{n,m, RB} = T_{n,m} \frac{b}{l} \quad \text{mit} \quad (9.22)$$

$$b = \sqrt{(x_{Mn,m} - x_{Mn+1,m})^2 + (y_{Mn,m} - y_{Mn+1,m})^2} \quad (9.23)$$

$$l = \sqrt{(x_{n,m} - x_{RBn,m})^2 + (y_{n,m} - y_{RBn,m})^2} \quad (9.24)$$

Die mathematische Formulierung der verschiedenen Arten der Randbedingungen erfolgt entsprechend der oben dargestellten Form für die Randbedingungen 1., 2. und 3. Art.

9.1.2 Finite Elemente Methode

Die Methode der Finiten Elemente (FEM) stellt eine weitere Art der Überführung des Kontinuums in eine quantisierte Darstellung dar. Sie unterscheidet sich von der FDM (siehe Abschnitt 9.1.1 Finite Differenzen Methode, Seite 247) im Ansatz zur Bestimmung der Planungselemente und deren Parameter. Während bei der FDM die Bilanz im Wesentlichen auf der Grundlage der Knotenpunktgleichung berechnet wird, stellt die FEM die Bilanz über die Seiten der Planungselemente auf.

Als Planungselemente können beliebige Körper in Form von Polyedern gewählt werden. In der zweidimensionalen Ebene werden diese Planungselemente zu Flächen, die durch beliebige geschlossene Polygone gebildet werden. Die einfachste Form stellt dabei die Bildung von Dreieckselementen dar. Jede höhere Ordnung der Planungselemente kann durch die Zusammenfassung von mehreren Dreiecken gebildet werden.

In den Planungselementen werden für die Potentialfunktionen, z.B. Wasserstand, Piezometerhöhe, Konzentrationsverteilung, Temperatur oder anderes, lineare, homogene Verhältnisse vorausgesetzt. Damit kann innerhalb der Planungselemente die Verteilung analytisch berechnet werden. Diese Berechnung kann mittels der Methoden der Variationsrechnung oder nach dem GALERKIN-Verfahren bestimmt werden.

Nach dem Prinzip der Variationsrechnung wird zu der gesuchten Potentialverteilung $P_{(x,y)}$ (z.B. h , z_R , Φ) im gesamten betrachteten Gebiet G eine Näherungsfunktion $\mathbf{P}_{(x,y)}^*$ des quantisierten Kontinuums gesucht. Da laut Definition innerhalb des Planungselementes lineare Systemzustände herrschen, gilt für ein Dreieckselement der lineare Ansatz:

$$P_{(x,y)}^* = a + b \cdot x + c \cdot y \quad (9.25)$$

Diese Gleichung muss auf alle Fälle die Potentialverteilung an den Stützstellen, den Dreieckspunkten i , j und k , erfüllen:

$$P_i^*_{(x,y)} = a + b \cdot x_i + c \cdot y_i$$

$$P_j^*_{(x,y)} = a + b \cdot x_j + c \cdot y_j$$

$$P_k^*_{(x,y)} = a + b \cdot x_k + c \cdot y_k$$

Damit hat man drei Gleichungen mit den drei Unbekannten a , b und c , die gelöst werden können. Als Matrixgleichung lautet dies:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} P_i^* \\ P_j^* \\ P_k^* \end{bmatrix} \quad (9.26)$$

Die Lösung dieser Gleichung, in die Gleichung über $P_{(x,y)}^*$ eingesetzt, ergibt eine Lösung der gesuchten Funktion. Für das Planungselement m kann die Potentialverteilung wie folgt dargestellt werden:

$$P_m^*(x, y) = W_i(x, y) \cdot P_i^* + W_j(x, y) \cdot P_j^* + W_k(x, y) \cdot P_k^*$$

Die Gewichtsfunktionen $W(x, y)$ sind im Gebiet G in den Richtungen x und y linear und unterliegen den Orthogonalbedingungen, d.h. es gilt:

$$W_n(x_m, y_m) = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

$$m, n \in i, j, k$$

Im Einzelnen kann gezeigt werden, dass gilt:

$$W_i(x, y) = \frac{1}{2\Delta} [(x_j \cdot y_k - x_k \cdot y_j) + (y_j - y_k) \cdot x + (x_k - x_j) \cdot y]$$

$$W_j(x, y) = \frac{1}{2\Delta} [(x_k \cdot y_i - x_i \cdot y_k) + (y_k - y_i) \cdot x + (x_i - x_k) \cdot y]$$

$$W_k(x, y) = \frac{1}{2\Delta} [(x_i \cdot y_j - x_j \cdot y_i) + (y_i - y_j) \cdot x + (x_j - x_i) \cdot y]$$

$$\text{mit: } \Delta = \frac{1}{2} \cdot [x_i(y_j - y_k) + x_j(y_k - y_i) + x_k(y_i - y_j)]$$

Δ ist der Flächeninhalt des Planungsdreieckes, und es gilt:

$$W_i(x, y) + W_j(x, y) + W_k(x, y) = 1 \quad (9.27)$$

P^* ist im gesamten Bereich G kontinuierlich. Wenn die Stützwerte an den Knotenpunkten bekannt sind, ist die Funktion im ganzem Gebiet darstellbar. Im Folgenden soll gezeigt werden, wie die Stützwerte P_i des Kontinuums so zu bestimmen sind, dass die Potentialwerte P_i^* des quantisierten Gebietes bestmöglich angepasst sind. Dies erfolgt nach dem GALERKIN-Verfahren. Für das Kontinuum gelten die aufgestellten Differentialgleichungen exakt. Im Fall der horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung gilt (siehe Gleichung 7.14, Seite 194):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial z_R}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial z_R}{\partial y} \right) = 0$$

Im quantisierten System wird aber dem gegenüber nur folgende Näherung gelten:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial z_R^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial z_R^*}{\partial y} \right) = r(x, y) \neq 0$$

Dabei wird $r(x, y)$ als Residuum bezeichnet. Das **Residuum** ist um so kleiner, je besser das Quantisierungsgebiet dem Kontinuum angepasst ist. Für den Fall unendlich kleiner Planungselemente bzw. unendlich großer Anzahl von Stützpunkten, Knotenpunkten und Planungselementen konvergiert die Näherungslösung P_i^* , bzw. hier konkret z_{Ri}^* , zur Lösung des Kontinuums P bzw. z_R oder, anders ausgedrückt, das Residuum wird Null.

Nach der Methode der gewichteten Residuen wird die Näherungslösung so gesucht, dass das Residuum im gewichteten Mittel verschwindet. Diese wird mit folgendem Ansatz für jedes Planungselement durchgeführt:

$$\iint_G W_i(x, y) \cdot r(x, y) dG = 0 \quad (9.28)$$

Unter der Voraussetzung, dass die Transmissibilität in den einzelnen Planungselementen konstant ist, kann mit der Definition des Residuums geschrieben werden:

$$\iint_G W_i(x, y) \cdot T \cdot \left(\frac{\partial^2 z_R^*}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_R^*}{\partial y^2} \right) dx \cdot dy = 0 \quad (9.29)$$

Dabei ist noch berücksichtigt worden, dass die Zeitabhängigkeit identisch Null sein soll. Dies trifft auf die stationären Prozesse zu. Aber auch die instationären Prozesse können so vorerst behandelt werden, da die Zeitabhängigkeit unabhängig von der Ortsquantisierung betrachtet wird (siehe Abschnitt 9.2 Methoden der Zeitquantisierung, Seite 269).

Dieses Flächenintegral muss für jeden Stützpunkt, bzw. Netzknoten gelöst werden. Man erhält somit n Gleichungen mit den n unbekanntenen Gewichtsfunktionen. Für die Näherungslösung z_R^* an den Netzknoten wurde ein linearer Ansatz gewählt, für den es aber keine zweite Ableitung gibt. Aus diesem Grund muss das Integral mit der **1. GREENSchen Formel** umgeformt werden. Allgemein lautet diese:

$$\iint_G \left[u \cdot \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) \right] dx dy = - \iint_G \left[\frac{\partial w}{\partial x} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial y} \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right] dx dy + \int_B u \frac{\partial w}{\partial n} dB \quad (9.30)$$

Darin bedeuten B der Rand des Gebietes und n die Einheitsnormale, die senkrecht auf dem Rand steht und nach außen gerichtet sein soll. $w(x, y)$ und $u(x, y)$ sind beliebige skalare Potentialfunktionen. Diese Gleichung, auf das Residuum angewendet, ergibt:

$$- \iint_G \left[T \cdot \left(\frac{\partial z_R^*}{\partial x} \cdot \frac{\partial W_i}{\partial x} + \frac{\partial z_R^*}{\partial y} \cdot \frac{\partial W_i}{\partial y} \right) \right] dx dy + \int_B T \cdot W_i \frac{\partial z_R^*}{\partial n} dB = 0 \quad (9.31)$$

Das Linienintegral über den Rand B beschreibt den potentialunabhängigen Durchfluss über den Rand und kann damit als Randbedingung für das Planungselement n betrachtet werden:

$$\int_B T \cdot W_i \frac{\partial z_R^*}{\partial n} dB = \int_B W_i \cdot q'_n dB = \dot{V}$$

wobei q'_n der spezifische Volumenstrom pro Längeneinheit und \dot{V} der Zufluss zum Knoten n bedeuten. In gleicher Weise können auch innere Randbedingungen wie z.B. Brunnen berücksichtigt werden.

Ähnlich wie bei der Methode der Finiten Differenzen entsteht auch hier bei der FEM ein hochdimensionales Gleichungssystem. Im Unterschied zur FDM erzeugt die FEM keine diagonalen Bandmatrizen, sondern es entsteht in Abhängigkeit von der Anzahl der sich berührenden Planungselemente eine unregelmäßige Matrizenstruktur. Dies führt zu einem erhöhten numerischen Aufwand bei der Lösung dieses Gleichungssystems.

9.2 Methoden der Zeitquantisierung

Ausgehend von der allgemeinen Form der horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung

$$\operatorname{div}(T \operatorname{grad} h) = -S \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{mit} \quad h = \left. \begin{array}{l} h \quad \text{gespannter} \\ z_R \quad \text{ungespannter} \end{array} \right\} \text{GWL}$$

muss unabhängig von der Behandlung der linken Seite der Gleichung, der Ortsfunktionalität, die rechte Seite, die Zeitabhängigkeit einer Quantisierung unterzogen werden. Die Quantisierung der Ortsabhängigkeit kann durch die im Abschnitt 9.1 beschriebenen Methoden erfolgen. Der zeitliche Differentialquotient muss in einen Differenzenquotienten überführt werden, da sonst keine einfache numerische Behandlung möglich ist. Nur durch diese Überführung ist der Aufbau eines entsprechenden Gleichungssystems wieder möglich. Für die Überführung des Differentialquotienten in einen Differenzenquotienten soll als erste Methode die Rückwärtsdifferenz als implizites Verfahren vorgestellt werden. Dabei wird

$$\frac{\partial h}{\partial t} \approx \frac{h_t - h_{t-\Delta t}}{\Delta t}$$

gesetzt.

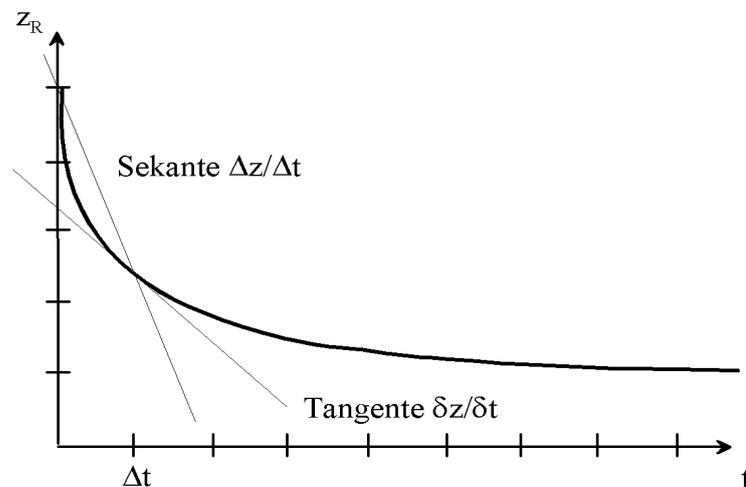


Abbildung 9.9: Verhältnis von Tangente zu Sekante bei einem typischen Absenkungsvorgang

Infolge der Einführung des zeitlichen Differenzenquotienten muss auch der Konvektionsanteil, d.h. die linke Seite der Gleichung, einem Zeitpunkt zugeordnet werden. Bei der Zuordnung des Zeitbezuges zur linken Seite der Differentialgleichung, d.h. des örtlichen Strömungsprozesses, werden verschiedene Verfahren zur Zeitquantisierung unterschieden (siehe Abbildung 9.9). Die wesentlichsten Unterscheidungen liegen zwischen den Ein- und Mehrschrittverfahren sowie zwischen den expliziten und impliziten Verfahren. Bei dem expliziten

Einschrittverfahren kann das Gleichungssystem direkt gelöst werden, da die Parameter aus dem vorhergehenden Zeitschritt bekannt sind. Das explizite Verfahren, auch als Vorwärtsdifferenz bezeichnet, besitzt jedoch den großen Nachteil, dass aus Gründen der mathematischen Stabilität nur sehr kleine Zeitschritte (in der Größenordnung von Minuten) realisierbar sind und damit für ein Simulationslauf eine extrem große Anzahl von Zeitschritten (Gesamtsimulationszeit dividiert durch die Zeitschrittgröße) bearbeitet werden muss. Das implizite Einschrittverfahren wird auch als Rückwärtsdifferenzenverfahren bezeichnet. Es liefert auch für große Zeitschritte stabile Lösungen und stellt somit das Standardverfahren für numerische Simulationssysteme dar. Zur Verringerung des Quantisierungsfehlers sind eine Reihe von Verfahren entwickelt worden (Mehrschrittverfahren, Predictor-Corrector-Verfahren, Verfahren höherer Ordnung, siehe auch Abbildung 9.10), so auch ein spezielles Extrapolationsverfahren von GRÄBER.

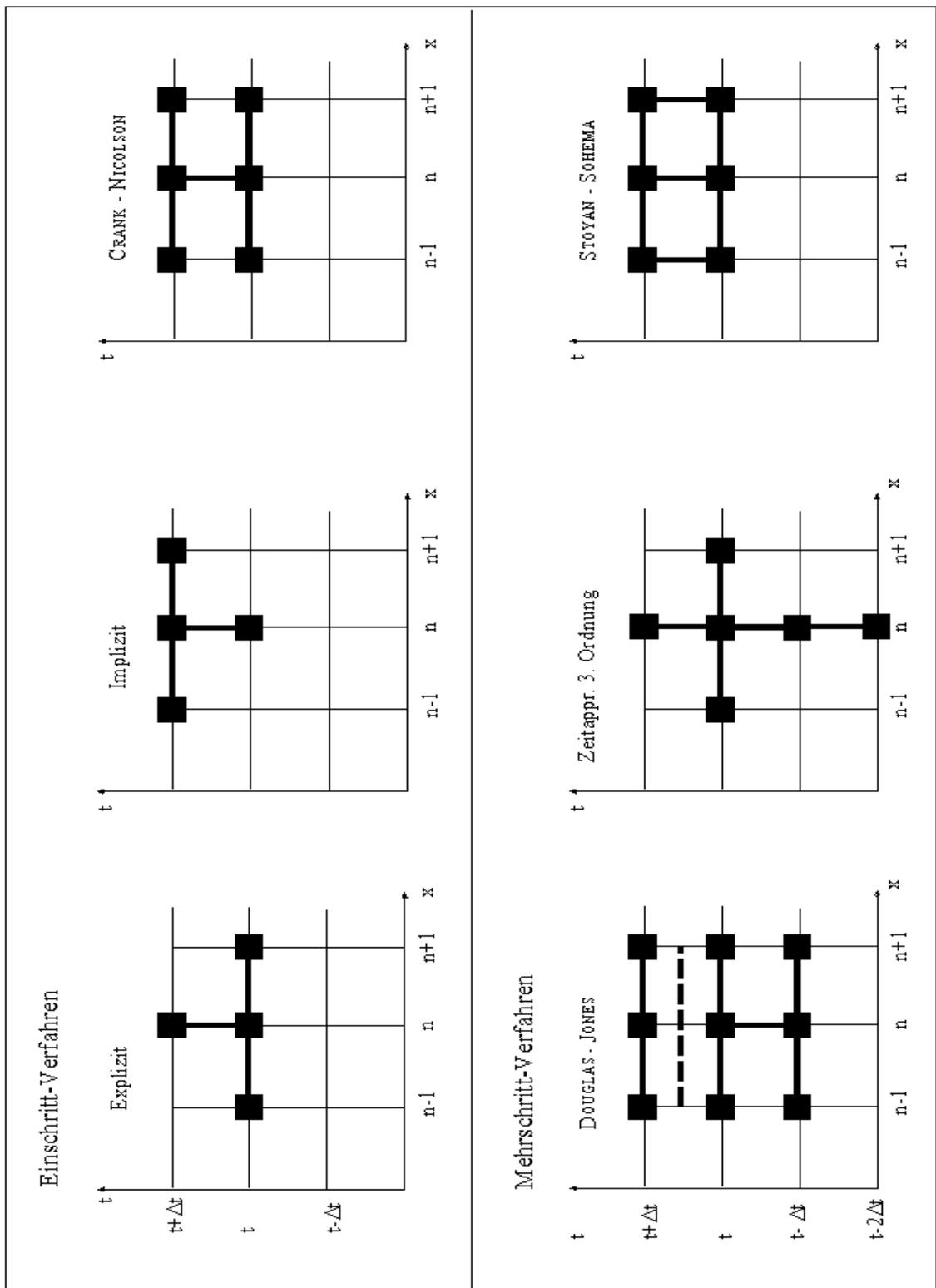


Abbildung 9.10: Parameterzuordnung bei Zeitquantisierung eines 1-D-Feldproblems

9.2.1 Rückwärtsdifferenz - Implizite Verfahren

Bei dem impliziten Einschrittverfahren, auch als Rückwärtsdifferenzenverfahren oder LIEB-MANN-Verfahren bezeichnet, wird der örtliche Strömungsteil der horizontalebene Grundwasserströmungsgleichung zum Zeitpunkt t betrachtet:

$$\operatorname{div}(T \operatorname{grad} h) = -S \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{mit } h = \left\{ \begin{array}{l} h \\ z_R \end{array} \right. \begin{array}{l} \text{gespannter} \\ \text{ungespannter} \end{array} \Bigg\} \text{GWL} \quad (9.32)$$

Nach der Überführung des zeitlichen Differentialquotienten in den Differenzenquotienten erhält man:

$$\operatorname{div}(T \operatorname{grad} h)|_t \approx -S \frac{h_t - h_{t-\Delta t}}{\Delta t} \quad (9.33)$$

Statt des Rundungszeichens wird meistens das Gleichheitszeichen verwendet, was eigentlich nicht exakt ist. Führt man auch auf der linken Seite wieder die Quantisierung durch und setzt entsprechend der physikalischen FDM-Methode die (Orts-)Leitwerte ein, so ergibt sich die Bilanzgleichung am Knoten n, m (siehe Abbildung 9.11). Dabei kann die Speicherwirkung (Aufnahme oder Abgabe) des Bodens als Volumenstrom definiert werden, der ein bestimmtes Wasservolumen im Zeitraum Δt , das Speichervolumen erzeugt. Analog zu dem Volumenströmen der quantisierten Strömungsgleichung kann ein sog. Zeitleitwert $G_{Zeit\ t,n,m}$ eingeführt werden, der durch die Materialeigenschaften und Geometrie des Bodenelementes bestimmt wird.

Der Ausdruck

$$S \Delta x_n \Delta y_m = C_{n,m} \quad (9.34)$$

wird als hydraulische Speicherwirkung oder Kapazität bezeichnet. Für den Quotienten aus Kapazität und Zeitschritt wird der so genannte Zeitleitwert

$$\frac{S \Delta x_n \Delta y_m}{\Delta t} = G_{z\ n,m} = \frac{C_{n,m}}{\Delta t} \quad (9.35)$$

eingeführt. Dieser repräsentiert im Zusammenhang mit der zeitlichen Potentialdifferenz den Volumenstrom, der in folge der Speicherwirkung vom Grundwasserleiter innerhalb des Zeitschrittes Δt abgegeben bzw. aufgenommen wird.

$$\dot{V}_{Zeit\ n,m} = G_{Zeit\ t,n,m} (h_{t,n,m} - h_{\Delta t,n,m}) \quad (9.36)$$

$$\begin{aligned} & \left[\dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} + \dot{V}_{Zeit\ n,m} \right]_t = 0 \\ & \left[\dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} \right]_t + G_{Zeit\ t,n,m} (h_{t,n,m} - h_{\Delta t,n,m}) = 0 \\ & \underbrace{\left[\dot{V}_{n-1,n} + \dot{V}_{n+1,n} + \dot{V}_{m-1,m} + \dot{V}_{m+1,m} \right]_t + G_{Zeit\ t,n,m} \cdot h_{t,n,m}}_{\text{unbekannte Größen}} = \underbrace{G_{Zeit\ t,n,m} \cdot h_{\Delta t,n,m}}_{\text{bekannte Größen}} \end{aligned} \quad (9.37)$$

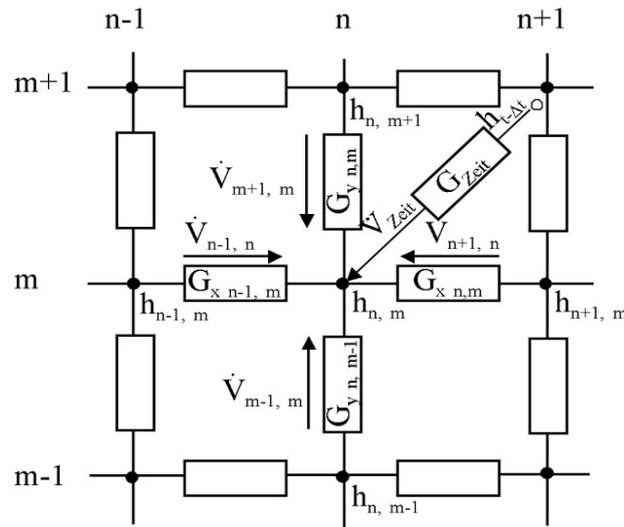


Abbildung 9.11: Berücksichtigung der Zeitquantisierung

$$\begin{aligned}
 & \left[\begin{array}{l} h_{n-1,m}(-G_{x\ n-1,m})+ \\ h_{n,m-1}(-G_{y\ n,m-1})+ \\ h_{n,m}(G_{x\ n-1,m} + G_{x\ n,m} + G_{y\ n,m-1} + G_{y\ n,m})+ \\ h_{n,m+1}(-G_{y\ n,m})+ \\ h_{n+1,m}(-G_{x\ n,m}) \end{array} \right] |t \\
 & \qquad \qquad \qquad = -S \Delta x_n \Delta y_m (h_{n,m\ t} - h_{n,m\ t-\Delta t}) \cdot \frac{1}{\Delta t}
 \end{aligned} \tag{9.38}$$

Führt man den Zeitleitwert in das obere Gleichungssystem ein und ordnet innerhalb einer Zeile die bekannten und unbekannt Variablen, so erhält man folgendes System, bei dem auf der rechten Seite nur noch bekannte Größen stehen:

$$\begin{aligned}
 & \left[\begin{array}{l} h_{n-1,m}(-G_{x\ n-1,m})+ \\ h_{n,m-1}(-G_{y\ n,m-1})+ \\ h_{n,m}(G_{x\ n-1,m} + G_{x\ n,m} + G_{y\ n,m-1} + G_{y\ n,m} + G_{z\ n,m})+ \\ h_{n,m+1}(-G_{y\ n,m})+ \\ h_{n+1,m}(-G_{x\ n,m}) \end{array} \right] |t \\
 & \qquad \qquad \qquad = h_{n,m\ t-\Delta t}(G_{z\ n,m})
 \end{aligned} \tag{9.39}$$

Damit ist das pentadiagonale Gleichungssystem erhalten geblieben. Auf der rechten Seite ist eine aus dem vorhergehenden Zeitschritt bekannte Größe hinzugekommen. Auch die Hauptdiagonale wurde um den Summanden $G_{z_{n,m}}$ erweitert. Die so entstandene Matrixgleichung ist auf Grund der Potentialabhängigkeit der Leitwerte, insbesondere der Transmissibilitäten bei ungespannten Grundwasserleitern, nicht explizit lösbar. Es müssen deshalb Iterationen durchgeführt werden. Im ersten Schritt werden die Leitwerte $G^{(1)}$ entsprechend der Anfangswasserstände ($z_{Rt-\Delta t}$) berechnet. Für Grundwasserabsenkungsvorgänge bedeutet dies, dass die Transmissibilitäten und damit auch die Leitwerte zu groß angenommen werden. Die Matrix lässt sich mit diesen Werten lösen, und man erhält Wasserstände $z_{Rt}^{(1)}$, die gegenüber der realen Lage zu niedrig sind. Mit dieser ersten Näherung $z_{Rt}^{(1)}$ können verbesserte Leitwerte $G^{(2)}$ berechnet werden, welche zur zweiten Näherung der Wasserhöhe $z_{Rt}^{(2)}$ führen. Diese liegt über der wahren Lösung, da die Leitwerte zu klein angenommen wurden und damit zu wenig Abfluss realisiert wurde. Die Lösungen nähern sich der wahren Lösung in Form einer gedämpften Schwingung. Dieser Iterationsprozess wird so lange durchgeführt, bis die Änderungen zwischen zwei Iterationen eine Fehlerschranke nicht mehr überschreiten. Dann erhält man die Lösung für den Zeitschritt Δt . Trotz der Iteration innerhalb des Zeitschrittes bleibt ein Quantisierungsfehler, der proportional mit Δt wächst, da anstatt der Tangente im Punkt t die Sekante zwischen den Punkten t und $t - \Delta t$ berechnet wird.

Da sich die Grundwasserströmungsprozesse entsprechend einer abklingenden e-Funktion asymptotisch dem stationären Endzustand nähern, ist der Zeitquantisierungsfehler nicht nur von der Schrittweite Δt , sondern auch von der Dynamik des Prozesses abhängig. In den Abbildungen 9.12 und 9.13 sind für das Beispiel der eindimensionalen Grabenströmung für unterschiedliche Zeitschrittweiten die Ergebnisse zu definierten Zeiten dargestellt. Dabei werden die Ergebnisse mit der Schrittweite $\frac{\Delta t}{24}$ als exakt angenommen. Man erkennt deutlich die starke Abhängigkeit des Zeitquantisierungsfehlers vom zeitlichen Gradienten. In Abbildung 9.14 ist das Konvergenzverhalten der Lösung in Abhängigkeit von der Zeitschrittweite zu sehen. Gleichzeitig erkennt man die kleinen Quantisierungsfehler des Extrapolationsverhaltens.

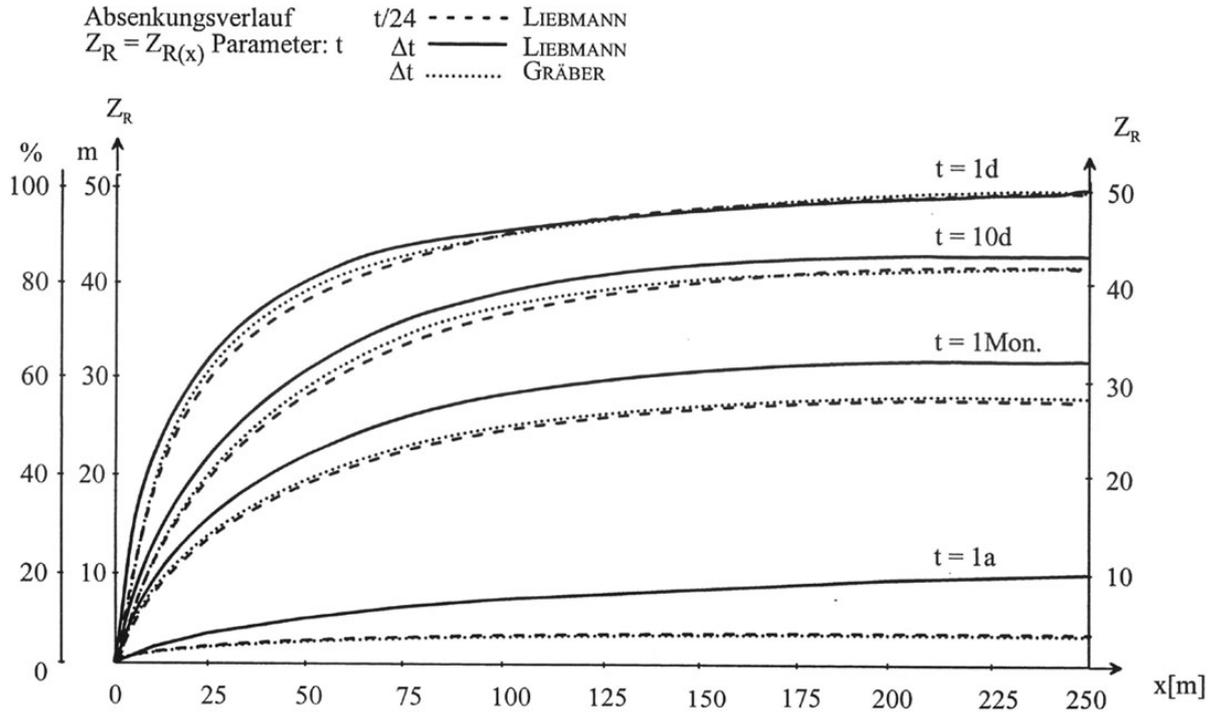


Abbildung 9.12: Zeitquantisiert berechnete Grundwasserabsenkung einer Grabenanströmung

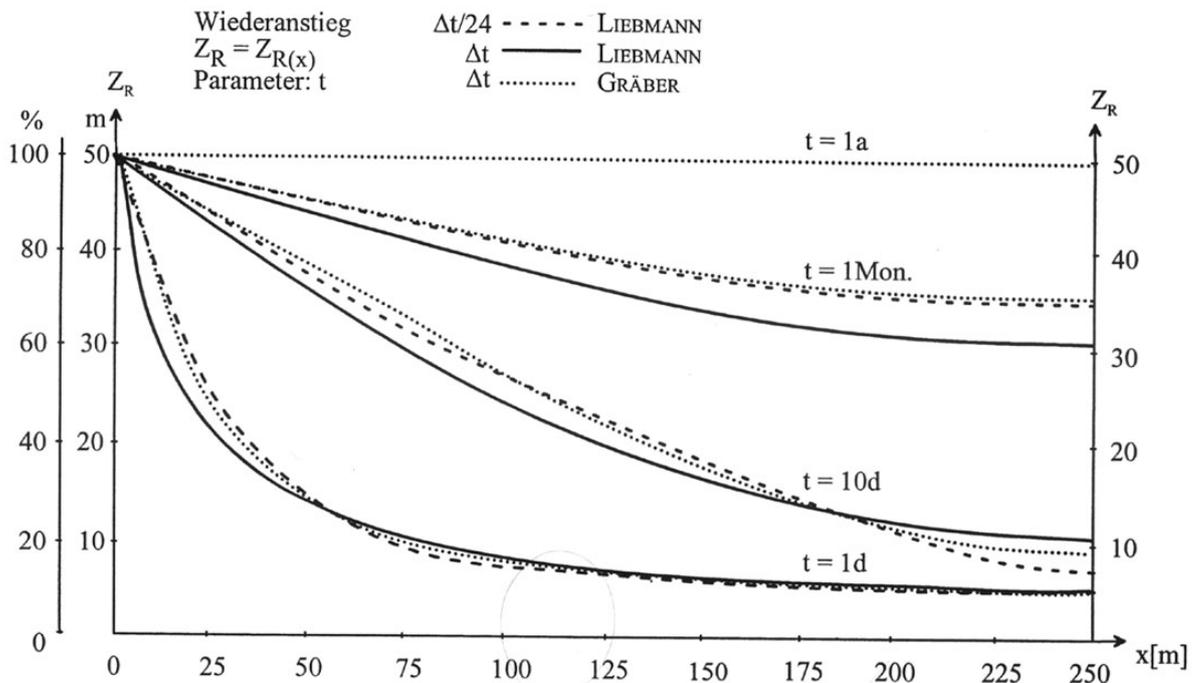


Abbildung 9.13: Zeitquantisiert berechneter Grundwasseranstieges einer Grabenströmung

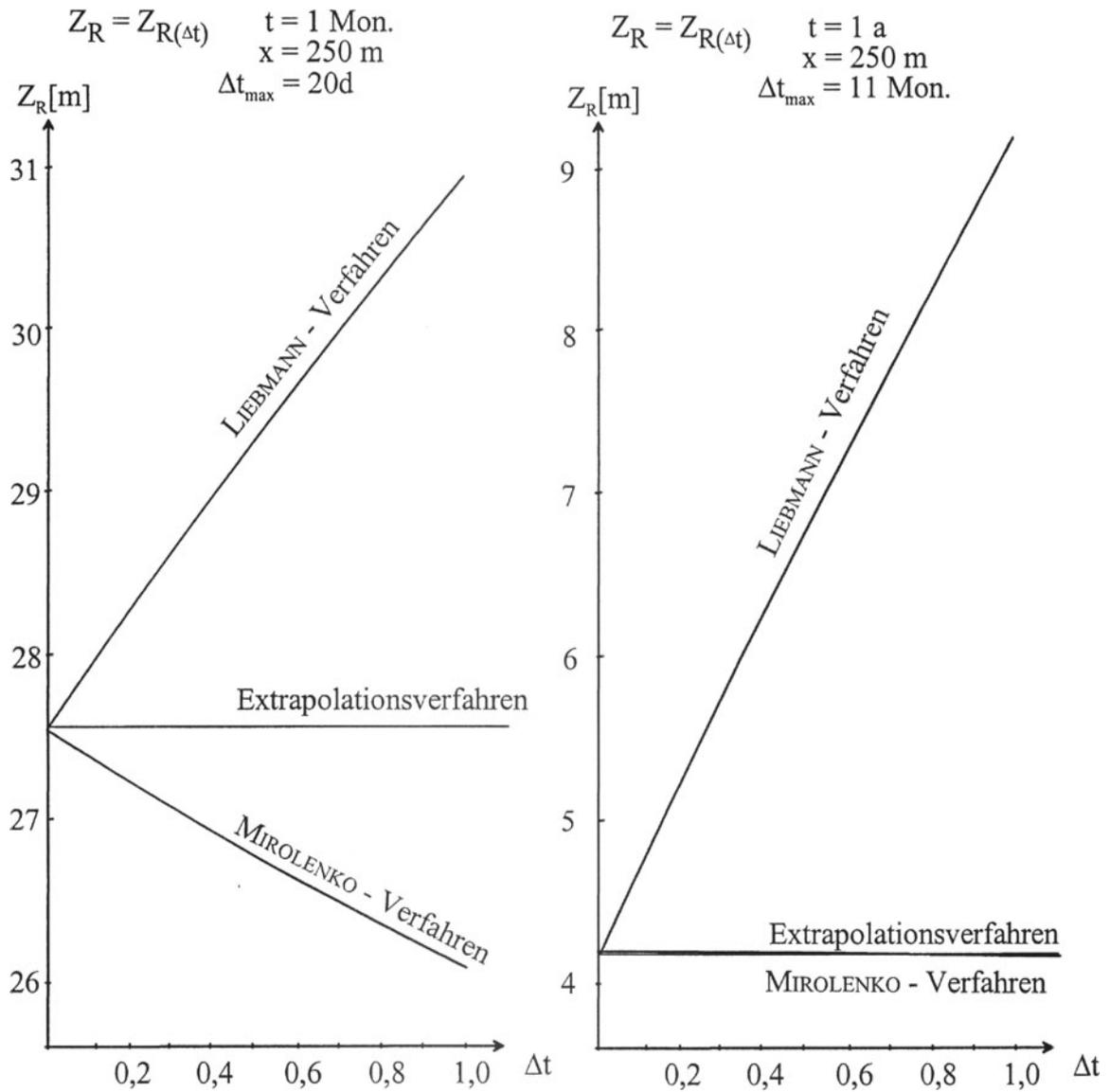


Abbildung 9.14: Abhängigkeit des Zeitquantisierungsfehlers von der Zeitschrittweite

9.2.2 Gemischte Verfahren

Für die Zeitquantisierung wird oft vereinfachend, wie bereits beschrieben, die Rückwärtsdifferenz angesetzt. Das bedeutet, dass die Parameter für den Zeitpunkt t zu bestimmen sind. Dies führt bei nichtlinearen Parametern, wie sie bei ungespannten Grundwasserverhältnissen auftreten, zu Schwierigkeiten, da sie iterativ nachgeführt werden müssen. Es gibt deshalb eine Reihe von Versuchen, durch gewichtete Zuordnung sowohl der partiellen Ableitung des Ortes als auch der Parameter zu quantisierten Zeitpunkten, eine Fehlerrückführung zu erzielen. Allgemein kann man schreiben:

$$\begin{aligned} & (1 - \gamma) \operatorname{div} (T \operatorname{grad} h)_{|t-\Delta t} + \gamma \operatorname{div} (T \operatorname{grad} h)_{|t} \\ & = ((1 - \gamma) S_{|t-\Delta t} + \gamma S_{|t}) \frac{(h_t - h_{t-\Delta t})}{\Delta t} \end{aligned} \quad (9.40)$$

In Abhängigkeit von der Wahl des Verfahrens (siehe Abbildung 9.10, Seite 271) erhält man die folgenden γ -Werte:

$$\gamma = \begin{cases} 0 & \text{explizites Verfahren} \\ \frac{1}{2} & \text{CRANK-NICOLSON-Schema} \\ \frac{2}{3} & \text{GALERKIN-Wichtung} \\ 1 & \text{implizites Verfahren} \end{cases}$$

Neben den Einschrittverfahren (auch bei auftretenden Iterationszyklen), bei denen nur die Zeitpunkte t und $t - \Delta t$ eine Rolle spielen, werden für die Simulation häufig Mehrschrittverfahren zur Verringerung des Zeitquantisierungsfehlers benutzt. Bekannt ist das Predictor-Corrector-Verfahren. Beim DOUGLAS-JONES-Verfahren, einem Zwei-Schritt-Verfahren, wird nach dem impliziten Lösungsschema ($\gamma = 1$) ein Halbschritt $\frac{\Delta t}{2}$, bei Ansatz aller Parameter zur Zeit $t - \Delta t$, absolviert (Predictor-Schritt) und $h_{t-\Delta t/2}$ ermittelt. Das CRANK-NICOLSON-Schema ($\gamma = \frac{1}{2}$) realisiert einen Gesamtschritt Δt (Corrector-Schritt), wobei alle Parameter zum Zeitpunkt $t - \frac{\Delta t}{2}$ angesetzt werden (siehe auch Abschnitt 5.4.1 Numerische Integration, Seite 156). Sehr hohe Approximationsgenauigkeiten lassen sich auch dadurch erzielen, dass nicht nur die Zeitableitungen am Ortsquantisierungspunkt $P_{n,m}$, sondern auch an den Nachbarknoten Berücksichtigung finden. In einfachster Form setzt man entsprechend der SIMPSONSchen Regel (am Beispiel des eindimensionalen Falles):

$$\frac{dh}{dt} \approx \frac{1}{6} \left(\frac{dh}{dt} \Big|_{n-1} + \frac{dh}{dt} \Big|_n + \frac{dh}{dt} \Big|_{n+1} \right) \quad (9.41)$$

Von STOYAN wird ein spezielles Schema vorgeschlagen, bei dem alle partiellen Ableitungen einer gesteuerten Wichtung unterliegen. Damit wird eine sehr stabile und genaue numerische

Lösung erzielt, die in die analytische Lösung für den Fall der reinen Konvektion übergeht. Der Nachteil dieser Verfahren besteht darin, dass dabei versucht wird, die Auswirkungen der Zeitquantisierungsfehler durch die Beeinflussung des Restes der Differentialgleichung, meist der Parameter des örtlichen Konvektionsterms (die rechte Seite der Differentialgleichung), zu verringern. Damit bleibt die Ursache des Fehlers unberührt. Dies führt im Allgemeinen zu keiner befriedigenden Lösung des Problems und kann unter Umständen zu numerischen Instabilitäten führen.

9.2.3 Extrapolationsverfahren

Bei dem Extrapolationsverfahren nach GRÄBER wird eine sehr effektive Methode zur Verringerung des Zeitquantisierungsfehlers angegeben. Für die Ausgleichsprozesse, die bei der horizontalebene Grundwasserströmung entstehen, gilt, dass die Funktion $h = h(t)$ zwischen den Zeitpunkten $t - \Delta t$ und t stets stetig monoton steigend bzw. fallend ist. Daraus ergibt sich, dass die Sekante der Rückwärtsdifferenz betragsmäßig immer kleiner als die Tangente am Punkt t ist. Somit ergibt sich folgende Ungleichung:

$$\left| \frac{dh}{dt} \right| \leq \left| \frac{h_t - h_{t-\Delta t}}{\Delta t} \right|$$

Durch Einführung eines Korrekturfaktors kann diese Ungleichung in eine Gleichung überführt werden:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{h_t - h_{t-\Delta t}}{K \cdot \Delta t} \quad (9.42)$$

Damit verringert sich der Zeitquantisierungsfehler und kann durch geeignete Wahl von K gegen Null konvergieren. Definitionsgemäß ist $K \geq 1$. Näherungsweise gilt die Annahme, dass sich der Ortspunkt $P_{n,m}$ durch folgendes Ersatzschaltbild (siehe Abbildung 9.15) darstellen lässt. Dabei repräsentieren H das Ersatzpotential (Randbedingung 1. Art) und R einen Ersatzwiderstand, der die hydraulischen Eigenschaften des Grundwasserleiters zwischen den Nachbarknoten und den betrachteten Knoten zusammenfasst. Das kann z.B. das gesamte Quantisierungsnetzwerk sein oder eine Randbedingung 1. Art. C_t stellt die in diesem Zeitschritt wirksame Speicherwirkung des Grundwasserleiters dar. Für diese Ersatzschaltung er-

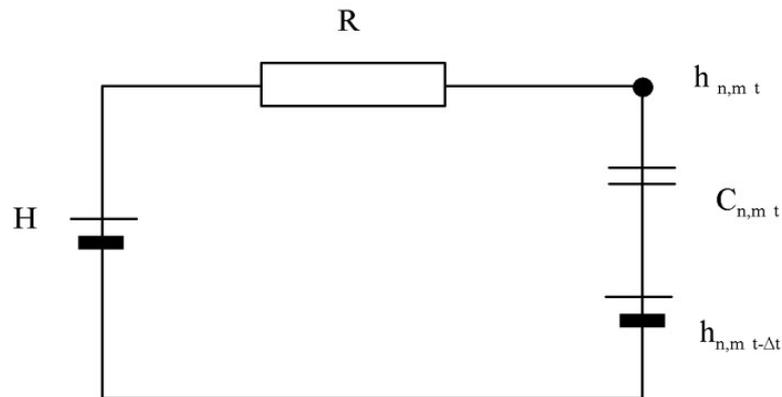


Abbildung 9.15: Ersatzschaltbild des Ortspunktes $P_{n,m}$

hält man die Lösung (siehe Abschnitte 5.2.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung, Seite 117 und 12.1 Übertragungsverhalten mit Verzögerung erster Ordnung, Seite 344):

$$h_{n,m,t} = (H - h_{n,m,t-\Delta t}) \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau}} \right) \quad (9.43)$$

wobei τ als Zeitkonstante $\tau = RC$ bezeichnet wird. An Stelle der Kapazität C_t kann jetzt ein Ersatzwiderstand R_z berechnet werden, der den gleichen Grundwasserfluss erzeugt wie

die Kapazität C_t zum Zeitpunkt t :

$$R_{z n, m t} = \frac{h_{n, m t}}{\dot{V}} \quad \text{mit:} \quad \dot{V} = C_t \frac{dh_{n, m t}}{dt} \quad (9.44)$$

$$= \frac{\tau \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\tau}} \right)}{C_{n, m t} e^{-\frac{\Delta t}{\tau}}}$$

Die Schwierigkeit besteht darin, die Zeitkonstante τ zu bestimmen. Ein analytischer Ausdruck lässt sich dafür nicht finden. Bestimmt wird deshalb der Quotient $\frac{\Delta t}{\tau}$ aus der Verhaltensweise des Systemes während des Ausgleichvorgangs. Dazu simuliert man das System in einem ersten Schritt nach der Rückwärtsdifferenz, d.h. mit dem Zeitwiderstand $R_{z n, m t} = \Delta t / C_{n, m t}$. Die sich daraus ergebende Veränderung zwischen den Potentialen $h_{n, m t}$ und $h_{n, m t - \Delta t}$ dient als Grundlage für die Berechnung der Zeitkonstante. Für den Fall der Absenkung ($h_{n, m t} \geq h_{n, m t - \Delta t}$) ergibt sich:

$$R_{z n, m t} = \frac{\Delta t}{C_{n, m t}} \frac{h_{n, m t - \Delta t}}{h_{n, m t}} \quad (9.45)$$

bzw.

$$G_{z n, m t} = \frac{C_{n, m t}}{\Delta t} \frac{h_{n, m t}}{h_{n, m t - \Delta t}}$$

und für einen Grundwasseranstiegsprozess:

$$R_{z n, m t} = \frac{\Delta t}{C_{n, m t}} \frac{(h_{\max} - h_{n, m t - \Delta t})}{(h_{\max} - h_{n, m t})} \quad (9.46)$$

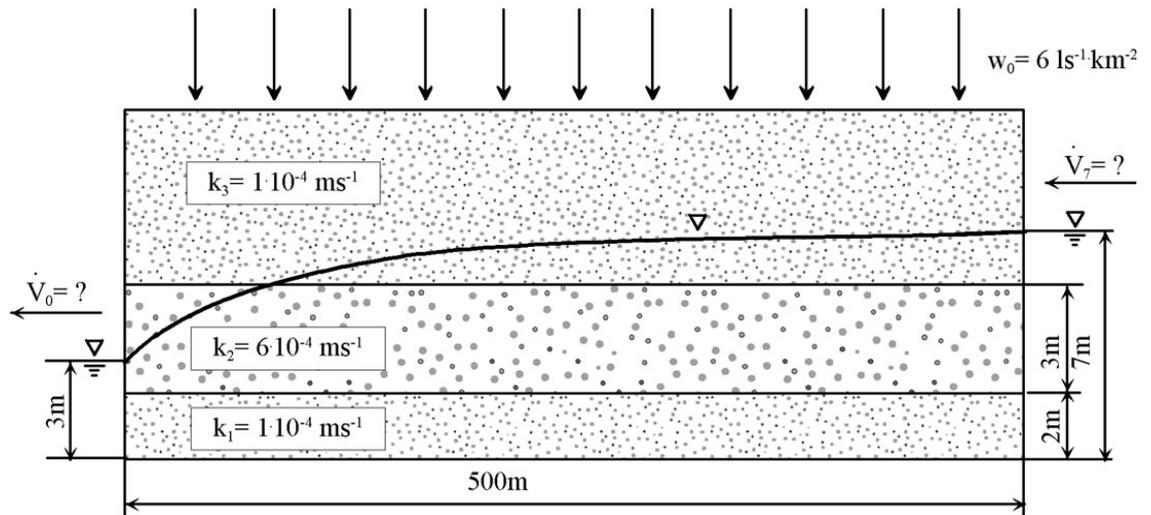
bzw.

$$G_{z n, m t} = \frac{C_{n, m t}}{\Delta t} \frac{(h_{\max} - h_{n, m t})}{(h_{\max} - h_{n, m t - \Delta t})}$$

Hierbei entstehen für den korrigierten Zeitwiderstand zwei relativ einfache Ausdrücke. Diese Lösungen sind numerisch stabil und zeichnen sich durch ein gutes Konvergenzverhalten und einen sehr kleinen Quantisierungsfehler aus. Dieser entspricht mindestens dem, der bei Anwendung der Rückwärtsdifferenz mit einem 24-fach kleineren Zeitschritt entstanden wäre (siehe Abbildung 9.14, Seite 276). Bei Verwendung größerer Zeitschritte bedeutet das eine wesentliche Rechenzeiteinsparung.

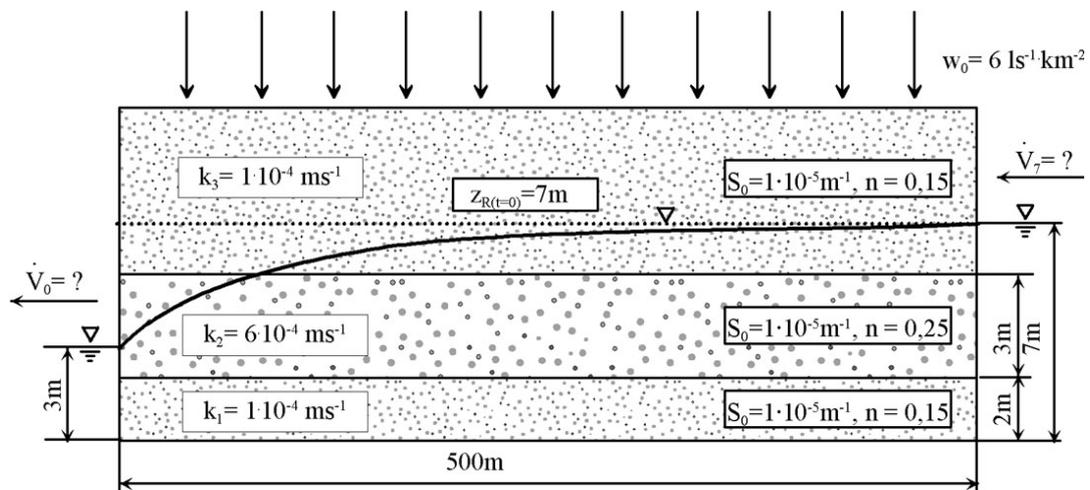
9.3 Aufgaben zur numerischen Berechnung

1. Berechnen Sie mittels einer eindimensionalen stationären Grabenströmung die Lage der freien Oberfläche in Abhängigkeit von x , den Abfluss aus dem Oberwasser und den Zufluss zum Unterwasser (siehe Abbildung 1).
Verwenden Sie dabei fünf Quantisierungselemente.



Geschichteter Grundwasserleiter mit stationärem Strömungsregime

2. Berechnen Sie mittels einer eindimensionalen instationären Grabenströmung die Lage der freien Oberfläche in Abhängigkeit von x und t (0 bis $2d$), den Abfluss aus dem Oberwasser und den Zufluss zum Unterwasser (siehe Abbildung 2).
Verwenden Sie dabei fünf Ortsquantisierungselemente und fünf Zeitschritte.
Wählen sie die Zeitschrittgröße entsprechend des zu erwartenden Gradienten.

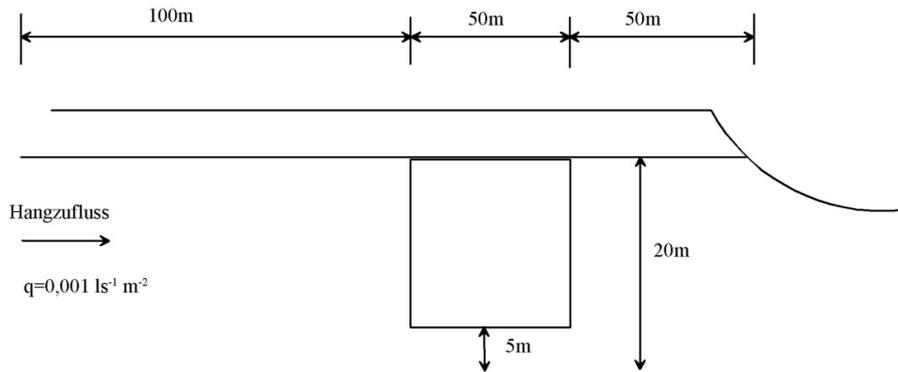


Geschichteter Grundwasserleiter mit instationärem Strömungsregime

3. In einem Grundwasserleiter soll ein Tunnel (U-Bahn) parallel zu einem Fluss eingebaut werden (siehe Abbildung 3).

Berechnen Sie, zu welchen Grundwasserstandsänderungen es für den stationären Fall durch diesen Einbau kommt.

Wählen Sie dazu ein geeignetes grobes Quantisierungsschema.



Einbau eines Tunnelbauwerkes in einem Grundwasserleiter

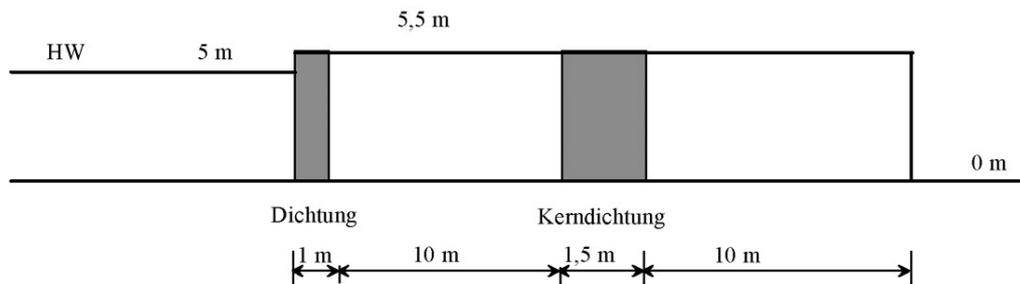
4. In einer Flussniederung soll mittels eines Deichbauwerkes (siehe Abbildung 4) das Poldergebiet vor Hochwasser geschützt werden (entsprechend vereinfachtem Schema).

Deich: $k = 10^{-4} \frac{m}{s}$, $n_0 = 0,15$, $S_0 = 0,002 m^{-1}$;

Dichtungsmaterial: $k = 10^{-5} \frac{m}{s}$; $n_0 = 0,05$; $S_0 = 0,001 m^{-1}$

- a) Entwickeln Sie ein einfaches diskretisiertes Schema zur Abschätzung der Grundwasserströmungsprozesse.

- b) Wieviel Wasser fließt pro Meter Deichlänge in das Poldergebiet?



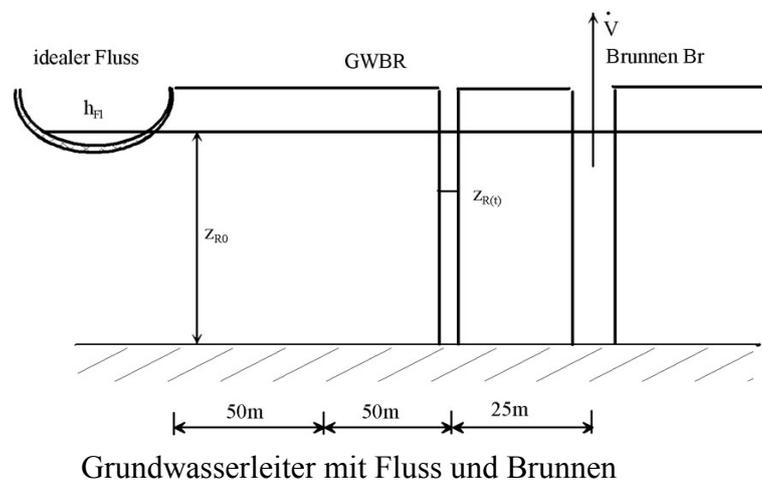
Deichbauwerk mit Kerndichtung

5. Für ein Uferfiltratwasserwerk sollen die zu erwartenden Grundwasserströmungsverhältnisse simuliert werden (siehe Abbildung 5).

Gegeben: $\dot{V} = 0,001 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, $S_0 = 0,0001 \text{ m}^{-1}$, $n_0 = 0,25$, $k = 0,001 \text{ m s}^{-1}$, $z_{R(t=0)} = 10 \text{ m}$,

$h_{Fl} = 10 \text{ m}$, $M = 15 \text{ m}$, $b = 1 \text{ m}$

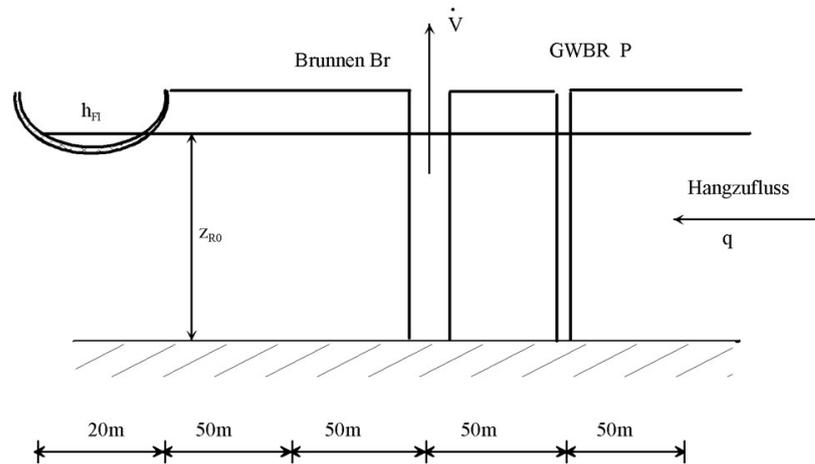
- Entwickeln Sie ein einfaches Quantisierungsschema mit drei Knotenpunkten zur Abschätzung der Strömungsprozesse im Grundwasserleiter entsprechend der vorgegebenen Geometrie.
- Stellen Sie die drei Knotengleichungen für eine instationäre Strömungsberechnung auf.
- Berechnen Sie den Wasserstand $z_{R(t)}$ im GWBR für den Zeitpunkt $t = 1 \text{ d}$.



6. Für ein Uferfiltratswasserwerk (siehe Abbildung 6) mit parallelem Strömungsregime ist ein numerisches Grundwasserströmungsmodell aufzubauen. Der Fluss soll dabei als idealisierte Randbedingung berücksichtigt werden.

$$k = 10^{-3} \frac{m}{s}; h_{Fl} = 15m; z_{R0} = 15m; S = 0,25; \dot{V} = 50 \frac{l}{s}; q = 0,001 \frac{l}{sm^2}; b = 100m;$$

$$k_{Kolm} = 5 \cdot 10^{-5} \frac{m}{s}; M_{Kolm} = 1m; B = 6,357m$$



Wirkung eines Flusses und eines Hangzuflusses auf den Grundwasserleiter

- Wählen Sie ein geeignetes vereinfachtes Quantisierungsschema mit maximal fünf Elementen, damit der Wasserstand am Pegel P für den stationären Fall möglichst genau berechnet wird.
- Formulieren Sie die Bilanzgleichungen an den Mittelpunkten der Elemente und stellen Sie diese in Matrixform dar.
- Berechnen Sie die hydraulischen Leitwerte für den Strömungsanteil.
- Wie verändern sich das Gleichungssystem und das Ergebnis, wenn der Fluss nicht idealisiert wird, sondern die Unvollkommenheit und eine Kolmation berücksichtigt werden?

Skizzieren Sie den Lösungsansatz und schätzen Sie das Ergebnis grob ab.

Kapitel 10

Simulationsprogrammssystem ASM

Aufgaben

1. Simulieren Sie die Absenkung für die gegebenen Punkte im Abstand r und die Zeiten t infolge einer Wasserförderung \dot{V} im Brunnen für folgenden Grundwasserleiter und stellen Sie das Ergebnis grafisch dar:

$$k = 1 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s}; M = 10m; S = 0,001; a = \frac{S}{T} = 0,1 \frac{s}{m^2}; r_0 = 0,25m; \dot{V} = 0,015 \frac{m^3}{s};$$

$$h_n = 16m;$$

$$r = 5m; 10m; 20m; 50m$$

$$t = 1min; 2min; 5min; 10min; 20min; 30min; 45min; 60min; 90min; 120min$$

2. Simulieren Sie für den o.g. Grundwasserleiter die Absenkung im Punkt ($r = 10m$) aller $10min$ bis maximal $100min$, wenn der Volumenstrom des Förderbrunnens folgender Zeitstaffelung unterliegt und stellen Sie das Ergebnis grafisch dar:

Volumenstrom [$\frac{m^3}{s}$]	0,005	0,010	0,015	0,020	0,025	0,030	0,000
Förderbeginn [min]	0	10	20	30	40	50	60

3. In einem Grundwasserleiter in der Nähe eines Flusses soll eine Baugrube abgesenkt werden. Die Mitte der Baugrube ist $100m$ vom Fluss entfernt, die Entwässerungsbrunnen $80m$. Es sind drei Brunnen parallel zum Fluss angeordnet, die jeweils $25m$ voneinander entfernt sind. Die Brunnen besitzen einen Durchmesser von $r_0 = 0,3m$ und fördern mit jeweils $\dot{V} = 0,015 \frac{m^3}{s}$.

Der Fluss besitzt eine Breite von $B = 20m$ und eine Kolmationsschicht von $k' = 3 \cdot 10^{-6} \frac{m}{s}; M' = 1m$.

Der Grundwasserleiter hat folgende Eigenschaften:

$$k = 5 \cdot 10^{-4} \frac{m}{s}; n_0 = 0,20; h_n = 15m; M = 20m.$$

Wird nach zehn Tagen im Zentrum der Baugrube die Zielabsenkung von $2,5m$ erreicht?

4. Überprüfen Sie mittels des Simulationsprogramms ASM, ob der Mittelpunkt der Baugrube nach einer Zeit von 7 Tagen bei einer Förderleistung von $\dot{V} = 0,01 \frac{m^3}{s}, r_0 = 0,30m$ mit einer Sicherheit von $0,5m$ entwässert ist (siehe Abbildung 10.1).
5. Aus einem Brunnen, der an einem idealen Fluss liegt ($Br_{(100m,500m)}$) wird ein konstanter Volumenstrom von $25 \frac{l}{s}$ gefördert. Der Brunnen hat einen Radius von $r_0 = 0,35m$. Der Grundwasserleiter ist durch folgende Parameter gekennzeichnet:
 $h_n = 15m, M = 17m, k = 1 \cdot 10^{-3} \frac{m}{s}, S_0 = 0,0002, n_0 = 0,25$.
 Simulieren Sie den stationären Endzustand (Anteil der zeitlichen Funktionalität soll kleiner als $0,001$ sein) für den Punkt ($P_{(600m,200m)}$). Ab wann ist mit ihm zu rechnen?

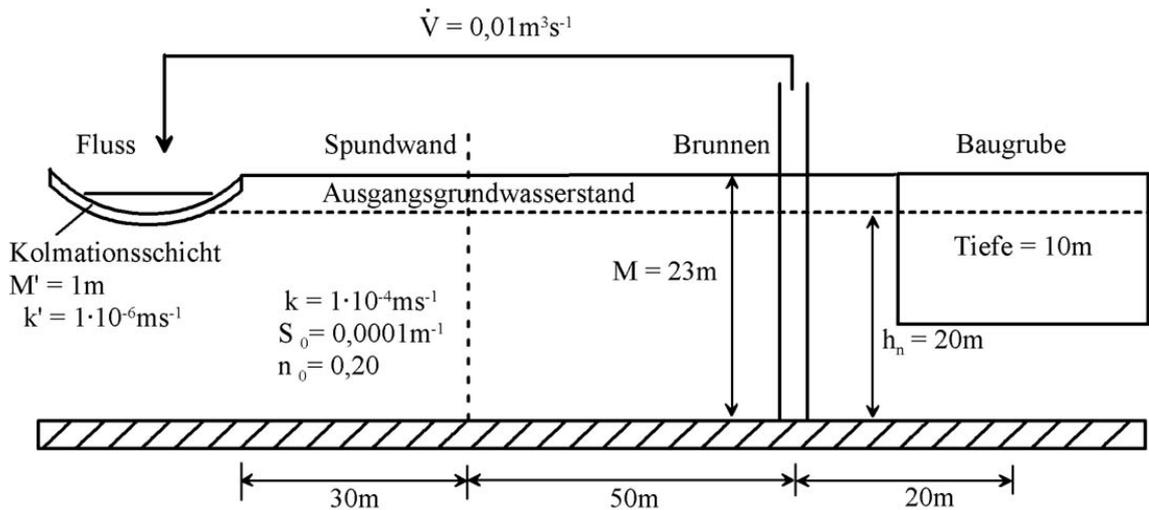


Abbildung 10.1: Grundwasserleiter mit Brunnen und Baugrube

6. Simulieren Sie folgende eindimensionale Grundwasserströmungen:

- a) Simulieren Sie mittels einer eindimensionalen stationären Grabenströmung (siehe Abbildung 10.2) die Lage der freien Oberfläche in Abhängigkeit von x und ermitteln Sie den Abfluss aus dem Oberwasser und den Zufluss zum Unterwasser. Verwenden Sie dabei fünf Quantisierungselemente.

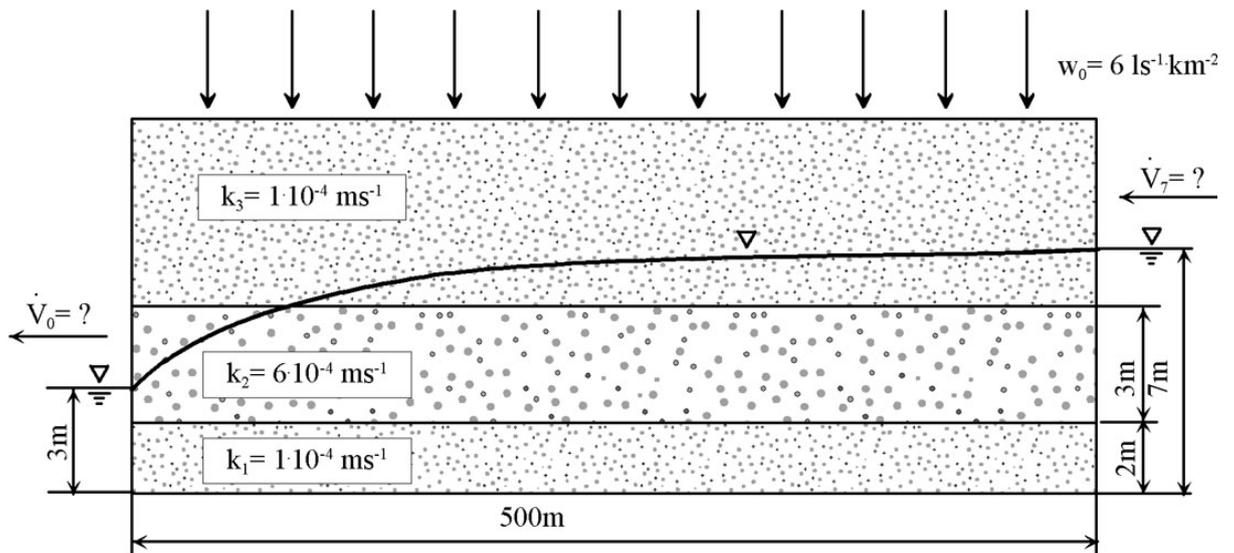


Abbildung 10.2: Geschichteter Grundwasserleiter mit stationärem Strömungsregime

- b) Simulieren Sie mittels einer eindimensionalen instationären Grabenströmung (siehe Abbildung 10.3) die Lage der freien Oberfläche in Abhängigkeit von x und der Zeit t .
7. In einem Grundwasserleiter soll ein Tunnel (U-Bahn) parallel zu einem Fluss eingebaut werden (siehe Abbildung 10.4). Simulieren Sie, zu welchen Grundwasserstands-

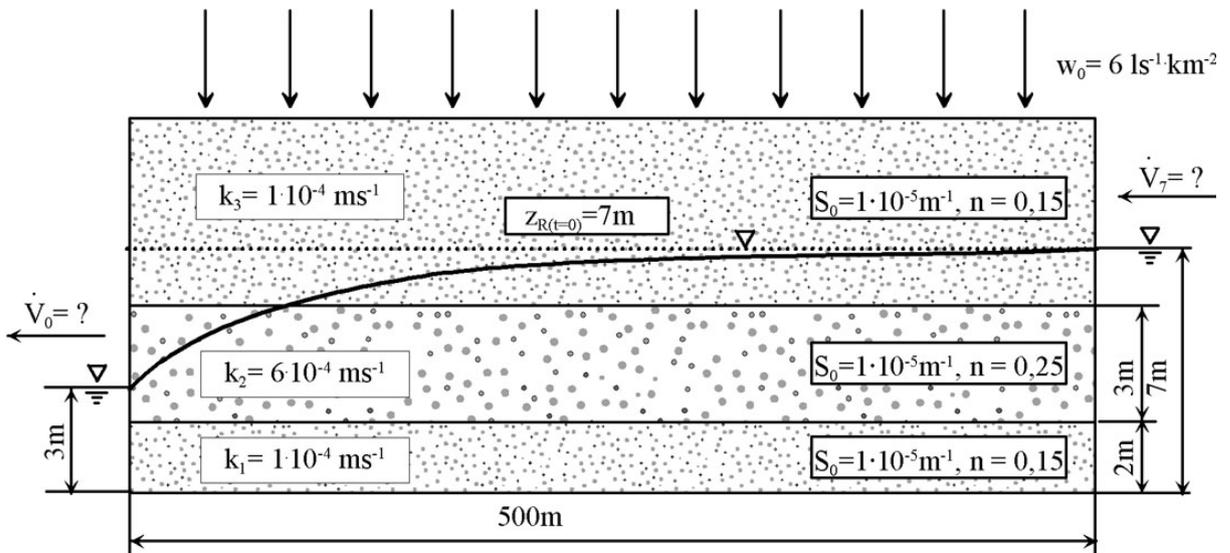


Abbildung 10.3: Geschichteter Grundwasserleiter mit instationärem Strömungsregime

änderungen es für den stationären Fall durch diesen Einbau kommt. Wählen Sie dazu ein geeignetes grobes Quantisierungsschema.

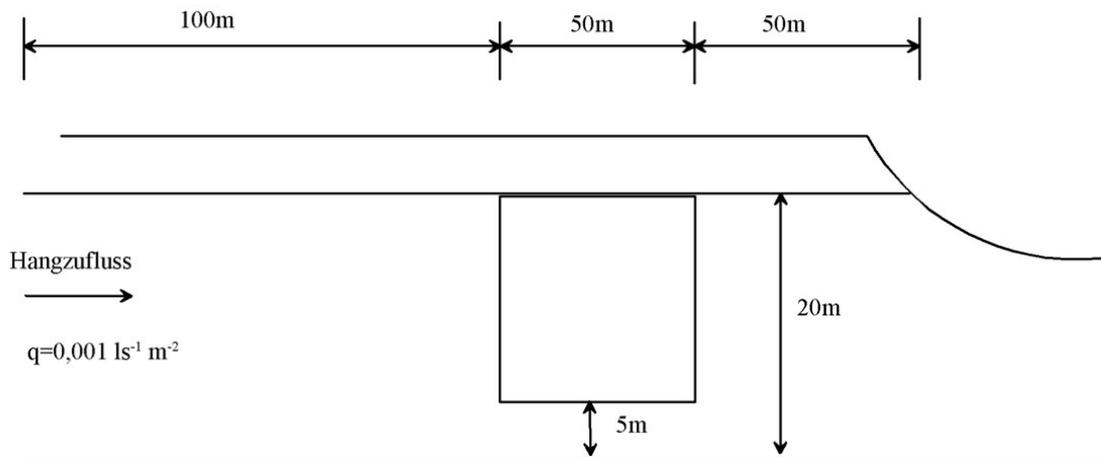


Abbildung 10.4: Einbau eines Tunnelbauwerkes in einem Grundwasserleiter

8. In einer Flussniederung soll mittels eines Deichbauwerkes entsprechend dem vereinfachten Schema in Abbildung 10.5 das Poldergebiet vor Hochwasser geschützt werden.
 - a) Ermitteln Sie die Zeit, nach welcher sich ein stationäres Strömungsregime eingestellt hat, wenn das Hochwasser über lange Zeit $5m$ über Normal steht.
 - b) Wieviel Wasser fließt pro Meter Deichlänge in das Poldergebiet?

Deich: $k = 10^{-4} \frac{m}{s}$, $n_0 = 0,15$, $S_0 = 0,002m^{-1}$;
 Dichtungsmaterial: $k = 10^{-5} \frac{m}{s}$; $n_0 = 0,05$; $S_0 = 0,001m^{-1}$

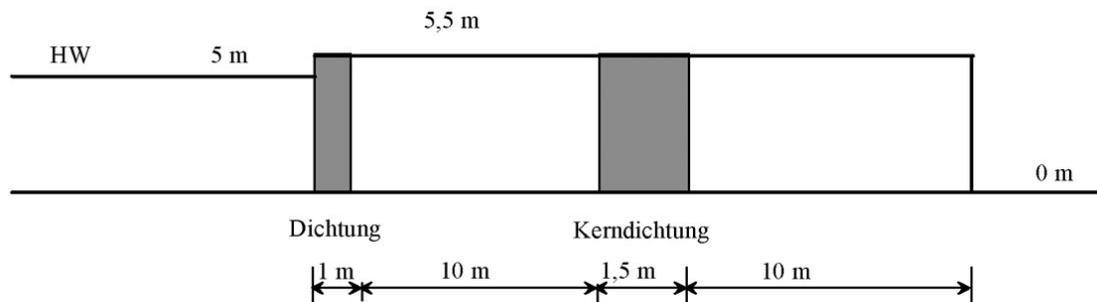


Abbildung 10.5: Deichbauwerk mit Kerndichtung

9. Modellieren Sie mittels des Programmsystems ASM folgenden horizontalen Grundwasserleiter, der rechts und links von zwei vollkommen ausgebauten Vorflutern mit einer Wasserhöhe von 50 m begrenzt wird. Der Grundwasserleiter besitzt eine Mächtigkeit von 20 m , eine Transmissibilität von $T = 0,01 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, einen Speicherkoeffizienten von $S = 0,001$ und eine Porosität von $0,1$. In der Mitte des Modellgebietes liegt ein Brunnen mit einer Förderleistung von $\dot{V} = 0,05 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$.
- Simulieren Sie die Wasserstandsverteilung (Isohypsenplan) nach einer Förderzeit des Brunnens von einem Tag.
 - Stellen Sie grafisch die Wasserstandsganglinien am Brunnen und jeweils 200 m entfernt dar (parallel und senkrecht zum Vorfluter).
 - Berechnen Sie die Wasserbilanz für das Modellgebiet nach eintägiger Förderung, sowie den Zufluss von dem linken Vorfluter
 - Untersuchen Sie zu dem hydraulischen System der Aufgabe c) den Einfluss der Orts- und Zeitquantisierungsschrittweiten und den der Lösungsverfahren. Stellen Sie dazu vor allem die Hydroisohypsen nach einem Tag dar und vergleichen Sie diese.

Teil III

Systemtheorie und Modellierung

Kapitel 11

Grundlagen

Die Systemtheorie stellt das theoretische Gerüst dar, mit dem die Steuerungs- und Regelungstechnik wissenschaftlich untersucht werden kann. Die Anwendung dieser Theorie in der Wasserwirtschaft ist insbesondere wichtig für die Prozessanalyse, d.h. für die Modellierung, sowie für die Messwertgewinnung, -übertragung und -verarbeitung. Die Systemtheorie liefert die Grundlage für die Benutzung der Begriffe **Information** und **System**. Nach Einführung des Informationsbegriffes für physikalische und/oder chemische Messwerte eröffnet sich die Möglichkeit, verschiedene Methoden der Informatik, Kybernetik, Mathematik und Elektrotechnik bei der Planung und Realisierung von wasserwirtschaftlichen Überwachungs-, Steuerungs- und Automatisierungssystemen anzuwenden.

11.1 Modellklassifizierung

Die Modellierung bzw. die Prozessanalyse kann auf theoretischem und/oder experimentellem Wege erfolgen.

Bei der **theoretischen Modellbildung/Prozessanalyse** werden die physikalisch-chemischen Naturprozesse analysiert und mit Hilfe der naturwissenschaftlichen Gesetze mathematisch formuliert. Auf diese Weise sind die Modellstrukturen und, soweit möglich, die Modellparameter über den inneren Wirkungsmechanismus bestimmbar. Das Analysieren der Objekte erfolgt von innen heraus. Die mathematischen Modelle sind somit naturwissenschaftlich begründet.

Bei der **experimentellen Modellbildung/Prozessanalyse** werden die Eingangs- und Ausgangssignale der Objekte gemessen und ausgewertet. Dabei finden natürliche oder künstliche Testsignale Verwendung. Die Analyse der Objekte erfolgt von außen her.

Die Nachteile der theoretischen Modellbildung/ Prozessanalyse sind in der Unzuverlässigkeit bei ungenügenden Prozesskenntnissen und dem hohen Aufwand bei komplexen Prozessen zu sehen. Die Nachteile in der experimentellen Modellbildung/ Prozessanalyse liegen dagegen in der Notwendigkeit, im realen Prozess Experimente durchzuführen, in der meist nur punktuellen Modellgültigkeit und in der Schwierigkeit der naturwissenschaftlichen Interpretation.

Oft ist es vorteilhaft, beide Methoden zu kombinieren, indem die Modellstruktur weitgehend theoretisch und die Modellparameter experimentell bestimmt werden.

Für die Migrationsprozesse spielen die begründbaren Modelle eine dominierende Rolle. Die experimentelle Modellbildung gewinnt vor allem in letzter Zeit an Bedeutung. Die Ergebnisse der experimentellen Prozessanalyse, die Übertragungsfunktionen, sind meist schwer mit den realen Prozessen zu interpretieren oder physikalisch vorstellbar. Deshalb stößt diese Methode oft auf unbegründete Skepsis.

So wie von Modellen der Migrationsprozesse gesprochen wird, kann auch von Modellen der Rechneranlagen, in ihrer Einheit von Hard- und Software, ausgegangen werden (siehe Abbildung 11.1). Ein wichtiges Problem, das bei der Bearbeitung von Migrationsproblemen auf Rechneranlagen auftritt, ist die Kopplung von Migrationsmodellen an die Modelle der Rechneranlagen. In diesem Zusammenhang gelten die Rechneranlagen als Simulatoren für die Migrationsprozesse. Die Kopplung ist jedoch nicht problemlos möglich, wenn die Modelle der Simulatoren nicht identisch mit den Migrationsmodellen sind. Derartige Differenzen treten z.B. bei der Betrachtung der unabhängigen Variablen (kontinuierlich, diskontinuierlich) oder der Zuordnung der Parameter und Zustandsgrößen auf. In diesen Fällen muss eine Approximation zwischen den beiden Modellen durchgeführt werden.

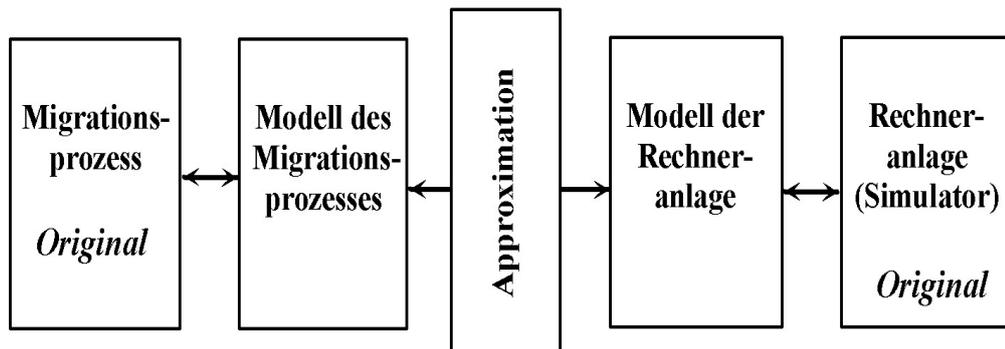


Abbildung 11.1: Kopplung der Migrations- und Simulatormodelle

Die Modellbasis beinhaltet im vorliegenden Untersuchungsgebiet die verschiedenen mathematischen Modelle dynamischer Vorgänge, chemischer Prozesse und biologischer Erscheinungen, d.h. die unterirdischen Strömungsvorgänge mit den angekoppelten Stoff-, Energie-, Austausch-, und Umwandlungsprozessen sowie die Migrationsprozesse im Boden- und Grundwasserbereich. Grundlage ist dabei der allgemeinste Fall der nichtlinearen, gekoppelten Mengen-Güte-Strömung. Für Sonderfälle lassen sich vereinfachte, aggregierte Modelle finden.

KRUG klassifiziert die mathematischen Modelle entsprechend des Hintergrundes der Modellentwicklung in die begründbaren und beschreibbaren Modelle (siehe Abbildung 11.2).

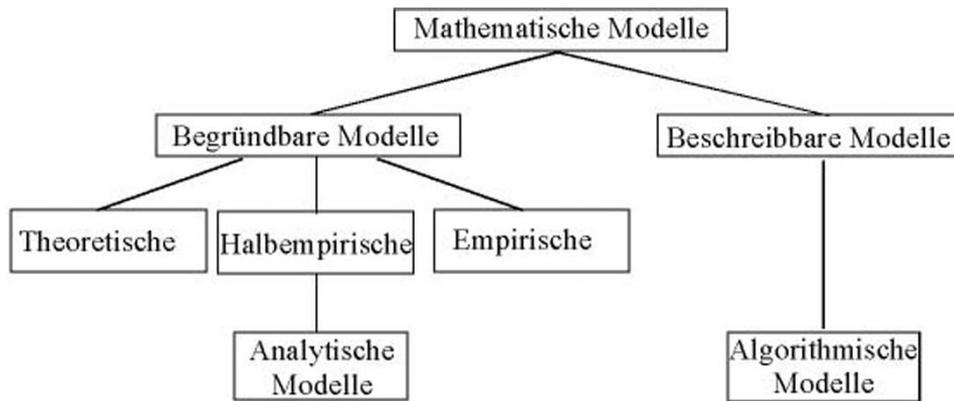


Abbildung 11.2: Modellklassen/ -unterklassen nach KRUG

Die beschreibbaren Modelle werden z.B. bei Ökosystemen und Populationsproblemen verwendet. Für die Modellierung technischer Systeme ist die Klasse der begründbaren Modelle bedeutsam.

Diese lassen sich wiederum in

- linear - nichtlinear
- kontinuierlich - diskontinuierlich und
- dynamisch - statisch

klassifizieren.

Die Frage der Modellbildung ist im Zusammenhang mit der Prozesssteuerung äußerst wichtig. Die erreichbare Qualität der Lösung einer Steuerungs- bzw. Regelungsaufgabe hängt besonders davon ab, ob genügend Kenntnisse qualitativer und quantitativer Art über die Steuerstrecke, hier der Boden und Grundwasserbereich, vorliegen. Der Begriff der Modellbildung muss eng verbunden mit dem der Prozessanalyse betrachtet werden. TÖPFER/BESCH schlagen für die Verwendung der Modelle im automatisierungstechnischen Betrachtungsgebiet nachfolgende Klassifizierungsprinzipien vor.

Einteilung der Modelle nach:

- **Methoden der Modellgewinnung**

 - Theoretische Modellgewinnung/Prozessanalyse (Naturgesetze)

 - Experimentelle Modellgewinnung/Prozessanalyse (Experimente)

- **Verwendungszweck der Modelle**

 - Auslegungs-, Berechnungs-, Verhaltensmodelle

 - Hantierungs-, Funktionsmodelle

- **Darstellungsarten der Modelle**

 - Mathematische Modelle in Gleichungsform/ parametrische Modelle (Gleichungen)

 - Mathematische Modelle in graphischer Form (Signalflussplan), nichtparametrische Modelle (Kurven, Wertepaare)

 - Physikalische Modelle (Analogiemodell, gegenständliche Modelle)

- **Aussagen der Modelle**

 - Statische Modelle

 - Dynamische Modelle

- **Anpassbarkeit der Modelle**

 - Vorhersagemodelle

 - Adaptive Modelle

 - Lernende Modelle

- **Verknüpfung der Variablen**

 - Deterministische/ stochastische Modelle

 - Lineare/ nichtlineare Modelle

- **Gültigkeit der Modelle**

 - Typenmodelle (für Klassen von Objekten)

 - Spezielle Modelle (für konkretes Objekt)

Der Modellbegriff wird meist nicht einheitlich gebraucht. Man kann ihn als eine **Dreierrelation** zwischen dem **Modell**, dem **Objekt** und dem **Subjekt** verstehen. Das Modell wird nicht nur dadurch charakterisiert, **wovon** es Modell ist, sondern auch, **wofür**. Das Objekt wird auch als Modelloriginal bezeichnet. Die Beziehung zwischen Modell und Original ist stets eine Art Abbildrelation. Die Qualität eines Modells wird an der

- relativen Widerspruchsfreiheit in Hinblick auf das Subjekt
- Relationstreue der Abbildung und des Verhaltens
- Einfachheit der Verwendung

gemessen.

Die Stellung von Prozessanalyse, Modell und Simulation im Rahmen der Steuerung und Regelung wird in den nachfolgenden Abbildungen 11.3 und 11.4 aufgezeigt. Dabei soll im Weiteren unter Prozessanalyse die Erarbeitung von Modellen der Boden- und Grundwasserprozesse verstanden werden. Dies kann auch als der Vorgang der Modellierung bezeichnet werden. Im Gegensatz dazu wird bei der Simulation der Ablauf des Originalprozesses nachgebildet. Dabei werden den Modellen die notwendigen Parameter und Zustandsgrößen mitgeteilt und der Prozessablauf gestartet.

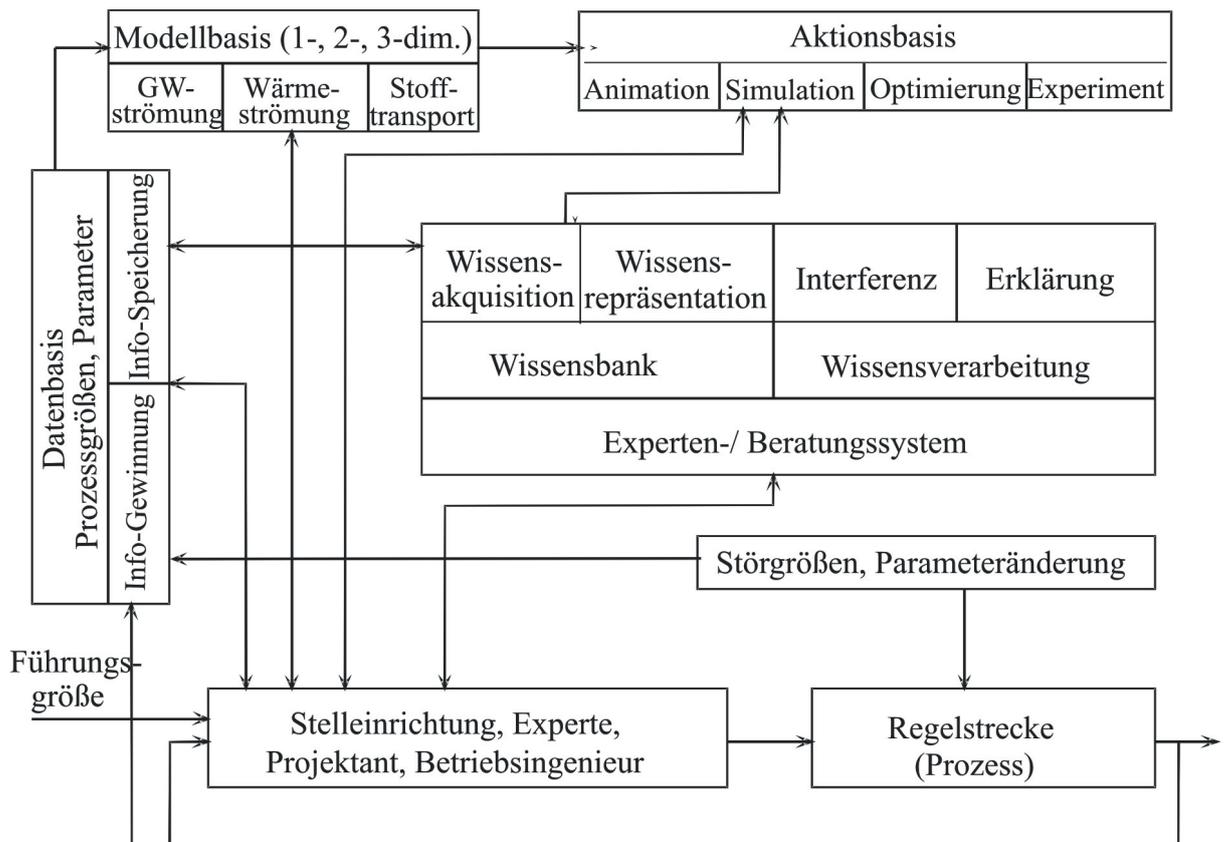


Abbildung 11.3: Geräte- und programmtechnische Realisierung

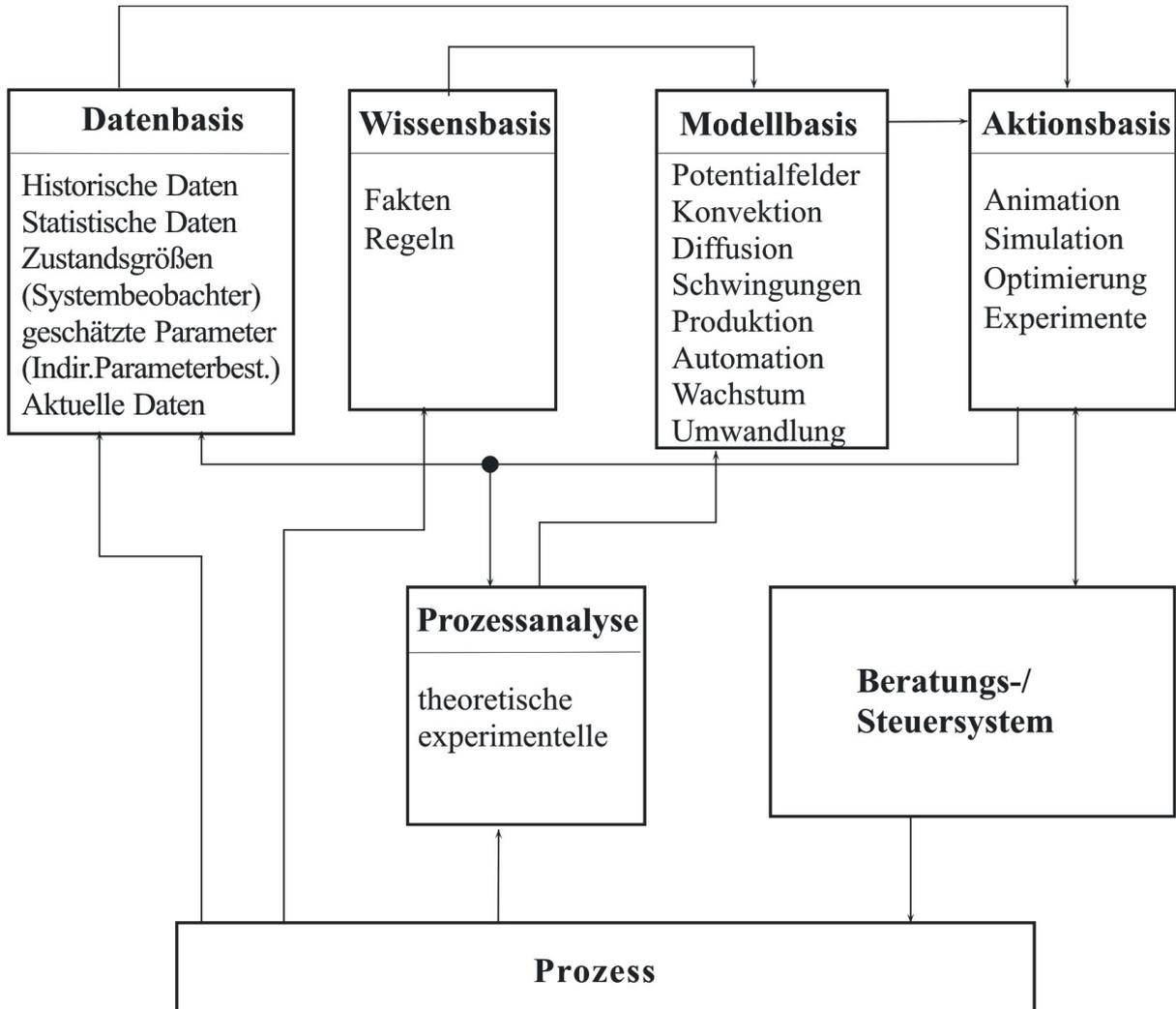


Abbildung 11.4: Prozesscharakter der Modellbildung und Simulation

11.2 Methoden der Prozessanalyse

Mittels der Methoden der Prozessanalyse soll eine mathematische Beschreibung des Verhaltens von Übertragungsgliedern gewonnen werden. Dieser Prozess wird auch als Modellierung bezeichnet. Diese Modelle können dabei auf zwei verschiedenen Wegen gewonnen werden, zum einen mittels der theoretischen, zum anderen mittels der experimentellen Prozessanalyse. Während die theoretische Prozessanalyse die Modellstruktur liefert, müssen die zugehörigen Parameter durch die experimentelle Analyse ermittelt oder verbessert werden. Im Gegensatz zur theoretischen Vorgehensweise erfolgt bei der experimentellen Prozessanalyse eine Untersuchung der Ausgangssignale als Systemreaktion auf Eingangssignale. Beide Methoden bilden eine Einheit und ergänzen sich, weil eine experimentelle Analyse ohne theoretische Vorinformation und eine theoretische Analyse ohne experimentelle Stützung kaum durchführbar ist.

11.2.1 Theoretische Prozessanalyse

Bei der **theoretischen Prozessanalyse** wird an Hand des inneren Aufbaus der Übertragungsglieder versucht, die mathematischen Beschreibungen (Modelle) zwischen Ein- und Ausgangsgrößen zu finden. Übertragungsfunktionen, die auf der Basis der theoretischen Prozessanalyse gebildet worden, sind stets durch Naturgesetze begründet. Sie besitzen im Fall der wasserwirtschaftlichen Anwendung immer physikalische und/oder chemische Grundlagen.

Die Besonderheiten der theoretischen Prozessanalyse bestehen darin, dass

- die Modellbildung bereits vor der praktischen Realisierung erfolgen kann,
- die Analysenergebnisse auf Anlagen mit gleichem Prozesstyp übertragbar sind,
- die Zusammenhänge zwischen technologischen und konstruktiven Daten erhalten bleiben,
- die prozessbestimmenden Größen im System erkannt und
- wichtige Aussagen über die Modellstruktur gewonnen werden.

Die Schwierigkeiten dieser Methode bestehen darin, dass

- der Aufwand sehr hoch ist und die Modelle kompliziert werden,
- die notwendigen Prozessparameter oftmals sehr schwer und nur ungenau gewonnen werden können,

- die Vorgehensweise schlecht algorithmierbar ist und
- der ablaufende physikalisch-chemische Prozess ausreichend bekannt sein muss.

Für das Aufstellen von mathematischen Modellen im Rahmen der theoretischen Prozessanalyse hat es sich bewährt, große Systeme in Teilsysteme zu zerlegen, die dann durch einzelne Bilanzgleichungen (Massen-, Energie- und Impulserhaltungsgesetz sowie die Quell- und Senkenaktivitäten) analysierbar sind.

11.2.2 Experimentelle Prozessanalyse

Die **experimentelle Prozessanalyse** geht im Gegensatz zur theoretischen von der Untersuchung der Ein- und Ausgangssignale des Systems aus. Die Systeme werden dabei als Übertragungsglieder betrachtet. Es werden künstliche Experimente am Originalsystem durchgeführt, wobei der Wahl des Eingangssignals große Aufmerksamkeit gewidmet werden muss. Ist die Durchführung von Experimenten nicht möglich, können auch Naturereignisse (z.B. Hochwasserwellen) als Datenbasis benutzt werden. Man spricht auch davon, dass die experimentelle Prozessanalyse die Systeme von außen her untersucht.

Die Methoden der experimentellen Prozessanalyse sind auch unter dem Begriff der Black-Box-Methode aus der Kybernetik bekannt.

Beide Methoden, die experimentelle und die theoretische Prozessanalyse, bilden eine Einheit und ergänzen sich sinnvoll, weil eine experimentelle Analyse ohne theoretische Vorinformation und eine theoretische Analyse ohne experimentelle Unterstützung kaum durchführbar ist.

In Tabelle 11.1 sind einige ausgewählte Eigenschaften der beiden Prozessanalysearten gegenübergestellt.

Tabelle 11.1: Gegenüberstellung von theoretischer und experimenteller Prozessanalyse

Modelleigenschaften	Theoretische Prozessanalyse	Experimentelle Prozessanalyse
Struktur	Zustandsmodelle mit innerer Struktur des realen Prozesses	Ein-/Ausgangs- und Signalmodelle vorwiegend ohne Struktur des realen Prozesses
Parameter der Modelle	Zusammenhang mit konstruktiven technologischen Daten	Kein Zusammenhang zwischen den Modellparametern und konstruktiven, technologischen und anderen Daten
Modellvereinfachung	schwierig	leicht möglich
Gültigkeit der Modelle	in großen Bereichen und für verschiedene Prozesse	im untersuchten Bereich und für den speziellen Prozess
Aufwand	Modelle häufig zu aufwändig für Lösung der Diagnose-, Überwachungs-, Steuerungs- und Vorhersageaufgabe	Modelle sehr günstig für die Lösung der Diagnose-, Überwachungs-, Steuerungs- und Vorhersageaufgabe
Zeitpunkt	Modell bereits in der Entwurfs-/Projektphase erstellbar	Modell erst mit Existenz/ Inbetriebnahme des Prozesses erstellbar
Beeinflussung des Prozesses	Keine "Störung" des Prozesses bei der Modellerstellung	Häufig "Störung" des Prozesses erforderlich (aktives Experiment)

11.3 Signaldarstellung

Prozesse lassen sich mittels Signalen charakterisieren. Für den Fall wasserwirtschaftlicher Prozesse bedeutet es, dass diese durch ihre Ein- und Ausgangsgrößen (z.B. Wasserstand, Durchfluss, chemische Konzentrationen, Temperatur) beschrieben werden können.

Eine von einer physikalischen Größe getragene Funktion bezeichnet man als **Signal**, wenn sie einen Parameter besitzt, der Bildfunktion einer veränderlichen Größe des physikalisch-technischen Raumes ist. Prinzipiell lässt sich ein Signal durch eine vierdimensionale Funktion $x = f(x, y, z, t)$ mathematisch darstellen. Bei der mathematischen Beschreibung von Signalen beachte man die Doppelbedeutung des Formelzeichens "x". Es tritt als allgemeine Signalbezeichnung und als Kennzeichen der Ortskoordinate auf. Oft ist es deshalb günstiger, als Signalkennzeichen das Kurzzeichen der jeweiligen physikalischen Größe zu nutzen. Der Parameter des Signals wird **Informationsparameter** genannt, die physikalische Größe, von der das Signal getragen wird, **Signalträger**. Beispiele sind in Tabelle 11.2 aufgeführt.

Tabelle 11.2: Zuordnung von Informationsparameter und Signalträger

Anwendung	Informationsparam.	Signalträger
Elektrizität	220V	elektrischer Strom
	1A	elektrischer Strom
Hydraulik	10m	Flusswasserstand
	1m ³	Wasserstrom
Thermik	273K	Wärmepotential
	1kW	Wärmestrom

In der Nachrichtentechnik werden solche Signale z.B. in Form von Spannungszuständen, Strom und Leistungsänderungen benutzt. Entsprechend obiger Definition kann der Signal- und Informationsbegriff auch auf andere technische Systeme, wie hier auf wassertechnische Prozesse, angewendet werden. Als Beispiel dafür können in Analogie zu Strom und Spannung auch der Wasserstand, der Volumenstrom und die Temperatur als Signalträger in Erscheinung treten. Der Wasserstand würde demzufolge als dreidimensionales Signal $x = f(x, y, t)$ darstellbar sein. Aber auch chemische Stoffkonzentrationen sind als Signal denkbar.

Für die einfachere Darstellung ist in den folgenden Betrachtungen meist nur die Zeit als unabhängige Variable angeführt. Dies soll keine Einschränkung der Allgemeinheit sein. Die Ausführungen gelten genauso auch bei Abhängigkeiten bezüglich der Ortskoordinaten.

Die Beschreibung von Signalen kann durch eine grafische Darstellung und durch mathematische Funktionen geschehen. Die Signale werden meist mit einer Anfangszeit $t = 0$ definiert. Das bedeutet, dass es sich um Relativzeiten zu einem Ereignis handelt. Bei der mathema-

tischen Beschreibung wird meist der Originalvorgang im sogenannten Zeitbereich von dem transformierten Vorgang im Bildbereich unterschieden. Bekannte Transformationen für Signale sind die FOURIER- und die LAPLACE-Transformation.

Für die mathematische Beschreibung technischer Signale haben sich verschiedene Darstellungen bewährt. Große Bedeutung kommt dabei den Grundsignalen (siehe Abschnitt 11.3.1 Grundsignalformen, Seite 305) zu, da sie die Grundlage aller beliebigen Signalformen sind. Mittels dieser Grundsignale können beliebige Signale generiert werden (siehe Abschnitt 11.3.3 Signalsynthese, Seite 311). Ebenso können beliebige Signalformen in diese Grundsignale zerlegt werden (siehe Abschnitt 11.3.4 Signalanalyse, Seite 311).

11.3.1 Grundsignalformen

Die gebräuchlichsten Grundsignalformen (siehe Abbildung 11.5) sind die **Gleichgröße**, die **Sinusfunktion**, die **Sprungfunktion** (Einheitsprung) und der **DIRAC-Impuls**.

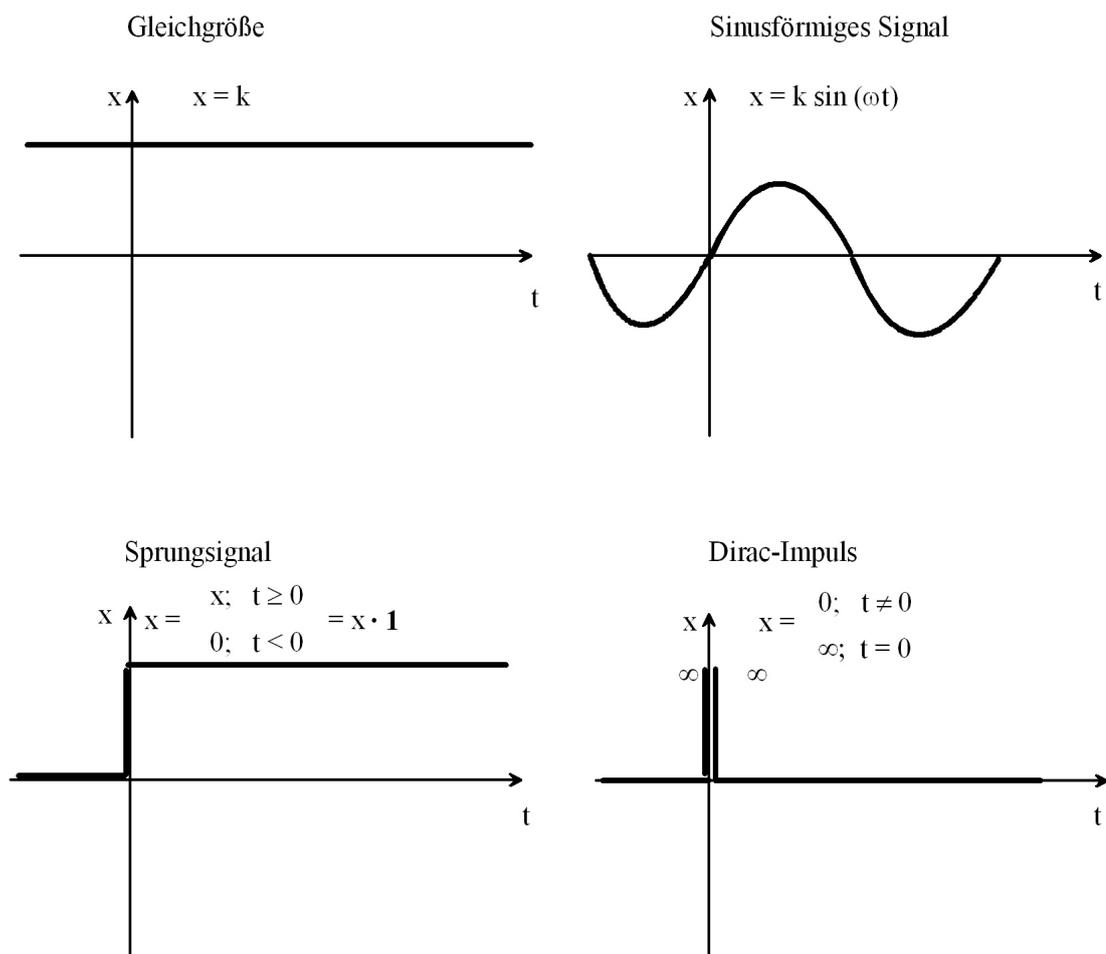


Abbildung 11.5: Grundsignalformen

Der Einheitssprung ist ein auf die Sprunghöhe normiertes Sprungsignal (Sprunghöhe = 1) und wird durch $\mathbf{1}(t)$ dargestellt. Der DIRAC-Impuls wirkt nur zur Zeit $t = 0$ und hat dort eine unendliche Sprunghöhe. Einheitssprung und DIRAC-Impuls sind mathematisch über die Integration bzw. Differentiation miteinander verbunden.

11.3.2 Anwendung ausgewählter Testsignale

Für die Durchführung der experimentellen Prozessanalyse lassen sich Testsignale (siehe Abbildung 11.6) erfolgreich anwenden. Mit diesen muss am realen Objekt ein spezielles Experiment durchgeführt werden. Dabei kann es aus verschiedenen technischen bzw. technologischen Gegebenheiten möglich sein, dass nur spezielle Testsignale benutzt werden können. Da unabhängig von der Art des Testsignals die gleiche Systembeschreibung entsteht bzw. die verschiedenen Beschreibungsmodelle ineinander überführbar sind, entsteht keine Einschränkung der Methode der experimentellen Prozessanalyse.

Neben der Verwendung dieser speziellen Testsignale kann auch die Reaktion der Systeme auf natürliche Ereignisse, d.h. auf natürliche Signale, wie z.B. Hochwasserwellen, Niederschlagsereignisse u.ä., zur Bestimmung des Übertragungsverhaltens herangezogen werden. Dies wird dann durch die Verwendung der Faltungsoperation (siehe Abschnitt 12.3 Beliebige Übertragungsverhalten, Seite 365) realisiert.

Für die Testsignale gibt es nach TÖPFER folgende spezielle Definitionen, wobei der Zusatzbegriff “**Einheits-**” stets eine Normierung auf den Wert Eins beinhaltet.

11.3.2.1 Impulsfunktion

Die Impulsfunktion ist definiert zu:

$$x_e(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } t < 0 \\ \frac{A}{\Delta t} & \text{für } 0 \leq t < \Delta t \\ 0 & \text{für } t > \Delta t \end{array} \right\}, \quad (11.1)$$

wobei Δt die Impulsbreite ist. Die Fläche des Impulses beträgt:

$$A = \int_0^{\Delta t} x_e(t) dt \quad (11.2)$$

Für einen Impuls mit konstanter Höhe und einer endlichen Impulsdauer ergibt sich die Fläche zu:

$$A = x_e \cdot \Delta t \quad (11.3)$$

Die Fläche des Impulses verkörpert eine entsprechende Wirkung in Form eines Masse- oder Energieeintrags. Bei technischen Impulsen wird stets eine endliche Impulsbreite vorhanden sein. Ist die Impulsbreite kleiner als ein Zehntel der kleinsten Zeitkonstanten ($\Delta T < 0,1\tau$) (siehe Abschnitt 12.2 Übertragungsverhalten zweiter Ordnung, Seite 350), so kann auch von einem genäherten idealen Impuls gesprochen werden.

Setzt man voraus, dass die Fläche konstant bleibt, ergibt sich, dass für $\Delta t \rightarrow 0$ die Impulshöhe gegen Unendlich gehen muss $x_e \rightarrow \infty$ (vgl. auch siehe Abschnitt 12.2.3 DIRAC-Impuls als Eingangssignal, Seite 359),

$$\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ x_e \rightarrow \infty}} x_e \cdot \Delta t = A \quad (11.4)$$

$$x_e(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } t < 0 \\ \infty & \text{für } t = 0 \\ 0 & \text{für } t > 0 \end{array} \right\},$$

wobei die Impulsfläche A einen endlichen Wert behält:

$$A = \int_{-0}^{+0} x_e(t) dt \quad (11.5)$$

Der so genannte **DIRAC-Impuls**, auch als **Einheitsimpuls** bezeichnet, entsteht, wenn die Impulsfläche auf den Wert Eins normiert wird:

$$\delta(t) = \frac{x_e(t)}{A} = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } t < 0 \\ \infty & \text{für } t = 0 \\ 0 & \text{für } t > 0 \end{array} \right\}$$

$$A_{\delta(t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t) dt = 1 \quad (11.6)$$

11.3.2.2 Sprungfunktion

Die Sprungfunktion ist definiert zu:

$$x_e(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } t < 0 \\ x_{e0} & \text{für } t \geq 0 \end{array} \right\}$$

Wird die Sprunghöhe normiert, so erhält man den **Einheitssprung** zu:

$$\mathbf{1}(t) = \frac{x_e(t)}{x_{e0}} = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } t < 0 \\ 1 & \text{für } t \geq 0 \end{array} \right\} \quad (11.7)$$

Man beachte, dass zum Zeitpunkt $t = 0$ das Sprungsignal bereits der Wert x_{e0} annimmt.

11.3.2.3 Rampenfunktion

Die Rampenfunktion, auch als Anstiegswfunktion bezeichnet, ist definiert zu:

$$x_e(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } t < 0 \\ c \cdot t & \text{für } t \geq 0 \end{array} \right\}$$

Auch hier kann eine Einheitsfunktion durch Normierung erzeugt werden. Die **Einheitsrampenfunktion** lautet:

$$\alpha(t) = \frac{x_e(t)}{c} = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } t < 0 \\ t & \text{für } t \geq 0 \end{array} \right\} \quad (11.8)$$

Zwischen den verschiedenen vorgestellten Testsignalen, insbesondere den Einheitssignalen, besteht der Zusammenhang, so dass sie durch Integration bzw. Differentiation ineinander überführbar sind (siehe Tabelle 11.3).

Tabelle 11.3: Zusammenhang zwischen verschiedenen Grundsignalen

	Einheitsimpuls DIRAC-Impuls $\delta(t)$	Einheitssprungsignal $\mathbf{1}(t)$	Einheitsrampensignal $\alpha(t)$
Einheitsimpuls DIRAC-Impuls $\delta(t)$		$\delta(t) = \frac{d\mathbf{1}(t)}{dt}$	$\delta(t) = \frac{d\mathbf{1}(t)}{dt} = \frac{d^2\alpha(t)}{dt^2}$
Einheitssprungsignal $\mathbf{1}(t)$	$\mathbf{1}(t) = \int \delta(t) dt$		$\mathbf{1}(t) = \frac{d\alpha(t)}{dt}$
Einheitsrampensignal $\alpha(t)$	$\alpha(t) = \int \mathbf{1}(t) dt$ $= \iint \delta(t) dt$	$\alpha(t) = \int \mathbf{1}(t) dt$	

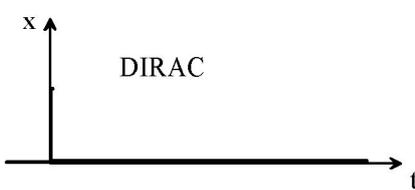
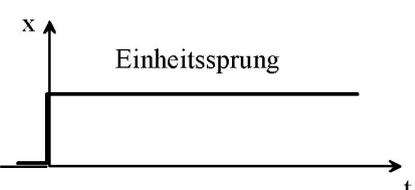
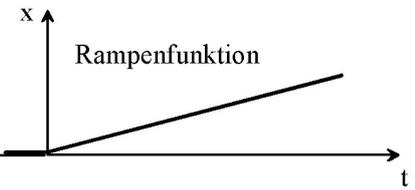
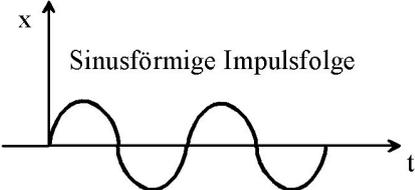
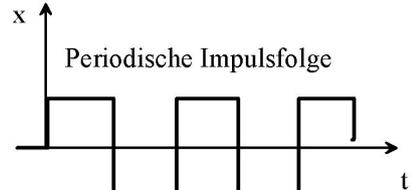
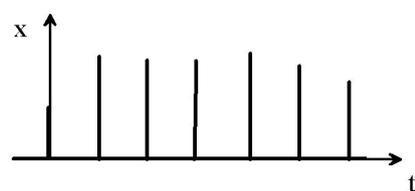
Aperiodisch		
 <p>DIRAC</p>	$\delta(t)$	Tracer-Versuche Säulendurchlaufversuche
 <p>Einheitssprung</p>	$\mathbb{1}(t)$	Pump-Versuche Tracer-Versuche Säulendurchlaufversuche
 <p>Rampenfunktion</p>	$\alpha(t)$	
Periodisch		
 <p>Sinusförmige Impulsfolge</p>	$\sin(\omega t)$	Wellenkanal
 <p>Periodische Impulsfolge</p>	$\sum \sin(n\omega_0 t)$	Slug&Bail-Brunnentest
Stochastisch		
		Zufallszahlengenerator

Abbildung 11.6: Testsignale

11.3.3 Signalsynthese

Bei der **Signalsynthese** (Überlagerung) werden an einer **Mischstelle** mehrere Eingangssignale x_e additiv zu einem Ausgangssignal x_a zusammengeführt. Das Ausgangssignal lässt sich auf der Basis der mathematischen Gleichung der Mischstelle

$$x_a = \sum_{i=1}^n x_{ei} \quad (11.9)$$

durch eine vorzeichbehaftete Addition oder mittels grafischer Methoden (siehe Abbildung 11.7) ermitteln.

11.3.4 Signalanalyse

Die **Signalanalyse** beliebiger Signalformen kann durch eine Zerlegung in Grundsignalformen erfolgen. Die bekannteste Methode ist dabei die FOURIERreihen-Zerlegung, bei der periodische Signalabläufe durch Sinusschwingungen verschiedener Frequenzen approximiert werden. Eine praktisch gut handhabbare Methode bei aperiodischen, d.h. einmalig ablaufenden Signalen, ist die Approximation durch zeitlich versetzte Sprungsignale. Im Nachfolgenden soll die grafische Methode beschrieben werden, da sie gegenüber der mathematischen wesentlich einfacher handhabbar und anschaulicher ist.

Der erste Schritt bei der Signalanalyse mittels Sprungsignalen besteht darin, dass die beliebige Zeitfunktion durch eine treppenförmige Signalform approximiert wird (siehe Abbildung 11.8). Der Zeitpunkt der Treppenflanke und die Sprunghöhe sollten so gewählt werden, dass ein kleinster mittlerer Fehler entsteht. Dabei hat sich bewährt, die Integrale der Originalkurve und der Treppenfunktion anzunähern. Das bedeutet, dass gleiche Flächeninhalte durch beide Kurven repräsentiert werden müssen (siehe Script zur Vorlesung Grundwassermesstechnik, Abschnitt Fehlerrechnung).

Beliebige Signale können auch in eine Summe von Impulsen zerlegt werden, speziell in eine unendliche Summe von DIRAC-Impulsen. Dies führt auf die Methode des Faltungsintegrals (siehe Abschnitt 12.3 Beliebiges Übertragungsverhalten, Seite 365).

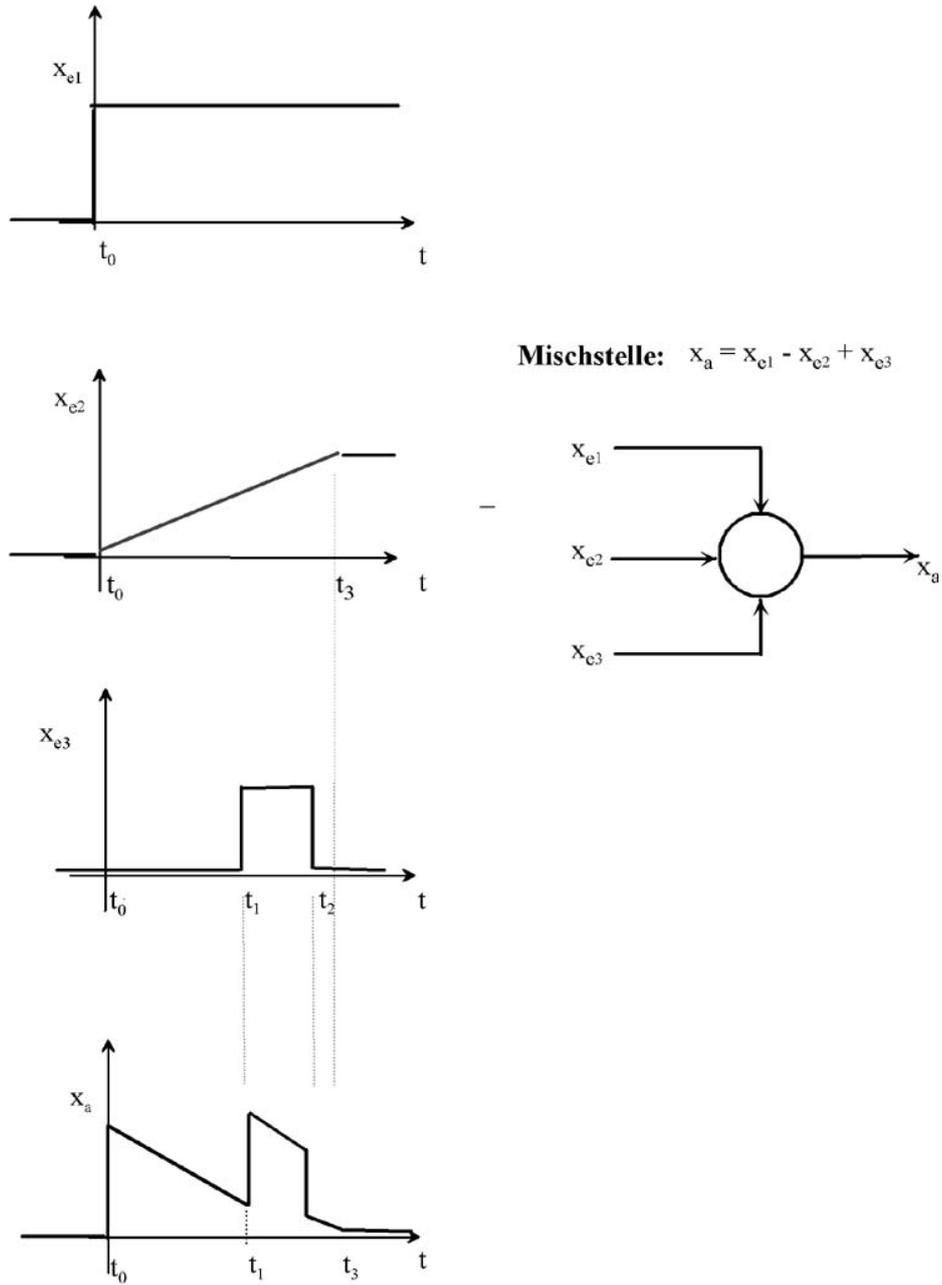


Abbildung 11.7: Signalsynthese

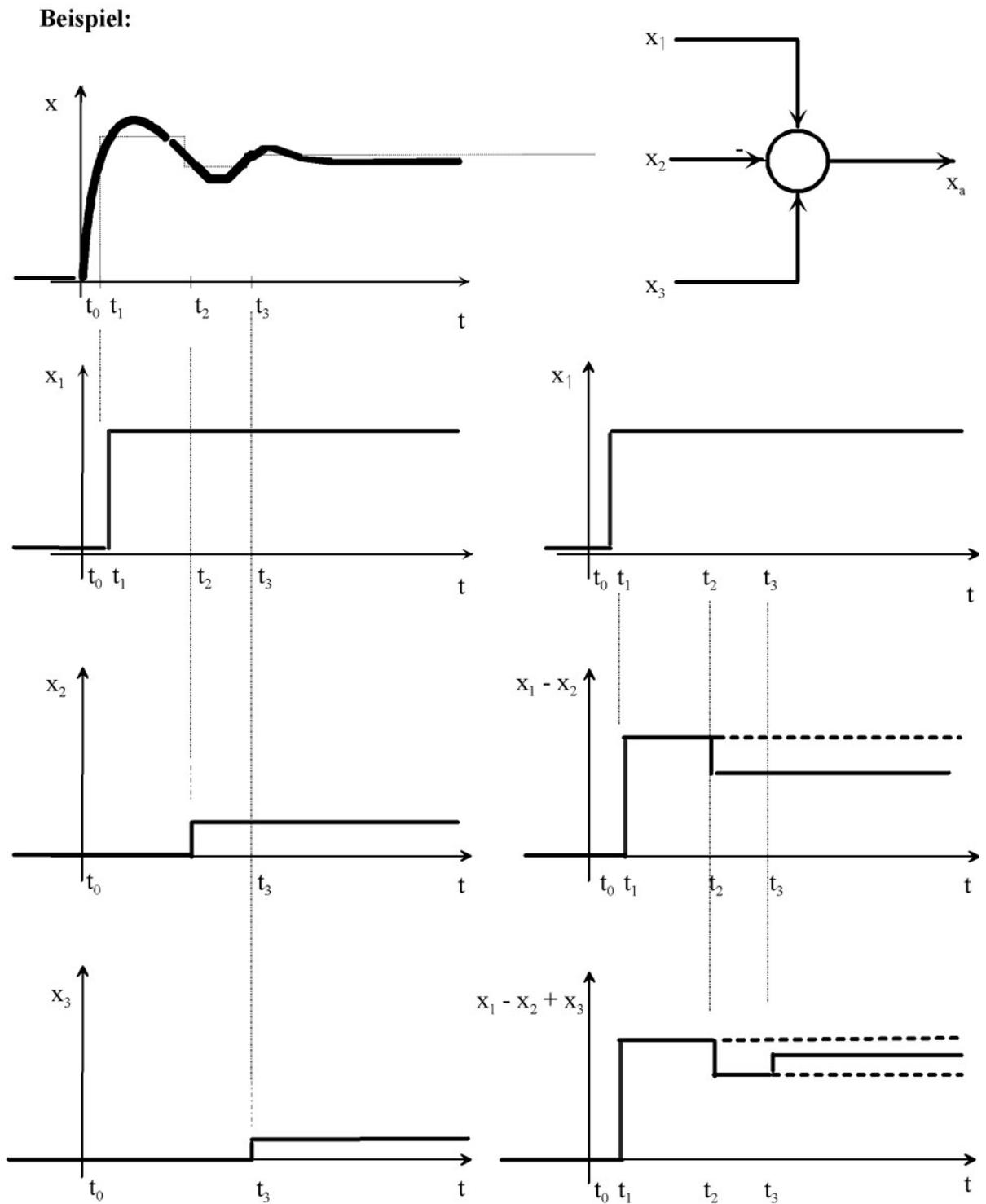


Abbildung 11.8: Approximation beliebiger Signale durch Sprungsignale

An dieser Stelle soll nochmals darauf hingewiesen werden, dass die hier beispielhafte Signaldarstellung als Zeitfunktion auf alle unabhängigen Variablen anwendbar ist. Spezielle die Ortsabhängigkeit in x - und y -Richtung spielt bei Prozessen im Boden und Grundwasserbereich sowie bei der Altlastenbehandlung eine große Rolle.

11.3.5 Quantisierung

Die Darstellungsform von Signalen lässt sich nach verschiedenen Gesichtspunkten klassifizieren. In der Technik unterscheidet man dabei zwischen der Einteilung der Signale nach **Quantisierung des Informationsparameters** und nach **Quantisierung der unabhängigen Variablen**.

Bei der Einteilung nach der **Quantisierung des Informationsparameters** erhält man die

- **analogen** Signale, deren Informationsparameter in einer metrischen Menge jeden beliebigen Zwischenwert und die
- **diskreten** Signale, deren Informationsparameter nur bestimmte (endlich viele) Werte innerhalb gewisser Grenzen

annehmen können.

Die beiden genannten Einteilungsprinzipien lassen sich auch miteinander kombinieren und man erhält die in der Abbildung 11.9 gezeigten Darstellungsformen.

Für die Klasse der **Quantisierung der unabhängigen Variablen** kann folgende Unterteilung getroffen werden:

- **kontinuierliche** Signale, bei denen der Informationsparameter zu jedem beliebigen Wert sowie
- **diskontinuierliche** Signale, bei denen der Informationsparameter nur für endlich viele Werte

der unabhängigen Variablen eindeutig angegeben werden kann.

Als Beispiele für das Auftreten der verschiedenen Signalformen sind in Tabelle 11.4 einige Messgeräte und -verfahren aufgeführt.

Quantisierung der unabhängigen Variablen

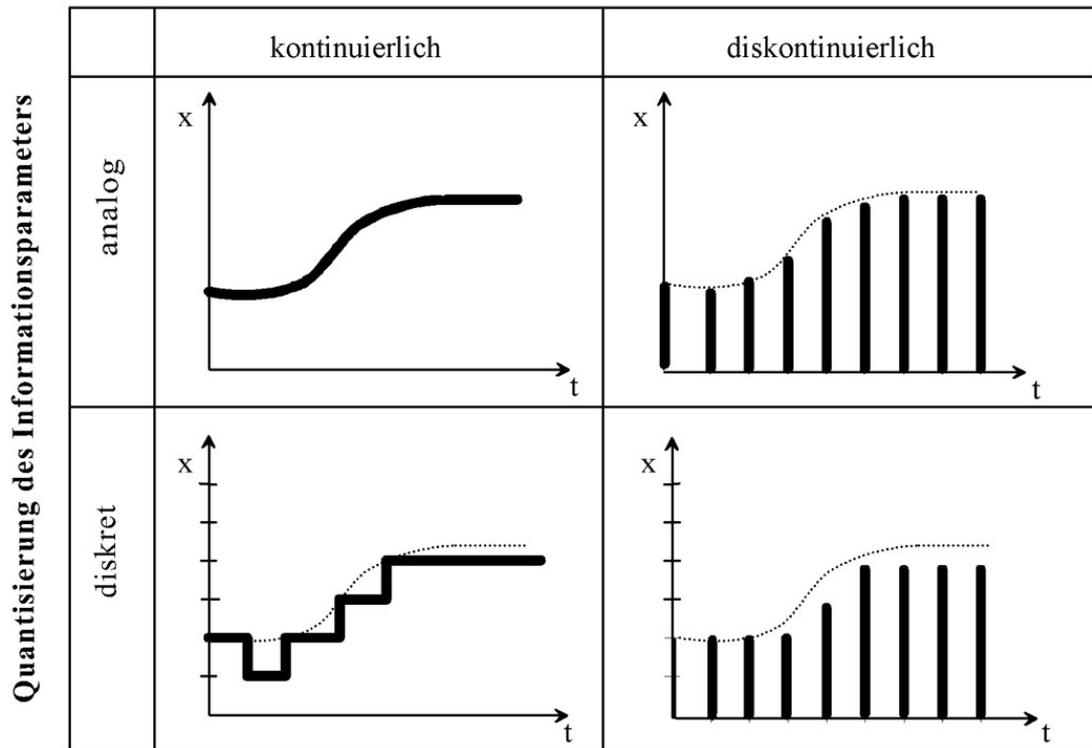


Abbildung 11.9: Darstellungsformen von Signalen

Es sei noch darauf hingewiesen, dass diese entsprechend den DIN-Vorschriften festgelegten Begriffsverwendungen nicht immer exakt eingehalten werden können. Bedingt wird dies vor allem durch die andersartige Verwendung einiger Begriffe in der fremdsprachigen Literatur. So herrscht keine klare Trennung zwischen den Begriffen "diskret" und "diskontinuierlich". Für "Quantisierung der unabhängigen Variablen" wird oft das Wort "Diskretisierung" benutzt. Auch der Begriff "digital" (digitale Signale) wird oft für diskrete Messwerte benutzt, wenn sie mittels Zifferntableaus angezeigt werden. **Digitale** Messwerte sind richtigerweise Messwerte, die eine Quantisierung des Informationsparameters erfahren, wobei nur die Quantisierungsstufen "0" und "1" (oder "0" und "L") erlaubt sind.

Tabelle 11.4: Messgeräte und -verfahren und deren Signalformen

Signalform	Elektrotechnik	Geohydraulik
analog-kontinuierlich	X-Y-Schreiber Plotter	Schreibpegel
analog-diskontinuierlich	Punktschreiber Fallbügelschreiber	Tiefenlot
diskret-kontinuierlich	Digitalvoltmeter (Stufenverschlüsselung)	Widerstandsmesskette
diskret-diskontinuierlich	Digitalvoltmeter (Zeitverschlüsselung)	Brunnenpfeife

11.4 Übertragungssysteme

Die folgenden Methoden dienen der Bestimmung des dynamischen Verhaltens von ungestörten Systemen. Da dies technisch nur idealisiert möglich ist, muss gefordert werden, dass die Eingangssignale gegenüber den Störsignalen wesentlich dominieren.

Weitere wichtige Voraussetzungen für die Anwendung der Methoden sind:

- Das System ist **ungestört** (Störung \ll Nutzsignal).
- Das Systemverhalten ist **linear**.
- Das Systemverhalten ist **zeitinvariant**.
- Das System hat nur **ein** Eingangs- und **ein** Ausgangssignal.
- Das Systemverhalten ist durch **konzentrierte** Parameter beschreibbar.

In der Systemtheorie, speziell im Zusammenhang mit der experimentellen Prozessanalyse, kann jeder Prozess als so genannte "black-box", die nur durch die Relation ihrer Ein- und Ausgangsgrößen charakterisiert wird, dargestellt werden. Diese "black-box" wird dann als System bezeichnet. Ein System wird stets durch die Abgrenzung zu seiner Umgebung und den daran gekoppelten Informationsaustausch gekennzeichnet (siehe Abbildung 11.10). In der Systemtheorie unterscheidet man zwischen konkreten und mathematischen Systemen. Ein **konkretes System** ist ein räumlich abgegrenzter Teil der Wirklichkeit. Dazu gehören noch einige ausgewählte Beziehungen in seiner inneren Struktur und zu seiner Umgebung. Die **mathematischen Systeme** enthalten Variablen, Gleichungen oder Operatoren.

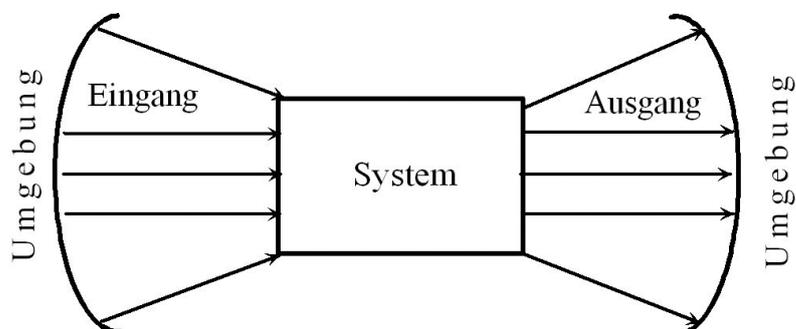


Abbildung 11.10: System mit seiner Beziehung zur Umgebung

11.4.1 Mathematische Beschreibung

Bei der Beschreibung von Systemen haben sich verschiedene Methoden herausgebildet. Dabei ist im Zusammenhang mit technischen Systemen die Betrachtungsweise als **Übertragungssysteme** am weitesten verbreitet. Jedes System wird dabei durch eine Menge von Eingangsgrößen, der eine Menge von Ausgangsgrößen zugeordnet ist, gekennzeichnet (siehe Abbildung 11.11). Dieser funktioneller Zusammenhang zwischen den Aus- und den Eingangsgrößen wird als **Übertragungsverhalten** bezeichnet. Im folgenden werden nur die Relation von jeweils einer Eingangs- bzw. einer Ausgangsgröße betrachtet. System mit mehreren Ein- und Ausgangsgrößen, sogenannte Multisignalsysteme, können mit den Methoden gekoppelter Gleichungssysteme behandelt werden.

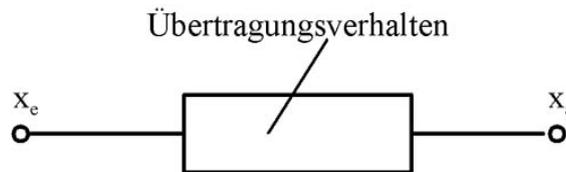


Abbildung 11.11: Übertragungsglied

Die Beschreibung der Systeme durch die an ihnen wirkenden Ein- und Ausgangssignale kann in verschiedensten Formen stattfinden. Die gebräuchlichsten sind die mathematischen Gleichungen und die grafische Darstellung des Zeitverhaltens der Sprungantwortfunktion. Für die Beschreibung des Übertragungsverhaltens werden drei Arten von Definitionsgleichungen benutzt. Entsprechend der Bezeichnung der Grundsignale, die an den Eingang angelegt werden, erhält man die Bezeichnungen Übergangs-, Gewichtsfunktion und Übertragungsfunktion:

- Die **Übergangsfunktion** $h(t)$
erhält man, wenn am Eingang ein Einheitssprungsignal angelegt wird. Dies wird auch als Sprungantwortfunktion bezeichnet:

$$h(t) = x_a |_{x_e=1(t)} \quad (11.10)$$

- Die **Gewichtsfunktion** $g(t)$
ergibt sich, wenn am Eingang ein DIRAC-Impuls wirkt, auch als Impulsantwortfunktion bezeichnet:

$$g(t) = x_a |_{x_e=\delta(t)} \quad (11.11)$$

- Die **Übertragungsfunktion** $G(p)$
ergibt sich aus der LAPLACE-transformierten Beschreibung des Ausgangssignals, wenn das Eingangssignal ein DIRAC-Impuls ist:

$$G(p) = X_a |_{X_e=L\{\delta(t)\}} \quad (11.12)$$

Bei der Beschreibung des Übertragungsverhaltens unterscheidet man zwischen dem Zeit- (Original-)Bereich und dem Bild-Bereich (siehe Abbildung 11.12), bei dem die Signale, und damit auch die Übertragungsfunktion, einer Transformation unterworfen werden. Die bekanntesten Integraltransformationen sind die FOURIER- und die LAPLACE-Transformationen (siehe Abschnitt 5.3.2 LAPLACE-Transformation, Seite 142). Der Vorteil der Anwendung von Transformationen besteht darin, dass komplizierte Rechenoperationen bei der Arbeit mit Übertragungsfunktionen im Bildbereich meist auf die vier Grundrechenarten reduziert werden können. Der Nachteil besteht in der geringen Anschaulichkeit des Bildbereiches sowie in dem Aufwand, die Signale und mathematischen Modelle in den Bildbereich und nach der Lösung der Übertragungsfunktion wieder zurück (inverse Transformation) zu transformieren. Während für den Hinweg meist vorgefertigte Korrespondenzen existieren, erweist sich die Rücktransformation oft als komplizierter.

Die Kennzeichnung von Signalen und Übertragungsfunktionen erfolgt im Zeitbereich mit Kleinbuchstaben, im Bildbereich dagegen mit Großbuchstaben.

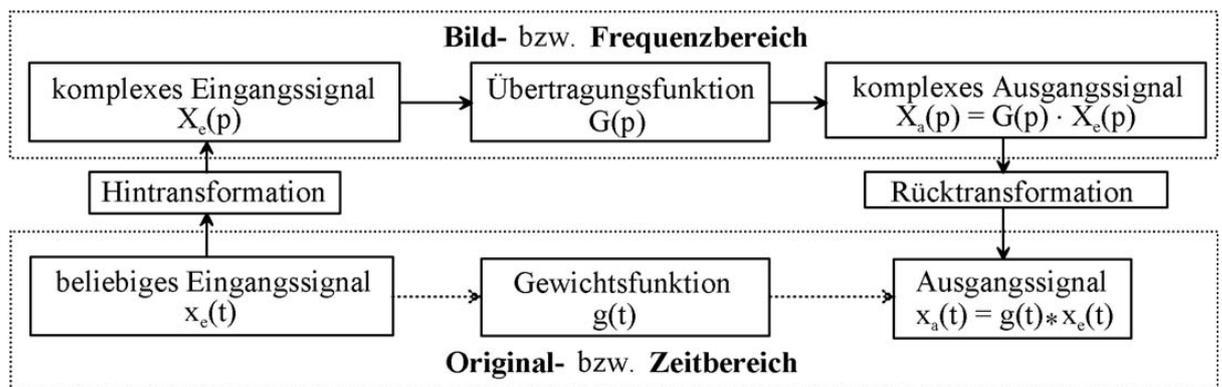


Abbildung 11.12: Zusammenhang zwischen Zeit- und Bildbereich

Die **FOURIER-Transformation** und ihre Rücktransformation wird definiert als:

$$\text{FOURIER-Transformation} \quad X(j\omega) = F \{x(t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-j\omega t} dt \quad (11.13)$$

$$\text{Rücktransformation} \quad x(t) = F^{-1} \{X(j\omega)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} X(j\omega) e^{j\omega t} d\omega; \quad (11.14)$$

die **LAPLACE-Transformation** und ihre Rücktransformation als:

$$\text{LAPLACE-Transformation} \quad X(p) = L \{x(t)\} = \int_0^{\infty} x(t) e^{pt} dt \quad (11.15)$$

$$\text{Rücktransformation} \quad x(t) = L^{-1} \{X(p)\} = \frac{1}{2\pi j} \int_{c-j\infty}^{c+j\infty} X(p) e^{pt} dp \quad (11.16)$$

Während die FOURIER-Transformation vorteilhafterweise für periodische bzw. periodisierbare Signale eingesetzt wird, hat sich die LAPLACE-Transformation zur Anwendung bei Sprungsignalen (z.B. Schaltvorgänge) und Impulsen (DIRAC-Impuls) bewährt. Insbesondere wird die LAPLACE-Transformation auch zur Berechnung von Übertragungsverhalten beliebiger Eingangssignale (siehe Abschnitt 12.3 Faltungsoperation, Seite 365) eingesetzt.

Diese drei Arten, Übergangs-, Gewichts- und Übertragungsfunktion, der mathematischen Darstellung des Übertragungsverhaltens sind äquivalent, da sie nur verschiedene mathematische Berechnungsformen für die selben technischen Prozesse physikalischer und/oder chemischer Art sind. Sie sind deshalb mittels mathematischer Beziehungen ineinander überführbar (siehe Tabelle 11.5). Aus der Definition, dass zwischen Einheitssprungsignal und DIRAC-Impuls ein integraler bzw. differentieller Zusammenhang besteht (siehe auch Tabelle 11.3, Seite 309), und den Rechenregeln zur LAPLACE-Transformation (siehe Abschnitt 5.3.2 LAPLACE-Transformation, Seite 142), ergeben sich auch die Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Beschreibungsarten.

Tabelle 11.5: Zusammenhang zwischen den verschiedenen Funktionen des Übertragungsverhaltens

	h(t)	g(t)	G(p)
h(t)		$h(t) = \int_0^t g(\tau) d\tau$	$h(t) = L^{-1} \left\{ \frac{1}{p} G(p) \right\}$
g(t)	$g(t) = \frac{dh(t)}{dt}$		$g(t) = L^{-1} \{ G(p) \}$
G(p)	$G(p) = p L \{ h(t) \}$	$G(p) = L \{ g(t) \}$	

Die im Folgenden vorgestellten Methoden der experimentellen Prozessanalyse gelten nur unter bestimmten Bedingungen. Diese Bedingungen lassen sich bei der Untersuchung wasserwirtschaftlicher Prozesse meist einhalten. Weitergehende Methoden müssen der Spezialliteratur vorbehalten bleiben bzw. sind heute noch Gegenstand der Forschung.

11.4.2 Grundübertragungsverhalten

Die **Grundformen** der Übertragungsverhalten technischer Systeme lassen sich in Form des **proportionalen**, des **integralen** und des **differentiellen** sowie des **Verzögerungs-** und des **Laufzeitverhaltens** beschreiben.

Die Kennzeichnung der Systeme bezüglich des Übertragungsverhaltens geschieht durch den groß geschriebenen Anfangsbuchstaben des Verhaltens oder durch das Piktogramm der Systemantwort auf ein Sprungsignal am Eingang, d.h. durch die Übergangsfunktion. Beispiele für die einzelnen Übertragungsverhalten sind in Tabelle 11.6 zusammengefasst.

Tabelle 11.6: Übertragungsverhalten

Übertragungsverhalten	Bezeichnung	Beispiel
proportional	P	Hebelanordnungen
integral	I	Füllung eines Behälters ($V = const$)
differential	D	Druckstoß in Rohrleitungen
Verzögerungsverhalten 1.Ordnung	T₁	Füllung eines Behälters ($V = f(t)$) Strömungsprozesse (Rohrleitung, Grundwasser)
Verzögerungsverhalten 2.Ordnung	T₂	Füllung von Kaskadenbehälter Transportprozesse (Rohrleitung, Grundwasser)
Laufzeitverhalten	T_L	Förderband, Mischrohr

An Hand einiger Beispiele sollen diese Grundformen exemplarisch erläutert werden. Im Abschnitt 12 Modellbestimmung, Seite 343, werden für die Verzögerungsglieder 1. und 2. Ordnung detailliertere Beschreibungen gegeben.

11.4.2.1 Proportionales Verhalten \implies P-Glied**Beispiel: Zweiseitiger Hebel**

Laut Hebelgesetz gilt für den zweiseitigen Hebel:

$$l_a \cdot F_a = -l_b \cdot F_b \quad (11.17)$$

l Länge des Hebelarmes

F Kraft am Hebelarm

Setzt man eine der Kräfte als Eingangs- und die andere als Ausgangssignal an, so erhält man das proportionale Übertragungsverhalten:

$$F_a = -\frac{l_b}{l_a} \cdot F_b \quad (11.18)$$

$$x_a = K \cdot x_e \quad (11.19)$$

Der **Übertragungsfaktor K** kann entweder auf dem Weg der theoretischen Prozessanalyse aus den geometrischen Verhältnissen der Hebelarme bestimmt werden

$$K = -\frac{l_b}{l_a} \quad (11.20)$$

oder über ein Experiment, die experimentelle Prozessanalyse, mittels bekannter Eingangssignale, z.B. dem Testsignal Einheitsprung $\mathbf{1}(t)$, und gemessenem Ausgangssignal. In dem Fall ist

$$K = \frac{x_a}{x_e} \quad \text{bzw.} \quad (11.21)$$

$$K = x_a |_{x_e=\mathbf{1}(t)} \quad (11.22)$$

Die charakteristischen Übertragungsverhalten werden durch Einsetzen der entsprechenden Eingangssignale in die Gleichung 11.19 wie folgt bestimmt:

- **Übergangsfunktion $h(t)$**

Laut Definition wird $x_e = \mathbf{1}(t)$ gesetzt. Damit wird

$$h(t) = x_a |_{x_e=\mathbf{1}(t)}$$

$$= K \cdot \mathbf{1}(t)$$

$$h(t) = K \quad (11.23)$$

- **Gewichtsfunktion $g(t)$**

In diesem Fall wird als Eingangssignal der DIRAC-Impuls $x_e = \delta(t)$ verwendet:

$$g(t) = x_a |_{x_e=\delta(t)}$$

$$g(t) = K \cdot \delta(t) \quad (11.24)$$

- **Übertragungsfunktion $G(p)$**

Bei der Übertragungsfunktion muss die Übertragungsgleichung des Zeitbereiches in die Bildebene mittels der LAPLACE-Operation transformiert werden:

$$G(p) = X_a |_{x_e=L\{\delta(t)\}}$$

$$= L\{K \cdot \delta(t)\}$$

$$= K \cdot L\{\delta(t)\}$$

$$G(p) = K \quad (11.25)$$

Da laut Voraussetzung nur lineare Systeme betrachtet werden, ist $K = const.$ Außerdem gilt $L\{\delta(t)\} = 1$.

11.4.2.2 Integrales Verhalten \implies I-Glied

Beispiel: Füllvorgang mit konstantem Volumenstrom

Die Füllung eines Behälters mit einer Grundfläche A durch einen konstanten Volumenstrom \dot{V} führt zu einem Anstieg der Wasserhöhe h in diesem Behälter (siehe Abbildung 11.13).

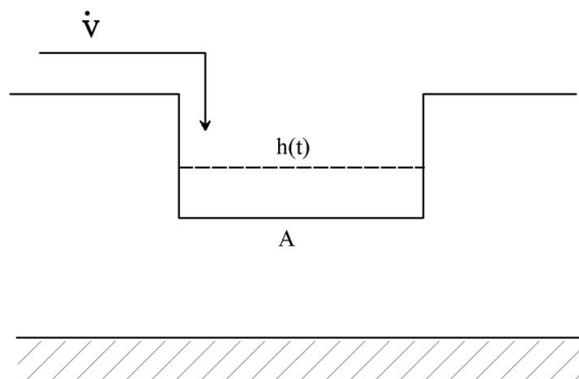


Abbildung 11.13: Füllvorgang eines Behälters mit konstantem Volumenstrom

Untersucht man die Abhängigkeit des Anstiegs der Wasserhöhe h von dem einfließenden Volumenstrom \dot{V} , so findet man folgenden Zusammenhang:

$$V = A \cdot h \quad (11.26)$$

$$V = \int_0^t \dot{V} dt \quad (11.27)$$

Setzt man diese beiden Volumina gleich und löst die Gleichung nach der gesuchten Größe H auf, so erhält man:

$$h = \frac{1}{A} \int_0^t \dot{V} dt \quad (11.28)$$

Betrachtet man wieder das System als Übertragungsglied mit x_e und x_a , so lautet die Gleichung:

$$x_a = K \int_0^t x_e dt \quad (11.29)$$

Diese Gleichung stellt ein integrales Übertragungsverhalten mit einem Proportionalitätsfaktor K dar. Dies kann auch zerlegt werden in eine Reihenschaltung (siehe Abschnitt 11.4.3 Kombiniertes Übertragungsverhalten, Seite 336) eines reinen P-Gliedes und eines reinen I-Anteils.

Für $\dot{V} = const.$ bzw. $x_e = const.$ ergibt sich:

$$h = \frac{1}{A} \dot{V} \cdot t \quad (11.30)$$

$$x_a = K \cdot x_e \cdot t \quad (11.31)$$

Auch hier kann die Übertragungskonstante K auf zwei Wegen, mittels der theoretischen oder der experimentellen Prozessanalyse, ermittelt werden. Im ersten Fall, der Gleichung 11.28, die auf der Basis physikalischer Gesetze abgeleitet wurde, ist eindeutig, dass

$$K = \frac{1}{A} \quad (11.32)$$

ist.

Im zweitem Fall, der experimentellen Prozessanalyse auf Basis der Gleichung 11.29, ergibt sich unter der Bedingung, dass $x_e = const.$ ist:

$$x_a = K \cdot x_e \cdot t \quad (11.33)$$

$$K \cdot x_e = \frac{x_{a1} - x_{a0}}{t_1 - t_0} \quad (11.34)$$

Insbesondere wenn als x_e der Einheitssprung $x_e = \mathbf{1}(t)$ verwendet wird, kann K aus dem Anstieg der Geraden $x_a = K \cdot t |_{x_e=\mathbf{1}(t)}$ bestimmen werden:

$$K = \frac{x_{a1} - x_{a0}}{t_1 - t_0} |_{x_e=\mathbf{1}(t)} \quad (11.35)$$

Für $t_0 = 0$ und $x_{a0} = 0$ ergibt sich:

$$K = \frac{x_{a1}}{t_1} |_{x_e=\mathbf{1}(t)} \quad (11.36)$$

Die charakteristischen Übertragungsverhalten werden durch Einsetzen der entsprechenden Eingangssignale in die Gleichung 11.29 wie folgt bestimmt:

- **Übergangsfunktion $h(t)$**

Laut Definition wird $x_e = \mathbf{1}(t)$ gesetzt. Damit wird:

$$\begin{aligned} h(t) &= x_a |_{x_e=\mathbf{1}(t)} \\ &= K \int_0^t \mathbf{1}(t) dt \\ h(t) &= K \cdot t \end{aligned} \quad (11.37)$$

Beachte den Unterschied zwischen h (Wasserhöhe) und $h(t)$ (Übergangsfunktion).

- **Gewichtsfunktion $g(t)$**

In diesem Fall wird als Eingangssignal der DIRAC-Impuls $x_e = \delta(t)$ verwendet:

$$\begin{aligned} g(t) &= x_a |_{x_e=\delta(t)} \\ &= K \int_0^t \delta(t) dt \\ g(t) &= K \end{aligned} \quad (11.38)$$

Da laut Definition gilt:

$$\int_0^t \delta(t) dt = 1$$

- **Übertragungsfunktion $G(p)$**

Bei der Übertragungsfunktion muss die Übertragungsgleichung des Zeitbereiches in

die Bildebene mittels der LAPLACE-Operation transformiert werden:

$$\begin{aligned}
 G(p) &= X_a |_{x_e=L\{\delta(t)\}} \\
 &= L\left\{K \int_0^t \delta(t) dt\right\} \\
 &= K \cdot L\left\{\int_0^t \delta(t) dt\right\} = K \cdot L\{1\} \\
 G(p) &= K \cdot \frac{1}{p}
 \end{aligned} \tag{11.39}$$

Da hier gilt:

$$\int_0^t \delta(t) dt = 1 \tag{11.40}$$

$$L\{1\} = \frac{1}{p} \tag{11.41}$$

11.4.2.3 Differentielles Verhalten \implies **D**-Glied

Beispiel:

Übertragungsglieder mit differentiellm Verhalten kommen u.a. in der Elektrotechnik vor und dienen in der Steuerungspraxis dazu, Prozesse mit einem bestimmten Masse- bzw. Energieeintrag in eine bestimmte Zielrichtung zu beeinflussen. In der wasserwirtschaftlichen Praxis treten sie u.a. im Zusammenhang mit Schwingungserscheinungen wie Druckstößen in Rohrleitungen auf. Differentielles Übertragungsverhalten ist durch die folgende Gleichung 11.42 charakterisiert.

$$x_a = K \cdot \frac{dx_e}{dt} \tag{11.42}$$

- **Übergangsfunktion $h(t)$**

Laut Definition wird $x_e = \mathbf{1}(t)$ gesetzt. Damit wird:

$$\begin{aligned}
 h(t) &= x_a |_{x_e=\mathbf{1}(t)} \\
 &= K \frac{d\mathbf{1}(t)}{dt} \\
 h(t) &= K \cdot \delta(t)
 \end{aligned} \tag{11.43}$$

- **Gewichtsfunktion $g(t)$**

In diesem Fall wird als Eingangssignal der DIRAC-Impuls $x_e = \delta(t)$ verwendet:

$$\begin{aligned}
 g(t) &= x_a |_{x_e=\delta(t)} \\
 &= K \cdot \frac{d\delta(t)}{dt} \\
 g(t) &= n.d. \tag{11.44}
 \end{aligned}$$

- **Übertragungsfunktion $G(p)$**

Bei der Übertragungsfunktion muss die Übertragungsgleichung des Zeitbereiches in die Bildebene mittels der LAPLACE-Operation transformiert werden:

$$\begin{aligned}
 G(p) &= X_a |_{X_e=L\{\delta(t)\}} \\
 &= L\left\{K \frac{d\delta(t)}{dt}\right\} \\
 &= K \cdot L\left\{\frac{d\delta(t)}{dt}\right\} = K \cdot (pL\{\delta(t)\} - \delta(0)) \\
 G(p) &= K \cdot p \tag{11.45}
 \end{aligned}$$

11.4.2.4 Verzögerung 1. Ordnung \implies **PT₁**-Glieder

Beispiel: Füllvorgang mit variabler Füllmenge

Wenn ein Behälter über einen hydraulischen Widerstand R_{hydr} (z.B. Schieber, Rohrleitung) mit einem Vorfluter verbunden sind, wird sich nach unendlich langer Zeit in dem Behälter der gleiche Wasserstand einstellen, wie im Vorfluter. Der Behälter soll die Grundfläche A haben, der Wasserstand im Vorfluter ist entsprechend h_{Fl} und im Behälter h . Gesucht ist die Zeitabhängigkeit des Wasserstandes h , wenn der Wasserstand h_{Fl} über den gesamten Zeitraum den Wert h_{Fl} hat. h soll zum Zeitpunkt $t = 0$ gleich Null gewesen sein (siehe Abbildung 11.14). Damit gelten folgende Gleichungen:

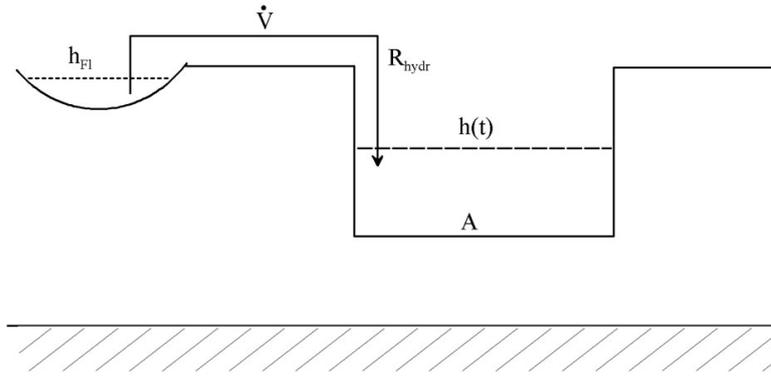


Abbildung 11.14: Füllvorgang eines Behälters mit variablem Volumenstrom

$$V = A \cdot h \quad (11.46)$$

$$h = \frac{1}{A} \int_0^t \dot{V} dt \quad \text{bzw.} \quad (11.47)$$

$$\dot{V} = A \cdot \frac{dh}{dt} \quad (11.48)$$

$$\dot{V} = \frac{(h_{Fl} - h)}{R_{hydr}} \quad (11.49)$$

$$A \cdot \frac{dh}{dt} = \frac{(h_{Fl} - h)}{R_{hydr}}$$

$$A \cdot \frac{dh}{dt} + \frac{h}{R_{hydr}} = \frac{h_{Fl}}{R_{hydr}}$$

$$A \cdot R_{hydr} \frac{dh}{dt} + h = h_{Fl} \quad (11.50)$$

Betrachtet man wieder das System als Übertragungsglied mit x_e und x_a , so lautet die Gleichung unter Berücksichtigung, dass $T = A_2 \cdot R_{hydr}$:

$$T \cdot \frac{dx_a}{dt} + x_a = K x_e \quad (11.51)$$

Diese DGL hat die Lösung (siehe Abschnitt 5.2.1 Lösung von DGL, Seite 117) für den Fall, dass $x_e = const$ eine Konstante ist:

$$x_a = K x_e \left(1 - e^{-\frac{t}{T}} \right) \quad (11.52)$$

Methoden zur Bestimmung der Parameter K und T sind im Abschnitt 12.1 Modellbestimmung, Seite 344, detailliert beschrieben.

Die charakteristischen Übertragungsverhalten werden durch Einsetzen der entsprechenden Eingangssignale in die Gleichung 11.51 wie folgt bestimmt:

- **Übergangsfunktion $h(t)$**

Laut Definition wird $x_e = \mathbf{1}(t)$ gesetzt. Damit wird:

$$\begin{aligned} h(t) &= x_a |_{x_e=\mathbf{1}(t)} \\ &= \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right) \cdot K \cdot \mathbf{1}(t) \\ h(t) &= K \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right) \end{aligned} \quad (11.53)$$

Beachte den Unterschied zwischen h (Wasserhöhe) und $h(t)$ (Übergangsfunktion).

- **Gewichtsfunktion $g(t)$**

In diesem Fall wird als Eingangssignal der DIRAC-Impuls $x_e = \delta(t)$ verwendet. Die Gewichtsfunktion läßt sich als Differential der Übergangsfunktion darstellen:

$$\begin{aligned} g(t) &= x_a |_{x_e=\delta(t)} = \frac{dh(t)}{dt} \\ &= \frac{d\left(K \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right)\right)}{dt} \\ g(t) &= \frac{K}{T} e^{-\frac{t}{T}} \end{aligned} \quad (11.54)$$

- **Übertragungsfunktion $G(p)$**

Bei der Übertragungsfunktion muss die Übertragungsgleichung des Zeitbereiches in die Bildebene mittels der LAPLACE-Operation transformiert werden. Hier geht man von der DGL des Übertragungsverhaltens aus (siehe Gleichung 11.51):

$$\begin{aligned} G(p) &= X_a |_{X_e=L\{\delta(t)\}} \\ T \frac{dx_a}{dt} + x_a &= K x_e \end{aligned} \quad (11.55)$$

Die LAPLACE-transformierte Form lautet (siehe Abschnitt 5.3.3 Lösung von DGL mittels LAPLACE-Transformation, Seite 148):

$$T \cdot p \cdot X_a - x_{a0} + X_a = L\{K \cdot \delta(t)\} \quad (11.56)$$

$$\text{mit } L\{\delta(t)\} = 1 \quad x_{a0} = 0$$

$$G(p) = X_a |_{X_e=L\{\delta(t)\}} = \frac{K}{1 + T \cdot p} \quad (11.57)$$

11.4.2.5 Verzögerung 2. Ordnung \implies **PT₂-Glied**
Beispiel: Füllvorgang von zwei kaskadierten Behältern mit variabler Füllmenge

Zwei Behälter mit den Grundflächen A_1 und A_2 sowie den Wasserständen h_1 und h_2 sind kaskadenartig hintereinander geschaltet. Der erste ist wie beim vorhergehenden Beispiel zum Verzögerungsverhalten 1. Ordnung angeordnet und über den hydraulischen Widerstand $R_{hydr.1}$ mit dem Vorfluter verbunden. Der zweite ist an den ersten Behälter über den Widerstand $R_{hydr.2}$ angekoppelt. Der Wasserstand im Vorfluter wird auf den konstanten Wert h_{Fl} gehalten (siehe Abbildung 11.15) Der Wasserstand im ersten Behälter ergibt sich dann

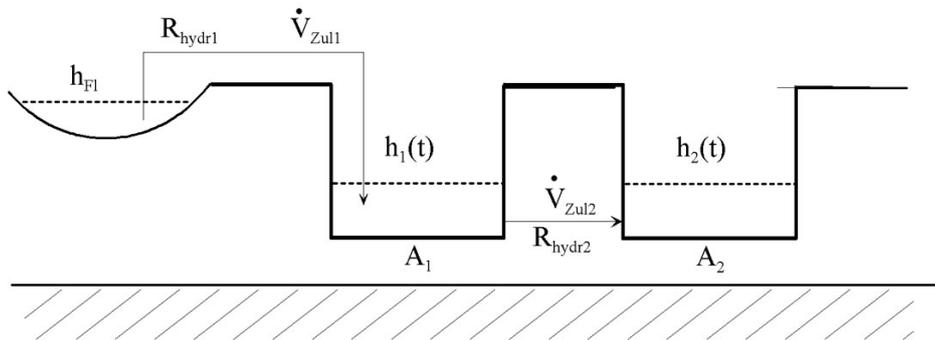


Abbildung 11.15: Gekoppelte Speicherkaskade

entsprechend der Herleitung nach Gleichung 11.50 zu:

$$A_1 \cdot R_{hydr.1} \frac{dh_1}{dt} + h_1 = h_{Fl} \quad (11.58)$$

bzw. mit $T_1 = A_1 \cdot R_{hydr.1}$ zu:

$$T_1 \frac{dh_1}{dt} + h_1 = h_{Fl} \quad (11.59)$$

Der Wasserstand im zweiten Behälter ergibt sich analog zu:

$$A_2 \cdot R_{hydr.2} \frac{dh_2}{dt} + h_2 = h_1 \quad (11.60)$$

bzw. mit $T_2 = A_2 \cdot R_{hydr.2}$ zu:

$$T_2 \frac{dh_2}{dt} + h_2 = h_1 \quad (11.61)$$

Nach Einsetzen der Gleichung 11.61 in Gleichung 11.59 erhält man:

$$T_1 \frac{d(T_2 \frac{dh_2}{dt} + h_2)}{dt} + T_2 \frac{dh_2}{dt} + h_2 = h_{Fl} \quad (11.62)$$

$$T_1 T_2 \frac{d^2 h_2}{dt^2} + (T_1 + T_2) \frac{dh_2}{dt} + h_2 = h_{Fl} \quad (11.63)$$

Betrachtet man wieder das System als Übertragungsglied mit x_e und x_a , so lautet die Gleichung:

$$T_1 T_2 \frac{d^2 x_a}{dt^2} + (T_1 + T_2) \frac{dx_a}{dt} + x_a = K x_e \quad (11.64)$$

Diese DGL hat die Lösung (siehe Abschnitt 5.2.2.2 Lösung von DGL, Seite 131) für den Fall, dass $x_e = \text{const}$ eine Konstante ist. Die Ermittlung der dabei auftretenden Parameter K , T_1 und T_2 sowie die Lösungsschritte werden im Abschnitt 12.2 Übertragungsverhalten mit Verzögerung zweiter Ordnung detailliert beschrieben.

$$x_a = K x_e \left(1 - e^{-\frac{t}{T_1}}\right) \left(1 - e^{-\frac{t}{T_2}}\right) \quad (11.65)$$

Die charakteristischen Übertragungsverhalten werden durch Einsetzen der entsprechenden Eingangssignale in die Gleichung 11.64 wie folgt bestimmt:

- **Übergangsfunktion $h(t)$**

Laut Definition wird $x_e = \mathbf{1}(t)$ gesetzt. Damit wird

$$\begin{aligned} h(t) &= x_a |_{x_e=\mathbf{1}(t)} \\ &= K \cdot \mathbf{1}(t) \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{T_1}}\right) \left(1 - e^{-\frac{t}{T_2}}\right) \\ h(t) &= K \left(1 - e^{-\frac{t}{T_1}}\right) \left(1 - e^{-\frac{t}{T_2}}\right) \end{aligned} \quad (11.66)$$

Beachte den Unterschied zwischen h (Wasserhöhe) und $h(t)$ (Übergangsfunktion).

- **Gewichtsfunktion $g(t)$**

In diesem Fall wird als Eingangssignal der DIRAC-Impuls $x_e = \delta(t)$ verwendet. Die Gewichtsfunktion läßt sich als Differential der Übergangsfunktion darstellen:

$$\begin{aligned} g(t) &= x_a |_{x_e=\delta(t)} = \frac{dh(t)}{dt} \\ &= \frac{d \left(K \left(1 - e^{-\frac{t}{T_1}}\right) \left(1 - e^{-\frac{t}{T_2}}\right) \right)}{dt} \\ g(t) &= K \left(\frac{e^{-\frac{t}{T_1}}}{T_1} + \frac{e^{-\frac{t}{T_2}}}{T_2} \right) \end{aligned} \quad (11.67)$$

- **Übertragungsfunktion $G(p)$**

Bei der Übertragungsfunktion muss die Übertragungsgleichung des Zeitbereiches in die Bildebene mittels der LAPLACE-Operation transformiert werden. Hier geht man von der DGL des Übertragungsverhalten aus (siehe Gleichung 11.64).

$$\begin{aligned} G(p) &= X_a |_{X_e=L\{\delta(t)\}} \\ T_1 T_2 \frac{d^2 x_a}{dt^2} + (T_1 + T_2) \frac{dx_a}{dt} + x_a &= K \cdot x_e \end{aligned} \quad (11.68)$$

Die LAPLACE-transformierte Form lautet (siehe Abschnitt 5.3.3 Lösung von DGL mittels LAPLACE-Transformation, Seite 148):

$$T_1 T_2 \cdot p^2 \cdot X_a - p \cdot x_{a0} - x_{a0} + (T_1 + T_2) \cdot p \cdot X_a - x_{a0} + X_a = L\{K \cdot \delta(t)\} \quad (11.69)$$

mit $L\{\delta(t)\} = 1$ und $x_{a0} = 0$

$$T_1 T_2 \cdot p^2 \cdot X_a + (T_1 + T_2) \cdot p \cdot X_a + X_a = K \mid_{X_e=L\{\delta(t)\}} \quad (11.70)$$

$$\frac{K}{T_1 T_2 \cdot p^2 + (T_1 + T_2) \cdot p + 1} = X_a \mid_{X_e=L\{\delta(t)\}}$$

$$G(p) = \frac{K}{(1 + T_1 \cdot p) \cdot (1 + T_2 \cdot p)} \quad (11.71)$$

11.4.2.6 Laufzeitverhalten \implies \mathbf{PT}_L -Glied

Beispiel:

Das Laufzeitverhalten entsteht bei Transportprozessen, ohne dass eine Veränderung an der Bilanz entsteht, d.h. bei reinem Transport ohne Speichereffekt. Damit können diese Prozesse auch durch eine Koordinatentransformation beschrieben werden. Dieses Verhalten spielt auch eine große Rolle, wenn Prozesse mit unterschiedlichen Startpunkten gemeinsam betrachtet werden sollen. In diesen Fällen können die unterschiedlichen Startpunkte als unterschiedliche Laufzeiten aufgefasst werden.

Die Gleichung für dieses Laufzeitverhalten lautet:

$$x_a(t) = K \cdot x_e(t - T_L) \quad (11.72)$$

Die charakteristischen Übertragungsverhalten werden durch Einsetzen der entsprechenden Eingangssignale in die Gleichung 11.72 wie folgt bestimmt:

- **Übergangsfunktion $h(t)$**

Laut Definition wird $x_e = \mathbf{1}(t)$ gesetzt. Damit wird:

$$h(t) = x_a \mid_{x_e=\mathbf{1}(t)}$$

$$= K \cdot \mathbf{1}(t - T_L)$$

$$h(t) = K \cdot \mathbf{1}(t - T_L) \quad (11.73)$$

- **Gewichtsfunktion $g(t)$**

In diesem Fall wird als Eingangssignal der DIRAC-Impuls $x_e = \delta(t)$ verwendet:

$$\begin{aligned} g(t) &= x_a |_{x_e=\delta(t)} \\ &= K \cdot \delta(t - T_L) \\ g(t) &= K \cdot \delta(t - T_L) \end{aligned} \quad (11.74)$$

Da laut Definition gilt:

$$\int_0^t \delta(t) dt = 1$$

- **Übertragungsfunktion $G(p)$**

Bei der Übertragungsfunktion muss die Übertragungsgleichung 11.72 des Zeitbereiches in die Bildebene mittels der LAPLACE-Operation transformiert werden:

$$\begin{aligned} G(p) &= X_a |_{x_e=L\{\delta(t)\}} \\ &= L\{K \cdot \delta(t - T_L)\} \\ &= K \cdot L\{\delta(t - T_L)\} \\ &= K \cdot e^{-T_L p} L\{\delta(t)\} \\ G(p) &= K \cdot e^{-T_L p} \end{aligned} \quad (11.75)$$

Da laut Verschiebungssatz der LAPLACE-Transformation (siehe Abschnitt 5.3.2 LAPLACE-Transformation, Seite 142) gilt:

$$L\{f(t - a)\} = e^{-ap} L\{f(t)\} \quad (11.76)$$

und $L\{\delta(t)\} = 1$ ist.

11.4.2.7 Übersicht über Grundübertragungsverhalten

In Abbildung 11.16 ist ein Überblick über die Sprungantwortfunktionen der verschiedenen Grundformen des Übertragungsverhaltens zusammengefasst.

Die verschiedenen Arten der mathematischen Darstellung des Übertragungsverhaltens, die Übergangs-, Gewichts- und Übertragungsfunktion, sind für die Grundübertragungsglieder in Tabelle 11.7 dargestellt.

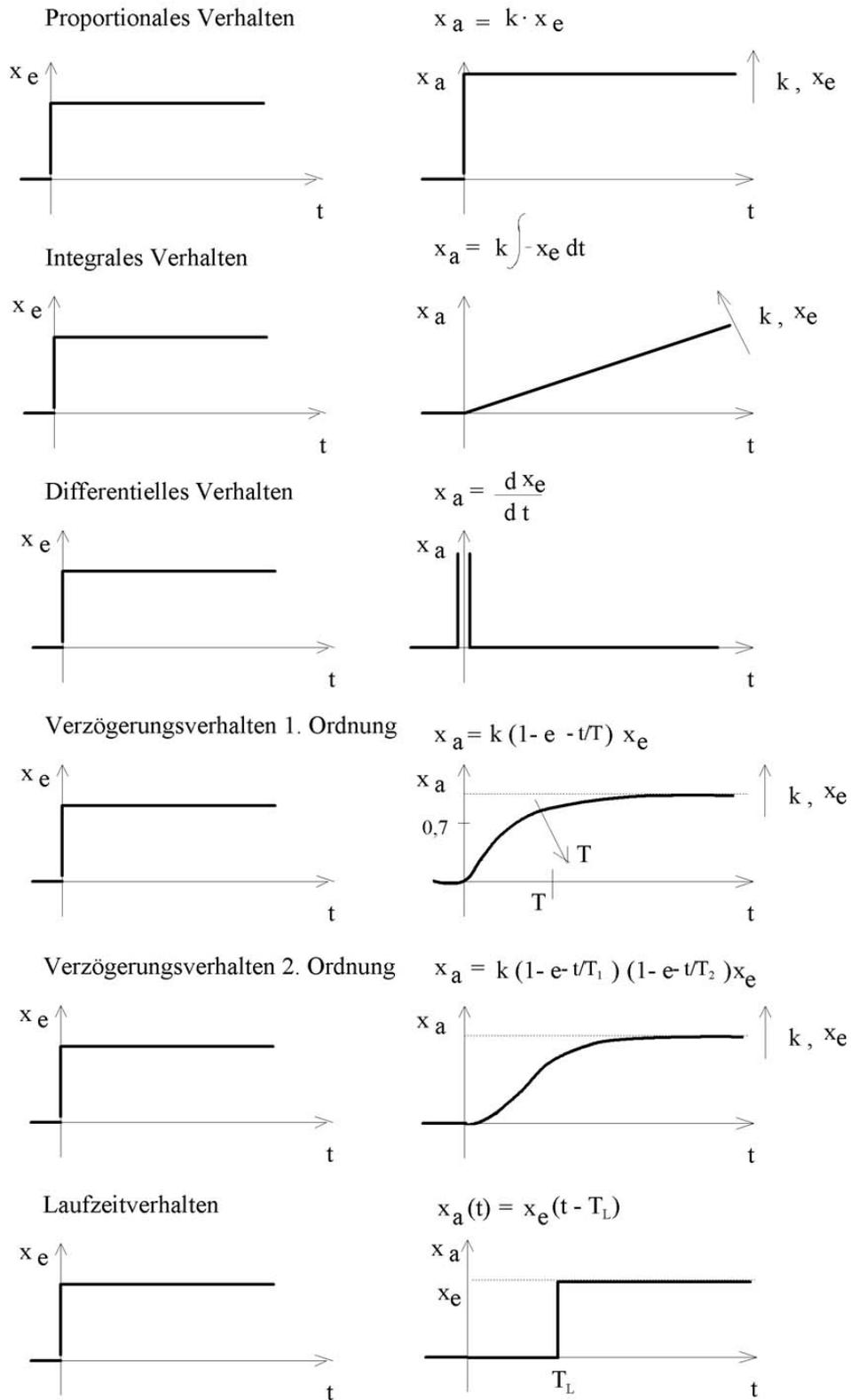


Abbildung 11.16: Grundformen des Übertragungsverhaltens

Tabelle 11.7: Grundübertragungsverhalten mit mathematischer Beschreibung

Verhalten	Bezeichnung		
	Übergangsfunktion $\mathbf{h}(t) = \mathbf{x}_a(t) \mid_{x_e=1(t)}$	Gewichtsfunktion $\mathbf{g}(t) = \mathbf{x}_a(t) \mid_{x_e=\delta(t)}$	Übertragungsfunktion $\mathbf{G}(p) = \mathbf{X}_a(p) \mid_{L\{x_e=\delta(t)\}}$
Anreg. $x_e(t)$	Einheits sprung $1(t)$	DIRAC-Impuls $\delta(t)$	DIRAC-Impuls $L\{\delta(t)\} = 1$
P proportional	K	$K \delta(t)$	K
I integral	$K \cdot t$	K	$\frac{K}{p}$
D differential	$K \cdot \delta(t)$		$K \cdot p$
PT ₁ Verzöger. 1. Ordn.	$K \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right)$	$\frac{K}{T} e^{-\frac{t}{T}}$	$\frac{K}{1+pT}$
PT ₂ Verzöger. 2. Ordn.	$K \left(1 - e^{-\frac{t}{T_1}}\right) \left(1 - e^{-\frac{t}{T_2}}\right)$	$K \left(\frac{e^{-\frac{t}{T_1}}}{T_1} + \frac{e^{-\frac{t}{T_2}}}{T_2}\right)$	$\frac{K}{(1+pT_1)(1+pT_2)}$
PT _L Laufzeit	$K \cdot 1(t - T_L)$	$K \cdot \delta(t - T_L)$	$K \cdot e^{-T_L p}$

11.4.3 Kombiniertes Übertragungsverhalten

Die Zusammenschaltung von linearen Übertragungsgliedern lässt sich auf drei Grundtypen,

- die **Reihenschaltung**,
- die **Parallelschaltung** und
- die **Kreisschaltung** (auch als Rückführung oder Rückkopplung bezeichnet)

zurückführen. Dafür ergeben sich die in Abbildung 11.17 dargestellten Übertragungsfunktionen. Die mathematische Beschreibung ist in Tabelle 11.8 dargestellt.

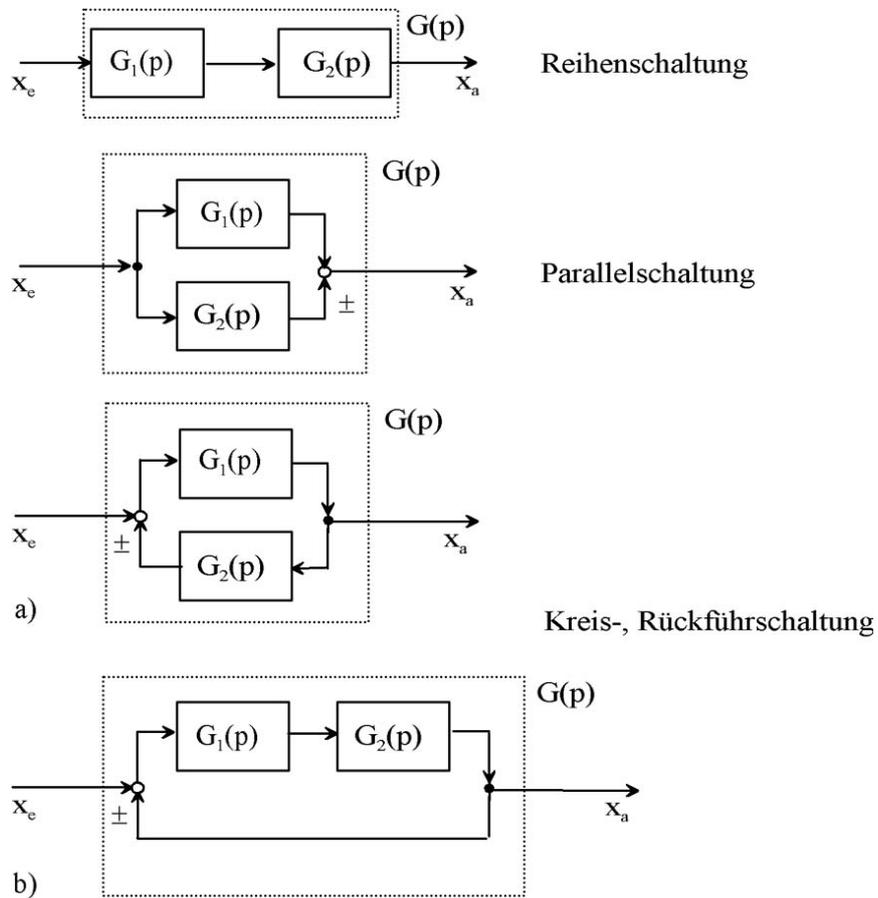


Abbildung 11.17: Zusammenschaltung linearer Übertragungsglieder

Tabelle 11.8: Zusammengesetzte Übertragungsglieder

Schaltungsart	Differentialgleichung	Gewichtsfunktion	Übertragungsfunktion
Reihe	$x_a(t) = \frac{B_1(D)B_2(D)}{A_1(D)A_2(D)} x_e(t)$	$g(t) = g_1(t) * g_2(t)$	$G(p) = G_1(p) \cdot G_2(p)$
Parallel	$x_a(t) = \frac{[B_1(D)A_2(D) \pm B_2(D)A_1(D)]}{A_1(D)A_2(D)} x_e(t)$	$g(t) = g_1(t) \pm g_2(t)$	$G(p) = G_1(p) \pm G_2(p)$
Kreis			$G(p) = \frac{G_1(p)}{1 \pm G_1(p) \cdot G_2(p)}$

Entsprechend dem Bildungsgesetz von in **Reihe geschalteten Übertragungsgliedern** lässt sich die Übertragungsfunktion eines Verzögerungsgliedes 2. Ordnung als zwei in Reihe geschaltete Verzögerungsglieder 1. Ordnung (siehe Abbildung 11.18) berechnen:

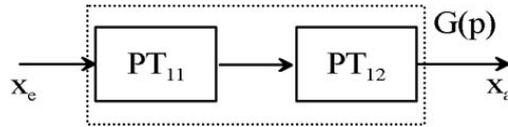


Abbildung 11.18: Reihenschaltung zweier PT_1 -Glieder

$$G_1(p) = \frac{K_1}{1 + pT_{11}}$$

$$G_2(p) = \frac{K_2}{1 + pT_{12}}$$

$$G(p) = G_1(p) \cdot G_2(p) \quad (11.77)$$

$$= \frac{K_1}{1 + pT_{11}} \cdot \frac{K_2}{1 + pT_{12}}$$

$$G(p) = \frac{K}{(1 + pT_{11})(1 + pT_{12})} \implies \text{PT}_2\text{-Glieder} \quad (11.78)$$

Bei linearen Übertragungsgliedern kann das kombinierte Übertragungsverhalten **parallelgeschalteter Übertragungsglieder** aus der additiven Mischung des Grundübertragungsverhaltens einzelner Übertragungsglieder erzeugt werden. Dabei werden die Grundübertragungsglieder mit dem gleichen Eingangssignal belegt und ihre Ausgänge an einer Mischstelle addiert, d.h. die Glieder sind parallel geschaltet (siehe Abbildungen 11.19 und 11.20).

Für das PI-Glied gilt somit:

$$G_1(p) = G_P(p) = K_1$$

$$G_2(p) = G_I(p) = \frac{K_2}{p}$$

$$G(p) = G_1(p) + G_2(p) \quad (11.79)$$

$$G(p) = G_{PI}(p) = K_1 + \frac{K_2}{p} \quad (11.80)$$

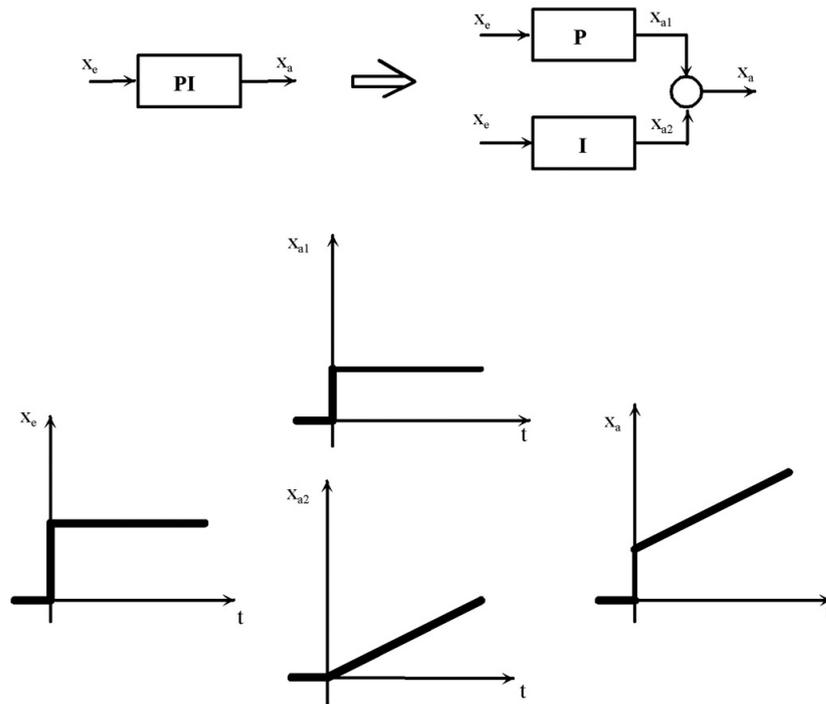


Abbildung 11.19: Realisierung eines PI-Gliedes

Die Übertragungsfunktion für das PID-Glied berechnet sich zu:

$$G_1(p) = G_P(p) = K_1$$

$$G_2(p) = G_I(p) = \frac{K_2}{p}$$

$$G_3(p) = G_D(p) = K_3 \cdot p$$

$$G(p) = G_1(p) + G_2(p) + G_3(p)$$

$$G(p) = G_{PID}(p) = K_1 + \frac{K_2}{p} + K_3 \cdot p \quad (11.81)$$

Die **Kreisschaltung** (Rückkopplungssysteme), wie sie bei geschlossenen Regelvorgängen auftritt, soll an Hand der Füllstandsregelung erklärt werden. Dieser Regelungsprozess (siehe Abbildung 11.21) ist bei GRÄBER "Grundwassermesstechnik" erklärt. Man erkennt, dass das vorwärtsgerichtete Übertragungsglied, die Füllung des Behälters, integrales Übertragungsverhalten hat, die Rückkopplung entsprechend der technischen Konstruktion, dem Schwimmer mit angeschlossenem Hebel und Schieber, ein proportionales Verhalten. Damit ergibt sich für die Berechnung des Gesamtübertragungsverhaltens entsprechend Abbildung 11.17

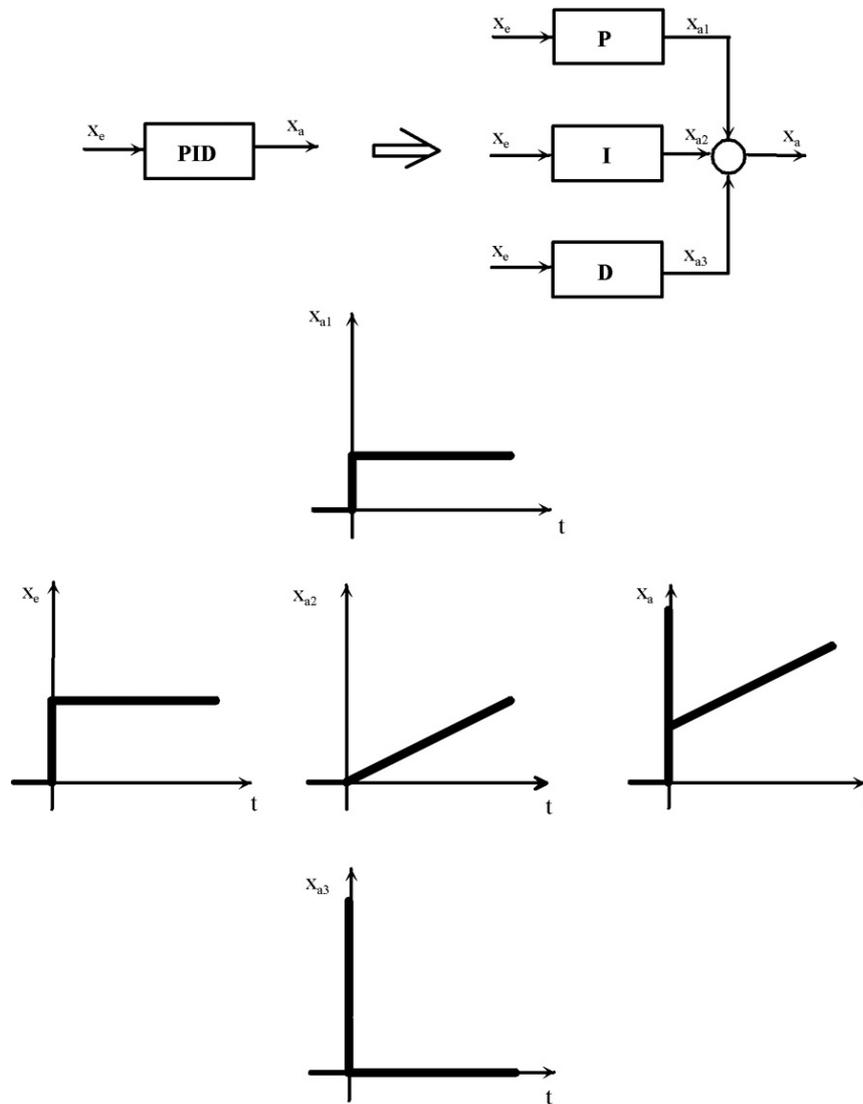


Abbildung 11.20: Realisierung eines PID-Gliedes

(Kreisschaltung, Variante b) und Tabelle 11.8, Seite 337:

$$G_1(p) = G_P(p) = K_1$$

$$G_2(p) = G_I(p) = \frac{K_2}{p} \quad (11.82)$$

$$G(p) = \frac{G_2(p)}{1 + G_1(p) \cdot G_2(p)} \quad (11.83)$$

$$= \frac{\frac{K_2}{p}}{1 + \frac{K_2}{p} \cdot K_1}$$

$$= \frac{K_2}{p + K_1 \cdot K_2} = \frac{\frac{1}{K_1}}{\frac{1}{K_1 K_2} p + 1}$$

$$G(p) = \frac{K}{1 + Tp} \quad \text{mit } T = \frac{1}{K_1 K_2} \quad (11.84)$$

Diese Übertragungsfunktion entspricht einem Verhalten von Verzögerungsgliedern 1. Ordnung.

In der Abbildung 11.21 ist dargestellt, wie man auf experimentellem Weg auch zu dem Übertragungsverhalten gelangt, und es entspricht ebenfalls der Verzögerungscharakteristik.

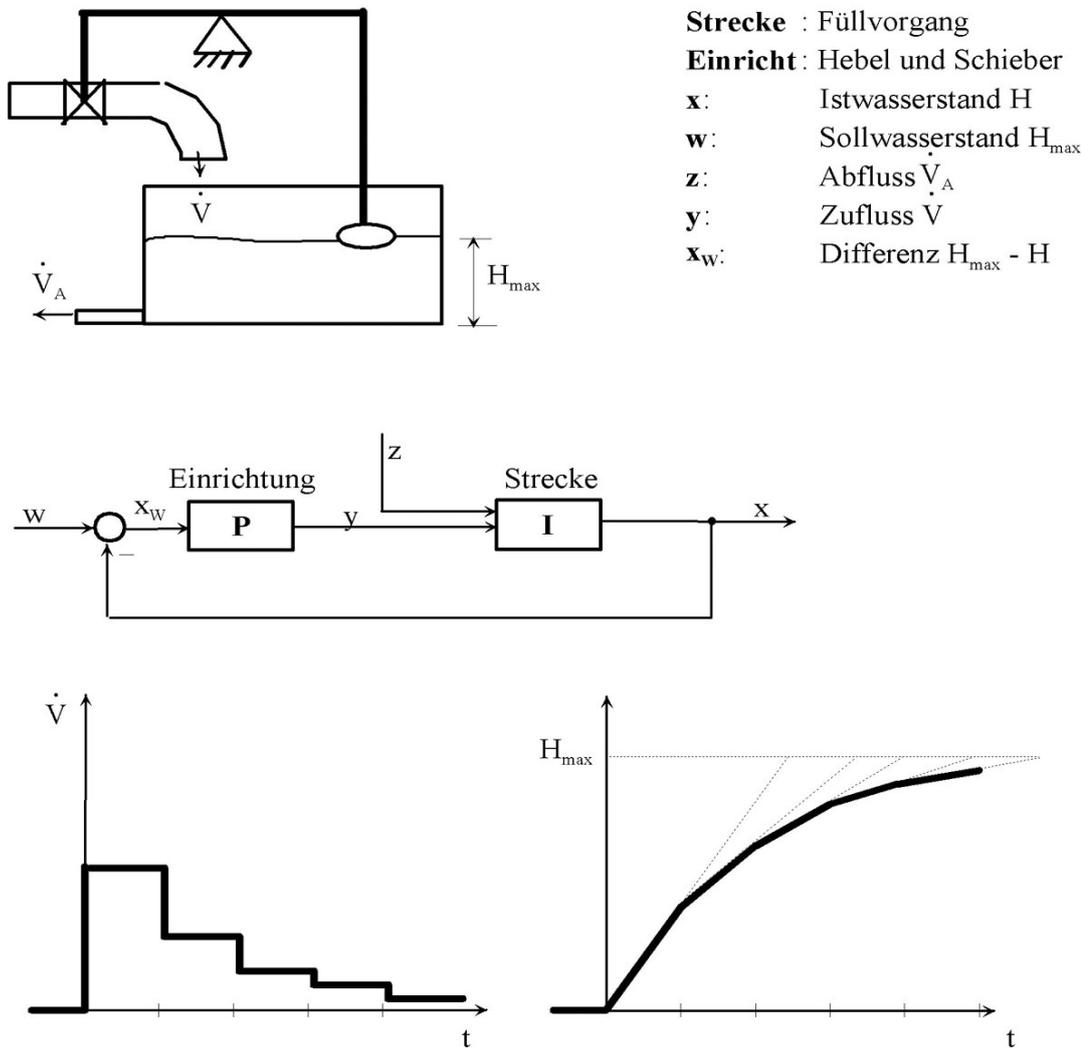


Abbildung 11.21: Rückkopplungssystem zur Wasserstandsregelung

Kapitel 12

Modellbestimmung an Hand von Kenngrößen

In den folgenden Abschnitten werden konkrete Modelle und die Bestimmung ihrer Kenngrößen, der Parameter, beschrieben. Dabei spielen für wasserwirtschaftliche Systeme Verzögerungsglieder 1. und 2. Ordnung eine besondere Rolle. Dieses Verhalten findet man bei Füll- und Transportvorgängen sowohl in der Geohydraulik, in Oberflächengewässern, als auch in Rohrleitungen wieder.

In diesem Abschnitt werden anschauliche Verfahren beschrieben, die teilweise auch grafisch gelöst werden können. Rechentechnische Verfahren, die unter anderem auf den Methoden der Anpassung von Messwerten an Regressionsfunktionen beruhen, werden im Abschnitt IV Indirekte Parameteridentifikation, Seite 383 behandelt. Bei diesen werden Verfahren zur Optimierung, wie z.B. die Methode der kleinsten Fehlerquadrate (MKQ), verwendet.

12.1 Übertragungsverhalten mit Verzögerung erster Ordnung

12.1.1 Mathematische Beschreibung

Das Verhalten von wasserwirtschaftlichen Systemen entsprechend einer Verzögerung 1. Ordnung ist bei allen Füllvorgängen mit Speicherwirkung im Zusammenhang mit Strömungswiderständen zu finden (siehe Abbildung 12.1). Für die Bestimmung der erforderlichen hydraulischen Parameter werden z.B. so genannte Pumpversuche als Füllversuche benutzt, die mittels der im Folgenden beschriebenen Methoden ausgewertet werden können.

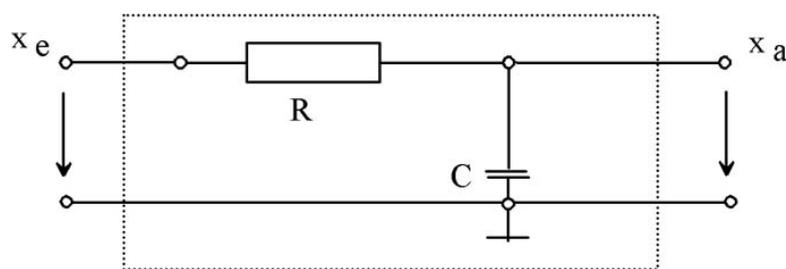


Abbildung 12.1: Ersatzschaltbild eines Übertragungsgliedes mit Verzögerung 1. Ordnung

Im Abschnitt 5.2.1 Lösungsmethoden von gewöhnlichen Differentialgleichungen, Seite 117 wurde gezeigt, dass Systeme, die aus einem Strömungswiderstand und einer Speicherkapazität (siehe Abbildung 12.1) bestehen, durch folgende Differentialgleichung beschrieben

werden können:

$$RC \frac{dx_a}{dt} + x_a = Kx_e(t) \quad (12.1)$$

$$T \frac{dx_a}{dt} + x_a = Kx_e(t) \quad \text{mit } T = RC$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung mit der Randbedingung, dass das Eingangssignal ein Sprungsignal (siehe Abbildung 12.2) ist ($x_e|_{t=0} = x_{e0} \cdot \mathbf{1}(t)$), ergibt sich zu (siehe Abschnitt 5.2.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung, Seite 117):

$$x_a = K \cdot x_{e0} \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right) \quad (12.2)$$

$$h(t) = x_a |_{x_e=\mathbf{1}(t)} = K \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right)$$

Unter Beachtung, dass die Impulsantwort $g(t)$ gleich dem Differential der Sprungantwort ist, erhält man:

$$g(t) = \frac{dh(t)}{dt} = \frac{K}{T} \cdot e^{-\frac{t}{T}} \quad (12.3)$$

Die Differentialgleichung kann auch mittels der LAPLACE-Transformation (siehe Abschnitt 5.3.2 LAPLACE-Transformation, Seite 5.3.2) gelöst werden, und es folgt:

$$\begin{aligned} L \left\{ \frac{dx_a}{dt} + \frac{1}{T}x_a \right\} &= L \left\{ \frac{Kx_e}{T} \right\} \\ L \left\{ \frac{dx_a}{dt} \right\} + L \left\{ \frac{1}{T}x_a \right\} &= L \left\{ \frac{Kx_e}{T} \right\} \\ pL \{x_a\} - x_a|_{t=0} + \frac{1}{T}L \{x_a\} &= \frac{K}{T}L \{x_e\} \end{aligned} \quad (12.4)$$

bzw. mit $x_a|_{t=0} = 0$

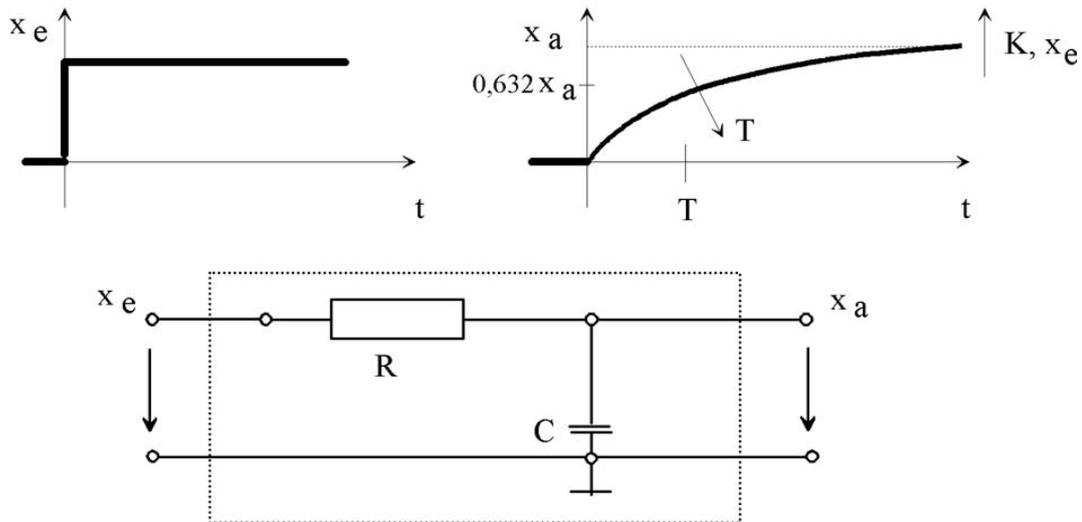
$$L \{x_a\} = \frac{K}{T} \cdot \frac{L \{x_e\}}{\left(p + \frac{1}{T}\right)}$$

Aus dieser Gleichung lässt sich die Übertragungsfunktion $G(p)$ bestimmen, indem man nach Definition als Eingangssignal die LAPLACE-Transformierte des DIRAC-Impulses verwendet und beachtet, dass $L\{\delta(t)\} = 1$ ist.

$$G(p) = L \{x_a\} |_{x_e=L\{\delta(t)\}} = X_a |_{x_e=L\{\delta(t)\}} = \frac{K}{(1 + pT)} \quad (12.5)$$

Diese Ergebnisse sind bereits in Tabelle 11.7, Seite 335 enthalten und konnten somit verifiziert werden.

Wenn eine solche RC-Schaltung (siehe Abbildung 12.2) ein Verzögerungsverhalten 1. Ordnung zeigt, dann kann man eineindeutig umgekehrt schlussfolgern, dass das Verzögerungsverhalten 1. Ordnung eines beliebigen Systems ersatzweise durch ein solche RC-Schaltung


 Abbildung 12.2: Übertragungsverhalten und Schaltung eines PT_1 -Gliedes

nachgebildet werden kann. Die Aufgabe der experimentellen Prozessanalyse besteht nun darin, diese Ersatzparameter aus dem Übertragungsverhalten zu bestimmen. Diese müssen nicht unbedingt physikalisch interpretierbar sein. Es sind Parameter, die in dieser Ersatzschaltung das gleiche Verhalten zeigen wie das Originalsystem. Die Ersatzschaltung ist ein Modell des Originalvorganges.

Zur eindeutigen Beschreibung dieses Verhaltens ist die Bestimmung des Übertragungsfaktors K und der Zeitkonstanten T notwendig. Der Ansatz der experimentellen Prozessanalyse besagt, dass dieses an Hand einer Sprungantwortfunktion möglich ist, d.h., aus der Reaktion des Originalsystems auf ein Sprungsignal ist die eindeutige Bestimmung dieser Konstanten möglich.

Die Bestimmung des **Übertragungsfaktors K** kann aus dem Verhalten des Übertragungsgliedes mit Verzögerung 1. Ordnung für unendliche Zeiten bestimmt werden:

$$x_a = K \cdot x_{e0} \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right) \quad (12.6)$$

mit $t \rightarrow \infty$ erhält man:

$$K = \frac{x_{a\infty}}{x_{e\infty}} \quad (12.7)$$

Für die Sprungsignale gilt:

$$x_{e\ t=0} = x_{e\ t=\infty} \quad (12.8)$$

Damit kann man die Sprungantwort auch in folgender Form formulieren:

$$x_a = x_{a\infty} \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right) \quad (12.9)$$

Aus dem Vergleich zwischen der Eingangskurve und der Ausgangskurve (siehe Abbildung 12.2) bzw. auch aus obiger Gleichung erkennt man, dass im Unendlichen ein proportionales Verhalten vorliegt.

Für die Bestimmung der Zeitkonstante T gibt es mehrere Wege:

- Ermittlung der Zeiten, bei denen ein ganzzahliges Vielfaches der Zeitkonstanten vorliegt
- Ermittlung des Anstieges im Nullpunkt

12.1.2 Zeitkonstante aus ganzzahligem Vielfachen

Für den Fall, dass die Zeit ein ganzzahliges Vielfaches der Zeitkonstante ist, erhält man:

$$x_{at=nT} = x_{a\infty} (1 - e^{-n}) \quad \text{mit } n = \frac{t}{T} = 0; 1; 2; 3; \dots \quad (12.10)$$

Für das Sprungsignal als Eingangsfunktion gilt definitionsgemäß $x_{e0} = x_{e\infty}$ und damit folgende Tabelle:

$n = \frac{t}{T}$	0	1	1, 2	2	3	4
$\frac{x_a}{x_{a\infty}}$	0	0, 632	0, 699	0, 865	0, 950	0, 982

Mit:

$$\frac{x_{at=nT}}{x_{a\infty}} = (1 - e^{-n}) \quad (12.11)$$

Diese Tabelle kann so ausgewertet werden, dass man den Punkt auf der Ordinate sucht, bei dem das Verhältnis $x_a/x_{a\infty}$ einen bestimmten Wert besitzt. Zu diesem Punkt auf der Kurve gehört entsprechend dieser Tabelle ein bestimmtes Verhältnis der Zeit t zur Zeitkonstanten T (siehe Abbildung 12.3).

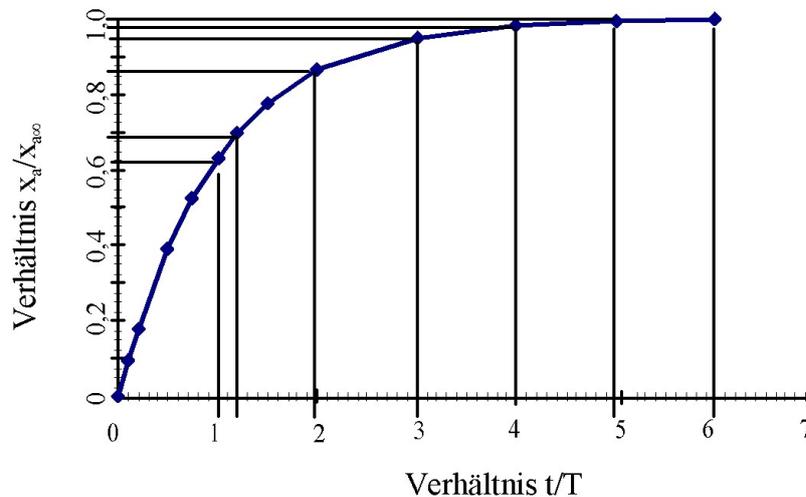


Abbildung 12.3: Bestimmung der Zeitkonstanten aus ihren Vielfachen

12.1.3 Zeitkonstante aus Anstieg

Die Zeitkonstante kann auch aus der Tangente an einem beliebigen Punkt t berechnet werden. Entsprechend Gleichung 12.9 gilt:

$$x_a = x_{a\infty} \left(1 - e^{-\frac{t}{T}}\right)$$

$$\frac{dx_a}{dt} = \frac{1}{T} x_{a\infty} e^{-\frac{t}{T}} \quad \text{für } t = 0 \quad (12.12)$$

$$\left. \frac{dx_a}{dt} \right|_{t=0} = \frac{x_{a\infty}}{T}$$

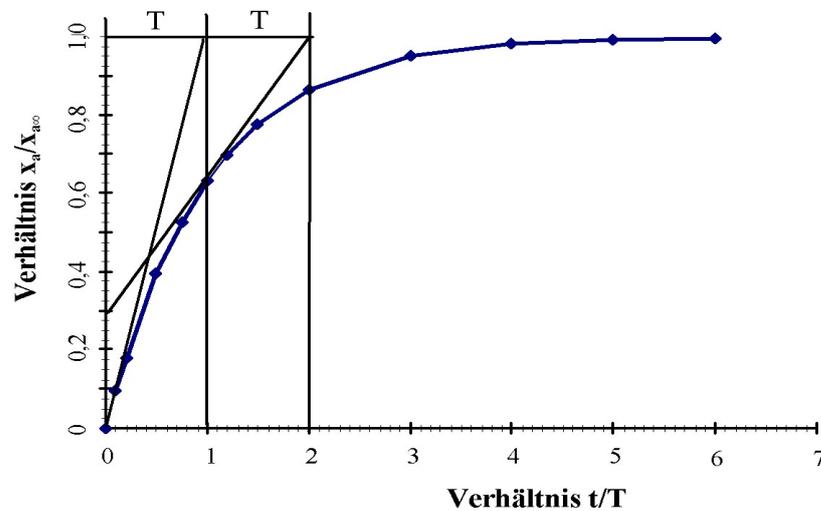


Abbildung 12.4: Tangentenschnittpunkt und Zeitkonstante

Beim Aufstellen der Geradengleichung für diese Tangente kann man einen Schnittpunkt mit der Asymptote der Sprungantwortfunktion $x_{a\infty}$ sehen. Dieser Schnittpunkt hat gerade die Entfernung $t_{Schn} = T$.

$$x_{Tang} = \frac{x_{a\infty}}{T} t_{Schn} \equiv x_{a\infty}$$

$$t_{Schn} = T$$

Da die Messfehler am Anfang einer Messreihe, d.h. zum Zeitpunkt Null, meistens am größten sind, kann man die Tangente auch an einer beliebiger Stelle anlegen. Die Zeitdifferenz zwischen Tangentenpunkt und Schnittpunkt mit der Asymptote der Sprungantwort ist dann gleich der Zeitkonstanten, da die e -Funktion einen konstanten Anstieg besitzt (siehe Abbildung 12.4).

12.2 Übertragungsverhalten mit Verzögerung zweiter Ordnung

12.2.1 Mathematische Beschreibung

Das Verhalten wasserwirtschaftlicher Systeme entsprechend einer Verzögerung 2. Ordnung ist bei allen Transportvorgängen mit Speicherwirkung im Zusammenhang mit Strömungswiderständen zu finden (siehe Abbildung 12.5). Für die Bestimmung der zugehörigen hydraulischen Transportparameter werden die so genannten Tracer-Versuche genutzt, die mittels der im Folgenden beschriebenen Methoden ausgewertet werden können. Auch hier kann man von der Lösung einer entsprechenden Differentialgleichung ausgehen. Zum Ersatzschaltbild

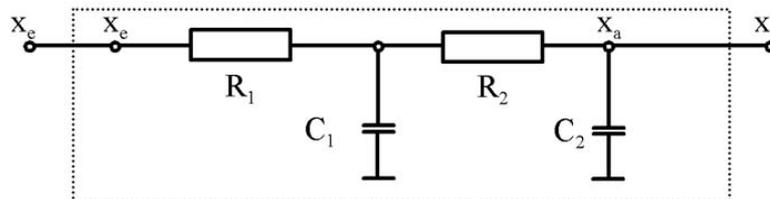


Abbildung 12.5: Ersatzschaltbild eines Übertragungsgliedes mit Verzögerung 2. Ordnung

(siehe Abbildung 12.5) kann man folgende Differentialgleichung aufstellen:

$$R_1 C_1 \frac{dx_{a1}}{dt} + x_{a1} = K_1 x_{e1} \quad (12.13)$$

$$R_2 C_2 \frac{dx_{a2}}{dt} + x_{a2} = K_2 x_{e2} \quad (12.14)$$

Mit den Koppelbedingungen

$$x_{e2} = x_{a1} \quad (12.15)$$

$$x_e = x_{e1}$$

$$x_a = x_{a2}$$

und den Zeitkonstanten

$$T_1 = R_1 C_1 \quad (12.16)$$

$$T_2 = R_2 C_2$$

erhält man:

$$\begin{aligned}
 T_1 \frac{dx_{a1}}{dt} + x_{a1} &= K_1 x_e \\
 \frac{(T_2 \frac{dx_a}{dt} + x_a)}{K_2} &= x_{a1} \\
 T_1 \frac{d(\frac{T_2 \frac{dx_a}{dt} + x_a}{K_2})}{dt} + \frac{(T_2 \frac{dx_a}{dt} + x_a)}{K_2} &= K_1 x_e \\
 T_1 T_2 \frac{d^2 x_a}{dt^2} + T_1 \frac{dx_a}{dt} + T_2 \frac{dx_a}{dt} + x_a &= K_1 K_2 x_e \\
 T_1 T_2 \frac{d^2 x_a}{dt^2} + \frac{dx_a}{dt} (T_1 + T_2) + x_a &= K x_e \tag{12.17}
 \end{aligned}$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung erhält man z.B. über die Ansatzmethode (siehe Abschnitt 5.2.2.2 DGL vom Typ b, Seite 131).

Die Charakteristengleichung der homogenen DGL lautet:

$$a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \tag{12.18}$$

wobei $a = T_1 T_2$,

$$b = T_1 + T_2 \quad \text{und}$$

$$c = 1 \quad \text{ist.}$$

Mit den neuen Konstanten $d = \frac{b}{a}$ und $f = \frac{c}{a}$ erhält man:

$$\lambda^2 + d\lambda + f = 0 \tag{12.19}$$

$$\lambda_{1,2} = -\frac{d}{2} \pm \sqrt{\frac{d^2}{4} - f}$$

Bei der Lösung dieser quadratischen Gleichung kann man drei Fälle je nach Wert des Radikanten unterscheiden. Für die hier betrachteten technischen Systeme spielt nur der Fall des positiven, von Null verschiedenen Radikanten eine Rolle. Dieser ergibt sich, wenn:

$$\frac{d^2}{4} > f, \text{ bzw. } b^2 > 2 \cdot c \cdot a$$

$$(T_1 + T_2)^2 > 2 \cdot (T_1 \cdot T_2)$$

Damit erhält man:

$$\begin{aligned}
 \lambda_{1,2} &= -\frac{d}{2} \pm \sqrt{\frac{d^2}{4} - f} \\
 &= -\frac{T_1 + T_2}{2 \cdot T_1 \cdot T_2} \pm \sqrt{\left(\frac{T_1 + T_2}{2 \cdot T_1 \cdot T_2}\right)^2 - \frac{1}{T_1 \cdot T_2}} \\
 &= -\frac{T_1 + T_2}{2 \cdot T_1 \cdot T_2} \pm \frac{1}{2 \cdot T_1 \cdot T_2} \sqrt{(T_1 + T_2)^2 - 2 \cdot T_1 \cdot T_2} \\
 &= \frac{1}{2 \cdot T_1 \cdot T_2} \left(-(T_1 + T_2) \pm \sqrt{(T_1 - T_2)^2} \right) \\
 &= \frac{1}{2 \cdot T_1 \cdot T_2} (-T_1 - T_2 \pm (T_1 - T_2)) \\
 \lambda_1 &= -\frac{1}{T_1} \\
 \lambda_2 &= -\frac{1}{T_2}
 \end{aligned}$$

Dies ergibt die Lösung der DGL:

$$x_a = x_e(t) \left(K_1 e^{-\frac{t}{T_1}} + K_2 e^{-\frac{t}{T_2}} \right) \quad (12.20)$$

Die Konstanten K_1 und K_2 können an Hand der konkreten Anfangs- bzw. Randbedingungen bestimmt werden.

12.2.2 Einheitssprung als Eingangssignal (Übergangsfunktion $h(t)$)

Für obiges Übertragungsglied können die Modellparameter wie bei den Verzögerungsgliedern 1. Ordnung aus dem Verhalten bei Anregung durch einen Sprung, die Sprungantwort, bestimmt werden (siehe Abbildung 12.6). Das Verhalten kann entsprechend dieser Herleitung

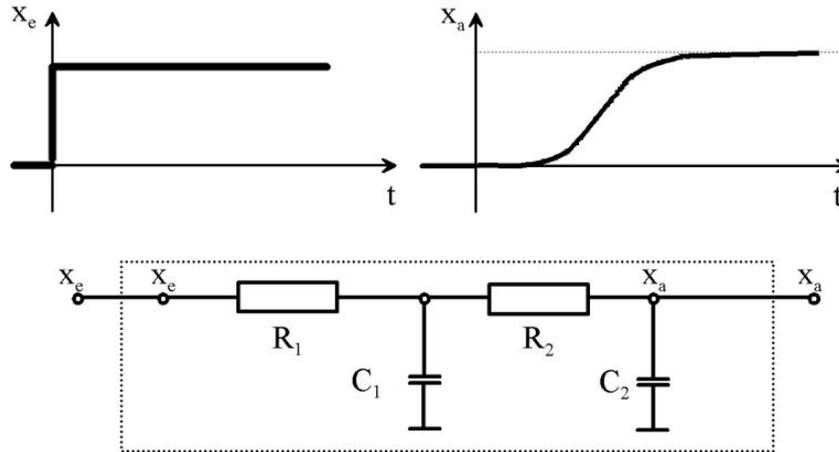


Abbildung 12.6: Sprungantwortfunktion und Ersatzschaltung eines PT_2T_L -Gliedes

und unter Beachtung der Anregung durch ein Sprungsignal wie folgt beschrieben werden. Verzögerungsglieder 2. Ordnung, wie z.B. Transportprozesse, sind durch ihren konvektiven Anteil an Laufzeiteigenschaften gebunden. Deshalb sollte im Allgemeinen noch eine Laufzeit T_L , d.h. eine Zeitverschiebung, berücksichtigt werden.

Ausgehend von der allgemeinen Lösung der DGL (siehe Gleichung 12.20, Seite 352) erhält man unter der speziellen Bedingung eines Sprungsignals $x_e(t) = x_{e0} \cdot \mathbf{1}(t)$:

$$x_a = x_e(t) \left(K_1 e^{-\frac{t-T_L}{T_1}} + K_2 e^{-\frac{t-T_L}{T_2}} \right) \quad (12.21)$$

$$x_a = K \cdot x_{e0} \cdot \left(1 - e^{-\frac{t-T_L}{T_1}} \right) \left(1 - e^{-\frac{t-T_L}{T_2}} \right) \quad (12.22)$$

Hier müssen auf Grund der komplizierteren Struktur mehrere Parameter, der proportionale Übertragungsfaktor K , die beiden Zeitkonstanten T_1 und T_2 sowie die Laufzeit T_L , bestimmt werden. Dazu werden wieder ausgewählte Werte der Sprungantwortfunktion benutzt. Die Übertragungsfunktion $G(p)$ kann für die Verzögerungsglieder 2. Ordnung (PT_2T_L) folgende Gestalten annehmen:

$$G(p) = \frac{K e^{-pT_L}}{(1 + pT_1)(1 + pT_2)} \quad \text{für } T_1 \neq T_2 \quad \text{so genanntes Modell I} \quad (12.23)$$

$$G(p) = \frac{K e^{-pT_L}}{(1 + pT)^2} \quad \text{für } T_1 = T_2 \quad \text{so genanntes Modell II} \quad (12.24)$$

Die Unterscheidung, um welchen Modelltyp es sich bei dem durch die entsprechende Messreihe gekennzeichneten Übertragungsglied handelt, erfolgt nach STREJC gemäß Tabelle 12.1.

Tabelle 12.1: Einteilung der Modelltypen nach STREJC

Modelltyp	$\frac{x_{aW}}{x_{a\infty}}$	$\frac{\tau_u}{x_{a\infty}}$
	I	$\leq 0,264$
II	> 0264	> 0104

Die Übertragungskonstante K ergibt sich wieder aus dem Verhalten im Unendlichen:

$$x_{at \rightarrow \infty} = K \cdot x_{e0}, \quad \text{da } e^{-\infty} = 0$$

$$K = \frac{x_{a\infty}}{x_{e0}}$$

und damit:

$$x_a = x_{a\infty} \left(1 - e^{-\frac{t-T_L}{T_1}}\right) \left(1 - e^{-\frac{t-T_L}{T_2}}\right) \quad (12.25)$$

Die Laufzeit T_L kann direkt aus dem Diagramm der Sprungantwort (siehe Abbildung 12.7) abgelesen werden. Beim Auftreten einer Laufzeit muss diese als Verschiebung auf der Zeitachse berücksichtigt werden. Die entsprechenden Größen (x_{aW} , $x_{a\infty}$, τ_u , $x_{a\infty}$) können aus der Abbildung 12.7 entnommen werden.

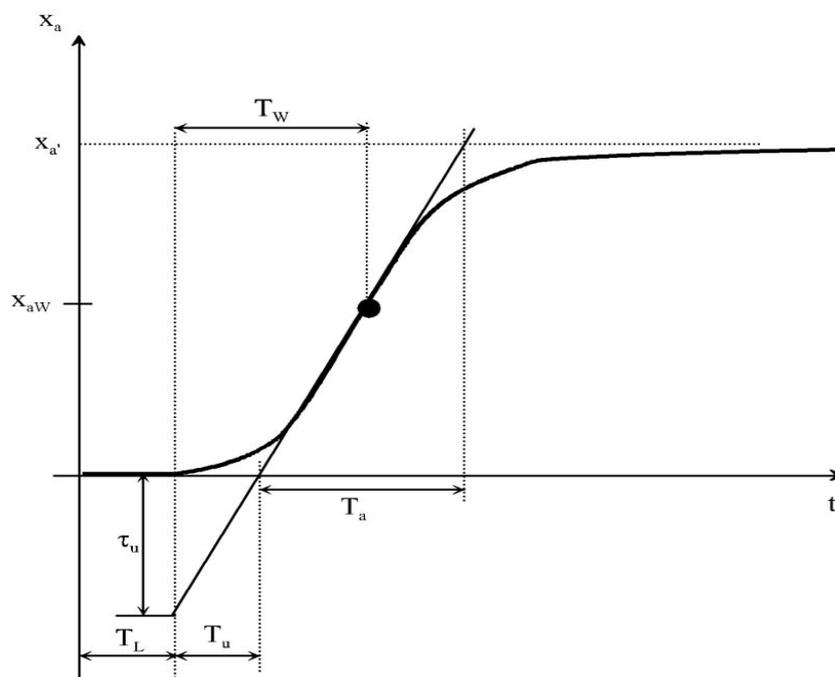


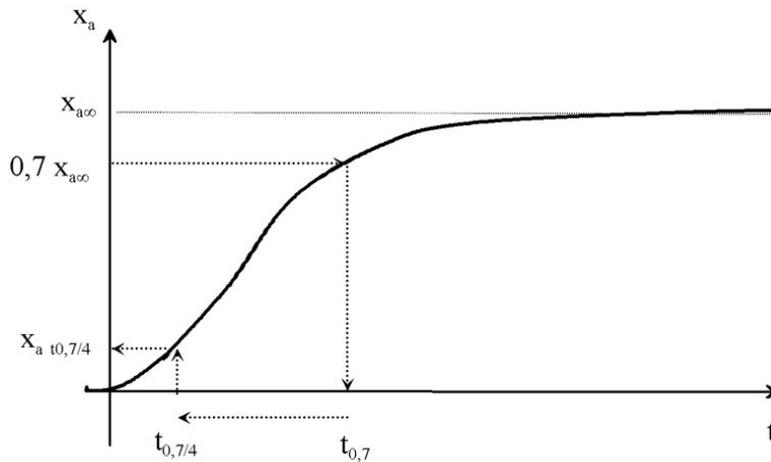
Abbildung 12.7: Kenngrößen der Sprungantwort

12.2.2.1 Modelltyp I

Bei diesem Modelltyp, dem allgemeinen Fall der unterschiedlichen Zeitkonstanten $T_1 \neq T_2$, müssen nun Bestimmungsgleichungen für diese beiden Zeitkonstanten gefunden werden. Aus der Literatur [STREJC] ist bekannt, dass der Wert $x_{a0,7} = 0,7 x_{a\infty}$ nahezu unabhängig vom Verhältnis der beiden Zeitkonstanten, aber stark von der Summe der beiden Zeitkonstanten abhängig ist. Mit einem Fehler von kleiner 1,7% kann man ansetzen:

$$t_{0,7x_{a\infty}} = 1,2 (T_1 + T_2)$$

$$T_1 = \frac{t_{0,7x_{a\infty}}}{1,2 \left(1 + \frac{T_2}{T_1}\right)} \quad (12.26)$$


 Abbildung 12.8: Bestimmung der Kenngrößen T_1 und T_2

Andererseits kann man davon ausgehen, dass der Funktionswert $x_{a0,7/4} = x_{a(t(0,7x_{a\infty})/4)}$ entsprechend Abbildung 12.8 nur vom Verhältnis T_2/T_1 abhängt. Das Verhältnis von T_2/T_1 wird aus der Tabelle 12.2 bestimmt.

Damit stehen zwei Gleichungen zur Bestimmung der Zeitkonstanten zur Verfügung und die Aufgabe ist eindeutig lösbar.

Es ist noch zu beachten, dass sich diese Übertragungsglieder für große Zeiten ($t \gg T_W$) näherungsweise wie Übertragungsglieder 1. Ordnung verhalten. Besonders bei sehr unterschiedlichen Zeitkonstanten wird der spätere Verlauf dominierend durch die Prozesse mit der Zeitkonstante T_2 bestimmt, da die Prozesse mit der Zeitkonstanten T_1 bereits abgeklungen sind.

Tabelle 12.2: Verhältnis der Zeitkonstanten in Abhängigkeit von der Sprungantwort

$\frac{x_{a,0,7/4}}{x_{a,\infty}}$	$\frac{T_2}{T_1}$
0,260	0,00
0,200	0,10
0,174	0,20
0,150	0,33
0,135	0,40
0,131	0,50
0,126	0,60
0,125	0,70
0,124	0,80
0,123	0,90
0,123	1,00

12.2.2.2 Modelltyp II

Liegt entsprechend der Tabelle 12.1 der Modelltyp II ($T_1 = T_2$, d.h. nur eine Zeitkonstante) vor, so kann man die erforderlichen Parameter durch Tabelle 12.3 bestimmen. In diesem Fall kann die Übertragungsfunktion sogar auf den beliebigen ganzzahligen Exponenten n erweitert werden:

$$G(p) = \frac{K e^{pT_L}}{(1 - pT)^n} \quad \text{für Modelltyp II } (T_1 = T_2) \quad (12.27)$$

Die Bestimmung von K und T_L ist unabhängig vom Modelltyp und erfolgt wie beim Modelltyp I beschrieben (siehe Seite 354).

Tabelle 12.3: Kenngrößenbestimmung für Modelltyp II

n	$\frac{\tau_u}{x_{a_\infty}}$	x_{a_W}/x_{a_δ}	$\frac{\mathbf{T}_W}{\mathbf{T}}$	$\frac{\mathbf{T}_u}{\mathbf{T}}$	$\frac{\mathbf{T}_a}{\mathbf{T}}$
1	0	0	0	0	1
2	0,104	0,264	1	0,282	2,718
3	0,218	0,323	2	0,805	3,695
4	0,319	0,352	3	1,425	4,463
5	0,410	0,371	4	2,100	5,119
6	0,493	0,384	5	2,811	5,699
7	0,570	0,394	6	3,549	6,226
8	0,642	0,401	7	4,307	6,711

An Hand dieser Tabelle 12.3 hat man die Möglichkeit, die Zeitkonstante T auf verschiedenen Wegen zu bestimmen. Durch Mittelung dieser Werte kann man einen Wert erhalten, der einen geringeren Fehler aufweist. Dies ist wichtig, da in die Bestimmung der Parameter die Messfehler aus dem Experiment vollständig mit eingehen.

12.2.3 DIRAC-Impuls als Eingangssignal (Gewichtsfunktion $g(t)$)

Neben der im vorangegangenen Abschnitt behandelten Möglichkeit zur Bestimmung der Übertragungsparameter wird hier ein weiterer Weg beschrieben. Die Parameter, d.h. die Zeitkonstanten, der Übertragungsfaktor usw., von Systemen sollten invariant gegenüber dem Eingangssignal sein, da hier lineare Systeme betrachtet werden. Dieser Umstand gestattet es, zur Beschreibung der Systeme unterschiedliche Testsignale zu benutzen, die aber immer zu der gleichen Übertragungsfunktion führen. In der versuchstechnischen Praxis werden oft die einen oder anderen Eingangssignale besser realisierbar sein. Unter dem DIRAC-Impuls ist dabei das Aufprägen eines sehr großen Impulses (Energie- oder Masseeintrag) in einem sehr kurzem Zeitintervall $\Delta T \ll T$ (im Verhältnis zur kleinsten auftretenden Zeitkonstanten) zu sehen. Das hier vorzustellende Verfahren liefert bis zu einer Impulsbreite von $\Delta T \leq 0,1 T$ brauchbare Werte. Damit liegen die in Abbildung 12.9 dargestellten Verhältnisse vor. Im

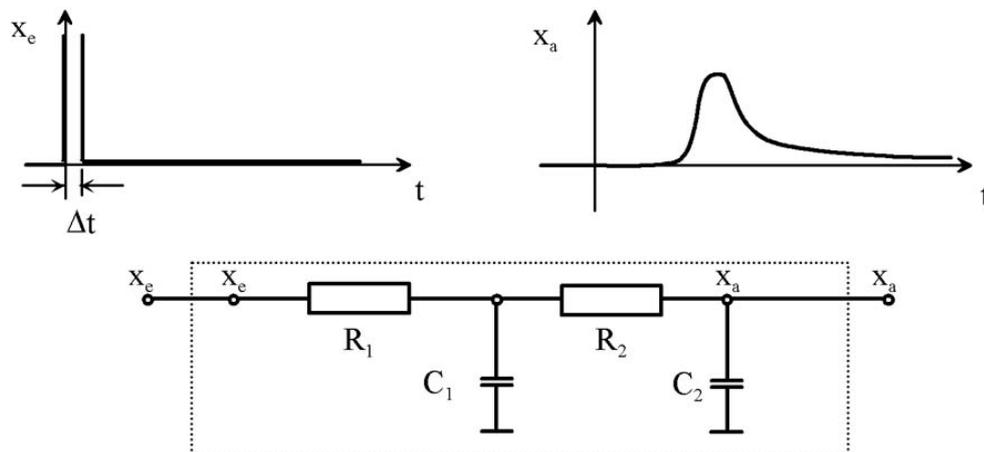


Abbildung 12.9: Übertragungsglied 2. Ordnung (PT_2T_L)

Gegensatz zum vorhergehenden Abschnitt werden hier nur Übertragungsglieder mit gleicher Zeitkonstante betrachtet (siehe Gleichung 12.28). Dies wurde im Abschnitt 12.2.2.2 als Modelltyp II bezeichnet.

$$G(p) = \frac{K e^{-pT_L}}{(1 + pT)^n} \quad (12.28)$$

Aus dem Verhältnis der beiden Ausgangswerte $x_a(T_m)/x_a(T_m/2)$ (siehe Abbildung 12.10) werden an Hand der Tabelle 12.4 die Parameter n (Anzahl der gekoppelten RC-Glieder = Exponent des Nennerpolynoms) und T (Zeitkonstante) bestimmt. Der Zeitpunkt T_m ist dabei der Punkt, bei dem die Impulsantwortfunktion, die Gewichtsfunktion $g(t)$, das Maximum erreicht (siehe Abbildung 12.10). Auf eine eventuell auftretende Laufzeit ist hier ebenfalls zu achten. $T_m/2$ bezeichnet den halben Zeitwert bis zum Maximum. T_m , und $T_m/2$ beziehen sich auf die um T_L verschobene Zeitachse.

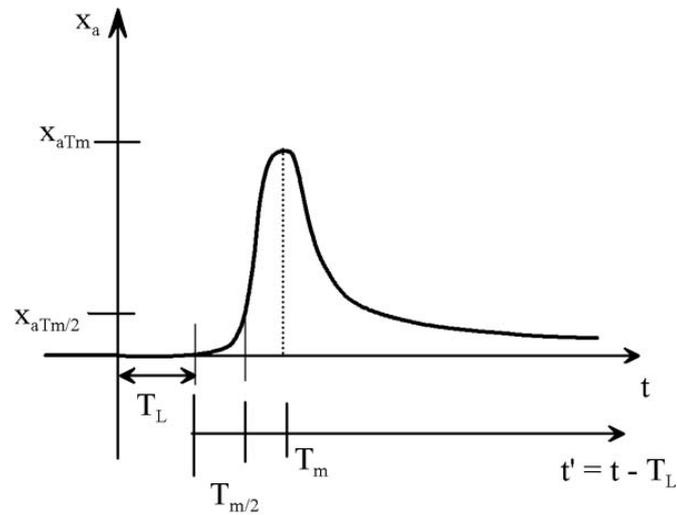

 Abbildung 12.10: Impulsantwortfunktion $g(t)$ für ein Verzögerungsglied 2. Ordnung

Tabelle 12.4: Kennwerte der Impulsantwortfunktion für Verzögerung 2. Ordnung

$\frac{x_a(T_m)}{x_a(T_m/2)}$	n	$\frac{T_m}{T}$	$\frac{(T x_a(T_m))}{(A K)}$
1,213	2	1	0,368
1,471	3	2	0,271
1,785	4	3	0,224
2,165	5	4	0,196
2,623	6	5	0,175
3,185	7	6	0,159

Mittels der vierten Spalte in Tabelle 12.4 kann die Übertragungskonstante K bestimmt werden. An Hand der Variablen A , durch die die Fläche des Impulses ($A = x_e \cdot \Delta t$) berücksichtigt wird, können auch technisch realisierbare Impulse mit realem $\Delta T \leq 0,1 T$ ausgewertet werden.

12.2.4 Aufgaben zur experimentellen Prozessanalyse

1. Berechnen Sie die Absenkungskurve für eine Förderleistung von $\dot{V} = 0,005 \frac{m^3}{s}$ mittels der Methode der Übertragungsglieder bei einem Volumenstrom von $\dot{V} = 0,015 \frac{m^3}{s}$, wenn ein Pumpversuch folgende Werte lieferte (siehe Tabelle). Stellen Sie das Ergebnis grafisch dar.

Zeit [s]	Absenkung [m]
320	0,63
426	0,69
564	0,73
743	0,77
976	0,81
1279	0,85
1673	0,88

Zeit [s]	Absenkung [m]
2185	0,92
2850	0,96
3715	0,99
4839	1,03
6302	1,06
8202	1,10
10.000	1,14

2. Bestimmen Sie für folgende Messreihe, die durch Einspeisung einer Funktion entstanden ist, die Übertragungsfunktion einschließlich deren Parameter:

t [min]	0	1	2	4	8	15
\dot{V} [$\frac{m^3}{s}$]	0	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
s [m]	0	0,1	0,08	0,13	0,19	0,25

3. Bei einem Pumpversuch ist für einen Grundwasserstandort folgende Abhängigkeit zwischen Förderstrom \dot{V} und Grundwasserabsenkung s gefunden worden:

\dot{V} [$\frac{m^3}{s}$]	0	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05
s [cm]	0	0	3	8	20	30	35	37	38
t [min]	-1	0	1	2	4	10	20	40	100

Berechnen Sie den Verlauf der Absenkung bei einer Förderrate von $\dot{V} = 0,15 \frac{m^3}{s}$. Verwenden Sie dazu die Methode der Übertragungsfunktionen. Stellen Sie die Messwerte und die Berechnungsergebnisse grafisch dar.

4. Bei einem Gütepumpversuch wurden für zwei unterschiedliche Standorte $P1$ und $P2$, die sich in einer Entfernung vom Infiltrationsbrunnen von $r_1 = 350m$ und $r_2 = 1000m$ befinden, nachfolgende Konzentrationswerte C des eingebrachten Tracers gemessen. In den Infiltrationsbrunnen wird eine dauerhafte Konzentration von $C_{(0,t)} = 10 \frac{g}{m^3}$ beigegeben.

$t [10^7 s]$	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0	5,5
$C_{r1} [\frac{g}{m^3}]$	2,4	2,7	3,05	3,55	4,80	6,50	7,95	8,70	9,10	9,20	9,25
$C_{r2} [\frac{g}{m^3}]$	2,4	2,7	3,04	3,32	3,57	3,81	4,01	4,20	4,37	4,53	4,67

Berechnen Sie die Übertragungsfunktionen für diese Systeme.

5. Bei einem Tracerversuch wird an dem Brunnen 1 eine Stoffkonzentration von $50kg$ konzentrierte NaCl-Lösung $5min$ lang in den Boden infiltriert. Berechnen Sie den Verlauf einer möglichen Schadstoffausbreitung, wenn durch eine Havarie $1000kg$ Lösung in den Boden gelangt wären. Stellen Sie die Messwerte und die prognostizierten Werte grafisch dar.

$t [min]$	24	30	35	40	42	50	60	70	80	90	100	120
$C [\frac{mg}{l}]$	0	2,0	7,0	9,7	9,8	7,5	5,0	3,5	1,5	0,5	0,3	0

6. Bei einem Säulen-Durchlaufversuch wurde folgende Impulsantwortfunktion auf einen Konzentrationsstoß eines Schadstoffes von $30mg/l$ gemessen (siehe Abbildung 12.11).
- Bestimmen Sie zu diesen Messwerten die Gewichtsfunktion und die Übertragungsfunktion.
 - Prognostizieren Sie die Konzentration nach $160min$, wenn die Eingangskonzentration folgenden zeitlichen Verlauf hat:

$t [min]$	0	20	40	60	80	100	120	140
$C [\frac{mg}{l}]$	30	50	80	60	100	50	10	0

7. In einem Grundwasserbeobachtungsrohr wurden nachfolgende Konzentrationen infolge eines Tracerversuches gemessen. Bei dem Tracerversuch wurden $50kg$ konzentrierte NaCl-Lösung innerhalb von 5 Stunden infiltriert.

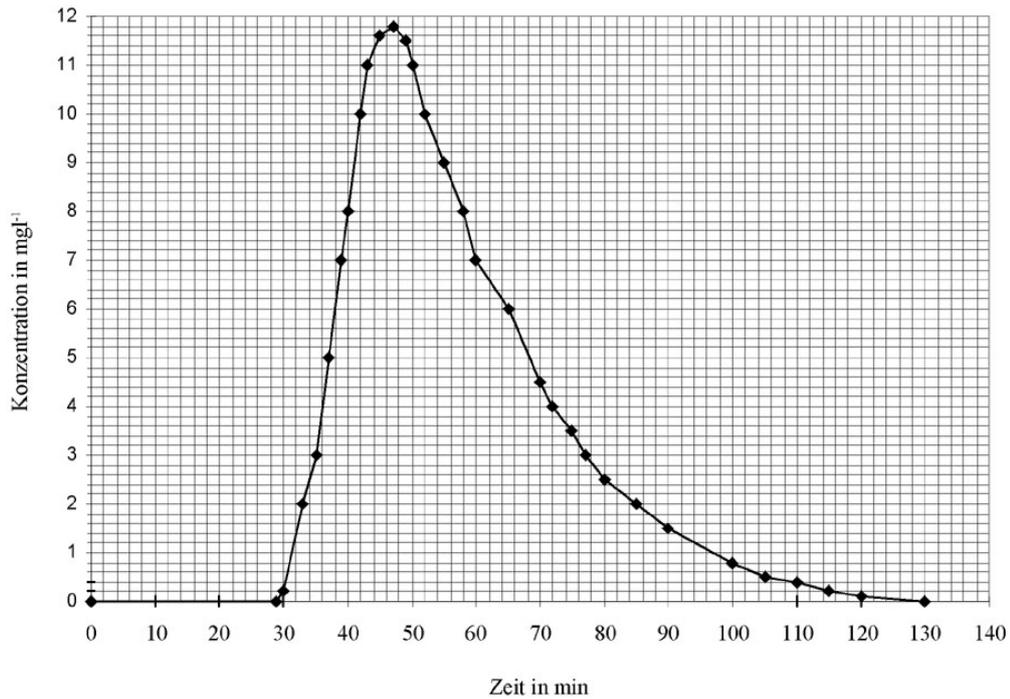


Abbildung 12.11: Impulsantwort eines Säulen-Durchlaufversuches

- a) Berechnen Sie den Verlauf des Gesamtsalztransportes im Pegelrohr, wenn folgende Einzelmesswerte gewonnen wurden.
- b) Stellen Sie die Messkurve und die berechnete Funktion grafisch dar.

$t [d]$	0	1	2	4	5	7	9
$C_{NaCl} [\frac{mg}{l}]$	0	0	1	2	1,5	1	0

- c) Berechnen Sie mittels der Methode der Übertragungsfunktion die zu erwartende Durchbruchkurve und stellen Sie sie grafisch dar, wenn mit einer Infiltration von $100kg$ innerhalb von 2,5 Stunden gearbeitet wurde.
8. Bei einem Pumpversuch wurden folgende Grundwasserstände gemessen (siehe Abbildung 12.12)
- a) Berechnen Sie das Wasserdefizit (Volumen) des Absenkungstrichters, wenn der Grundwasserleiter folgende Kennwerte besitzt:
 $h_n = 16m, M = 10m, k = 0,001m \cdot s^{-1}, S_0 = 0,0001m^{-1}, n_0 = 0,20$
 - b) Berechnen Sie mittels der Methode der Übertragungsglieder und dem unter a) gefundenen Wert für den Volumenstrom \dot{V} die Absenkungskurve für eine Förderleistung von $0,005m^3 \cdot s^{-1}$.
 Stellen Sie für dieses Modell die ersten vier Gleichungen des Faltungsintegrals bis zum Beobachtungszeitpunkt von $t = 1d$ auf.

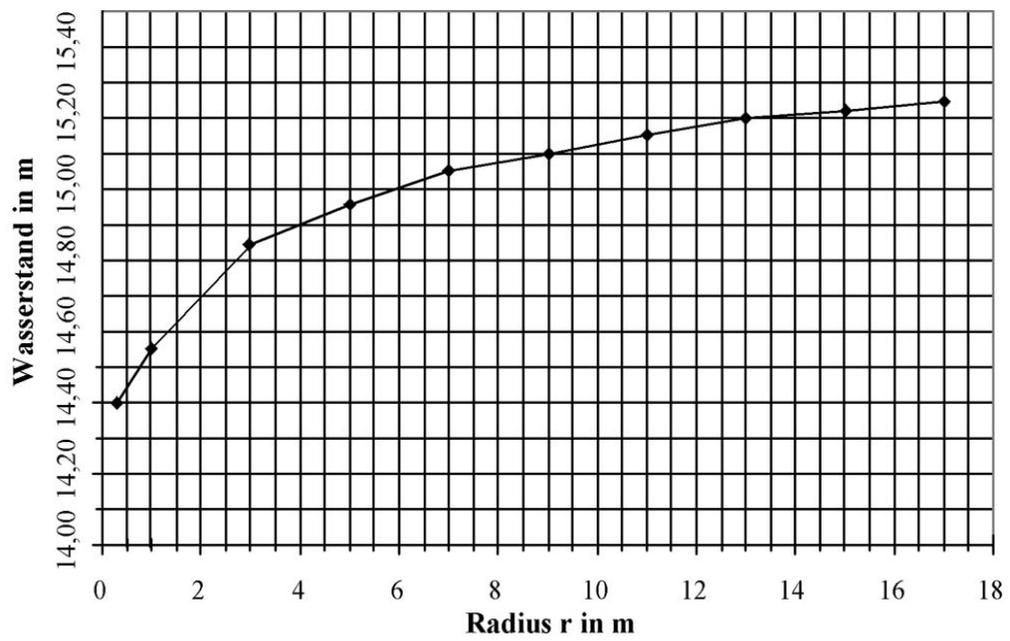


Abbildung 12.12: Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius

12.3 Beliebige Übertragungsverhalten und beliebige Eingangssignale

12.3.1 Vorbemerkung

Die meisten Naturprozesse laufen einmalig ab und sind nicht reproduzierbar. Es ist auch in den seltensten Fällen möglich auf naturnahe ökologische Prozesse beliebige Testsignale aufzuprägen, um den Typ und die Parameter des Übertragungsverhaltens mittels der experimentellen Prozessanalyse zu bestimmen. Es besteht vielmehr sehr häufig die Aufgabe, aus einmalig ablaufenden Naturprozessen, wie z.B. Hochwasserwellen, Niederschlags-Abflussereignisse, Grundwasserneubildungsraten oder Schadstoffausbreitungen, mittels eines mathematischen Verfahrens Beziehungen zwischen dem Eingangs- und dem Ausgangsverhalten entsprechend der experimentellen Prozessanalyse abzuleiten, d.h. das Übertragungsverhalten zu bestimmen. Aus diesem Grund mussten andere Methoden entwickelt werden. Eine davon ist die Anwendung des **Faltungsintegrals** / **DUHAMEL-Integrals**. Der Grundgedanke dieser Methode ist die Zerlegung der beliebigen Eingangssignale in eine Summe von Impulsen, die dann jeweils ein spezielles Übertragungsverhalten besitzen. Dabei wird das Faltungsintegral insbesondere für einmalige aperiodische Ereignisse verwendet. Anschließend werden die Anteile der jeweils übertragenen Impulse wieder überlagert. Auf Grund des Superpositionsgesetzes lässt sich diese Methode nur auf lineare bzw. auf stückweise linearisierte Systeme anwenden. Bei periodischen Funktionen bietet sich die Anwendung der FOURIER-Reihenanalyse bzw. -synthese an.

Als Literatur können zu diesem Abschnitt die Bücher von:

DYCK, S: Grundlagen der Hydrologie

LUCKNER, L.; SCHESTAKOV, W. A.: Migrationsprozesse

WERNSTEDT, J.: Experimentelle Prozessanalyse

herangezogen werden. Weiterhin können alle Bücher empfohlen werden, in denen die Anwendung des Faltungsintegrals auf technische Prozesse beschrieben wird.

Bei einem vergleichenden Literaturstudium muss auf die unterschiedliche Schreibweise bzw. auf die unterschiedlich verwendeten Symbole und Abkürzungen geachtet werden. Im Folgenden sollen nachstehende Abkürzungen entsprechend dem internationalen Standard in der Systemtechnik (siehe Tabelle 12.5) verwendet werden.

Tabelle 12.5: Vergleich verwendeter Abkürzungen

Bezeichnung	Abkürzung bei intern. Standard	Abkürzung bei DYCK	Abkürzung bei LUCKNER
DIRAC-Impuls	$\delta(t)$	$p_n(t)$	
Impulsantwort = Gewichtsfunktion	$g(t)$	$h(t)$	$h(t)$
Sprungantwort = Übergangsfunktion	$h(t)$	$S(t)$	$S(t)$
Eingangsfunktion	$x_e(t)$	$p(t)$	$R(\tau)$
Ausgangsfunktion	$x_a(t)$	$q(t)$	$P(t_0)$
Verzögerungszeit	τ	Δt	τ

12.3.2 Zerlegung beliebiger Eingangsfunktionen (Signalanalyse)

Während in den vorangegangenen Abschnitten von definierten Eingangssignalen (z.B. Sprungfunktion, DIRAC-Impuls) gesprochen wurde, sollen hier beliebige Eingangssignale betrachtet werden. Dies ist für viele Aufgaben der Wasserwirtschaft, Hydrologie und Geohydraulik sehr notwendig. Immer dann, wenn künstliche Testsignale nicht angewendet werden können, sondern natürliche Ereignisse zur experimentellen Systemanalyse ausgenutzt werden müssen, kann nur mit der im Folgenden beschriebenen Methode des Faltungsintegrals gearbeitet werden. Als unabhängige Variable soll dabei die Zeit in Betracht gezogen werden. Eine Anwendung des Faltungsintegrals auf eine der Ortsvariablen ist auch denkbar.

Der Grundgedanke der Signalanalyse besteht darin, dass sich jeder beliebige Zeitverlauf einer Funktion als eine unendliche Summe definierter Einzelsignale darstellen lässt (siehe Abschnitt 11.3.4 Signalanalyse, Seite 311). Prinzipiell lassen sich dabei die unterschiedlichsten Signale verwenden. Besondere Bedeutung haben die sinusförmigen Signale erlangt, welche in der bekannten FOURIER-Reihenanalyse Anwendung finden. Die Sprungsignale und die Impulse führen auf die LAPLACE-Transformation. Deshalb werden periodische und periodisierbare Funktionen mittels der FOURIER-Analyse und einmalige, aperiodische Vorgänge mittels der LAPLACE-Transformation analysiert.

Bei der Anwendung des Faltungsintegrals wird das beliebige Eingangssignal in eine Summe zeitverschobener Impulse zerlegt (siehe Abbildung 12.13)

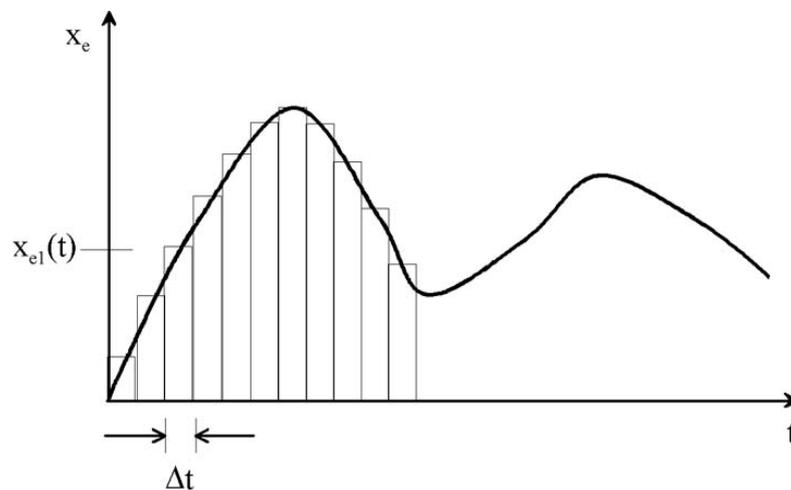


Abbildung 12.13: Approximation einer Funktion durch Impulse

Die Wirkung eines Signals auf ein System wird meist durch den Energie- oder Massefluss gekennzeichnet. Er ist u.a. durch die jeweilige Signalgröße und die Wirkungsdauer, d.h. durch das Integral der Funktion über der Zeit, definiert. Mit der Approximation des Eingangssignals durch eine Summe einzelner Rechteckimpulse lässt sich das Integral näherungsweise

durch eine Summe der Produkte aus Impulshöhe $x_{ei}(\tau_i)$ und -breite Δt beschreiben:

$$\int_0^{t_e} x_e(t) dt \approx \sum_{i=1}^{n=\frac{t_e}{\Delta t}} x_{ei}(\tau_i) \Delta t \quad (12.29)$$

Die einzelnen Impulse der Zeitpunkte τ_i , die als Eingangssignal des Übertragungssystems wirken, erzeugen am Systemausgang einzelne Impulsantwortfunktionen (siehe Abbildung 12.14), die Gewichtsfunktionen $g_i(t - \tau_i)$. Diese werden superpositioniert und ergeben somit die Antwort des Systems auf das Eingangssignal $x_e(t)$. Auch hier sei darauf hingewiesen, dass die Superposition nur für lineare Systeme anwendbar ist.

Für Impulsbreiten $\Delta t \Rightarrow 0$ gehen der technische Impuls in den DIRAC-Impuls und die endliche Summe in die Integraldarstellung über, wobei eine unendliche Anzahl von Impulsen zu berücksichtigen ist.

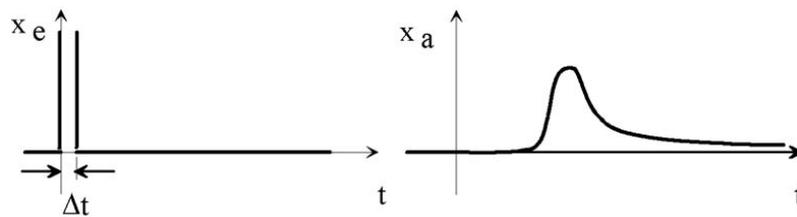


Abbildung 12.14: Impulsantwortfunktion $g(t)$ für ein Verzögerungsglied 2. Ordnung

12.3.3 Zusammensetzung der Ausgangsfunktion (Signalsynthese)

Wie bereits ausgeführt, ergibt sich das Ausgangssignal durch die Überlagerung als Summe der einzelnen Impulsantwortfunktionen, den Gewichtsfunktionen $g_i(t - \tau_i)$ zum Zeitpunkt t . Zu deren Berechnung muss man beachten, dass alle vorhergehenden Impulse im Zeitintervall 0 bis t einen Beitrag dazu liefern, da deren Gewichtsfunktionen zum Zeitpunkt t noch nicht auf Null abgeklungen sind.

Wie aus Abbildung 12.15 zu erkennen ist, setzt sich das Ausgangssignal $x_a(t)$ zum Zeitpunkt t_0 aus den Anteilen der zeitverschobenen Gewichtsfunktionen für den Zeitpunkt t_0 zusammen:

$$x_a(t_0) \approx \sum_{i=1}^{n=\frac{t_0}{\Delta\tau}} x_{ai}(t_0) = \sum_{i=1}^{n=\frac{t_0}{\Delta\tau}} (x_{ei}(\tau_i) \cdot g(t_0 - \tau_i)) \quad (12.30)$$

Dabei ist $\Delta\tau$ der Abstand der DIRAC-Impulse, die so genannte Abtastzeit. Führt man jetzt den Grenzübergang zur infinitesimalen Abtastzeit durch, geht die Summe in die Integralform über, welche auch als **Faltungsintegral** oder **DUHAMEL-Integral** bezeichnet wird:

$$\begin{aligned} x_a(t) &= \int_0^t x_e(\tau) \cdot g(t - \tau) d\tau \\ &= g(t) * x_e(t) \end{aligned} \quad (12.31)$$

In diesem Fall wird die *-Operation als **Faltungsoperation** bezeichnet.

Das Faltungsintegral kann man auch so interpretieren, dass zum Wert des Ausgangssignals zum Zeitpunkt t alle Impulse des Eingangssignals $x_e(t)$ im Intervall $0 \leq \tau \leq t$ beitragen, die entsprechend ihres zeitlichen Abstandes $(t - \tau)$ jeweils mit dem Faktor $g(t - \tau) d\tau$ gewichtet werden.

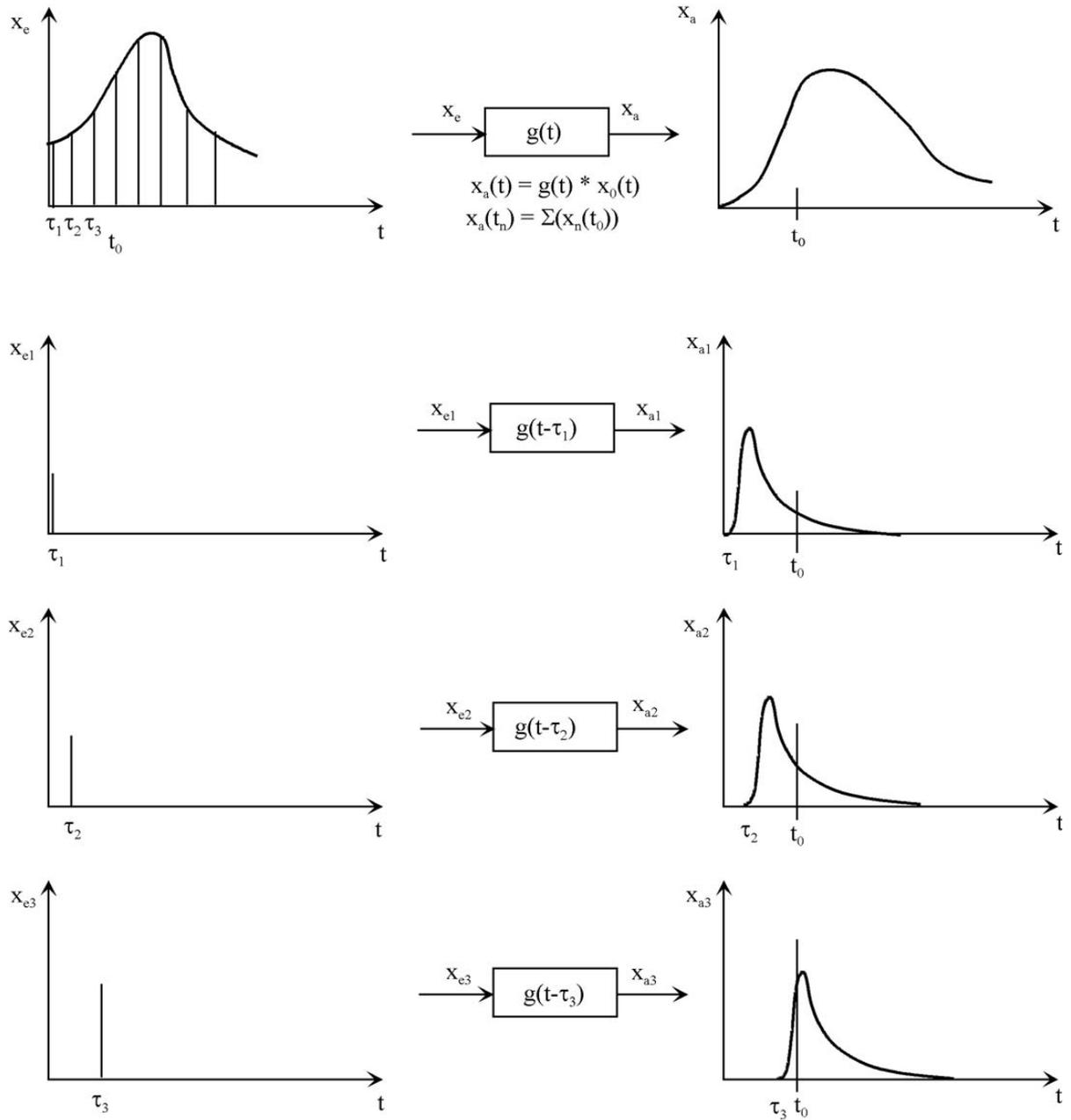


Abbildung 12.15: Überlagerung der einzelnen Sprungantwortfunktionen

Unter Beachtung des Zusammenhangs zwischen Gewicht- und Übergangsfunktion kann man auch folgende identischen Umformungen vornehmen:

$$\begin{aligned}
 \frac{dh(t-\tau)}{dt} &= g(t-\tau) \\
 x_a(t) &= \int_0^t \frac{d}{dt}(h(t-\tau))x_e(\tau)d\tau \\
 &= \frac{d}{dt} \int_0^t h(t-\tau)x_e(\tau)d\tau \\
 &= \frac{d}{dt} [h(t) * x_e(t)]
 \end{aligned} \tag{12.32}$$

Bei Verwendung der LAPLACE-Transformation geht die Faltungsoperation in eine Multiplikation über (siehe Abschnitt 5.3.2 LAPLACE-Transformation, Seite 142):

$$\begin{aligned}
 L\{x_a(t)\} &= L\{g(t) * x_e(t)\} \\
 &= L\left\{\int_0^t g(t-\tau)x_e(\tau)d\tau\right\} \\
 &= G(p) \cdot X_e(p)
 \end{aligned} \tag{12.33}$$

Bei der in der Praxis üblichen numerischen Durchführung der Faltungsoperation muss wie in ihrer Herleitung eine Zeitquantisierung durchgeführt werden. Für einen Prozess, der zum Zeitpunkt $t = 0$ beginnt, lässt sich das Ausgangssignal in der oben aufgezeigten Summenform wie folgt beschreiben:

$$\begin{aligned}
 x_a(t_1) &= \Delta\tau g(\tau_1)x_e(\tau_1) \\
 x_a(t_2) &= \Delta\tau g(\tau_2)x_e(\tau_1) + \Delta\tau g(\tau_1)x_e(\tau_2) \\
 x_a(t_3) &= \Delta\tau g(\tau_3)x_e(\tau_1) + \Delta\tau g(\tau_2)x_e(\tau_2) + \Delta\tau g(\tau_1)x_e(\tau_3) \\
 &\vdots \\
 x_a(t_k) &= \Delta\tau \sum_{i=1}^k g(\tau_i)x_e(\tau_{k-i+1})
 \end{aligned} \tag{12.34}$$

Dieses Gleichungssystem kann man auch als Matrixgleichung formulieren:

$$\begin{bmatrix} x_a(t_1) \\ x_a(t_2) \\ x_a(t_3) \\ \vdots \\ x_a(t_k) \end{bmatrix} = \Delta\tau \begin{bmatrix} g(\tau_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ g(\tau_2) & g(\tau_1) & 0 & \cdots & 0 \\ g(\tau_3) & g(\tau_2) & g(\tau_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ g(\tau_k) & g(\tau_{k-1}) & g(\tau_{k-2}) & \cdots & g(\tau_1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_e(\tau_1) \\ x_e(\tau_2) \\ x_e(\tau_3) \\ \vdots \\ x_e(\tau_k) \end{bmatrix} \quad (12.35)$$

Mit den vereinfachenden Schreibweisen $t_k = k$ und $\tau_k = i$ und der Einführung der Abtastzeit $T = \Delta\tau$ erhält man:

$$\begin{bmatrix} x_a(1) \\ x_a(2) \\ x_a(3) \\ \vdots \\ x_a(k) \end{bmatrix} = T \cdot \begin{bmatrix} g(1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ g(2) & g(1) & 0 & \cdots & 0 \\ g(3) & g(2) & g(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ g(i) & g(i-1) & g(i-2) & \cdots & g(1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_e(1) \\ x_e(2) \\ x_e(3) \\ \vdots \\ x_e(i) \end{bmatrix} \quad (12.36)$$

Diese Matrixgleichung lässt sich verkürzt schreiben:

$$\mathbf{X}_a = T \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{X}_e \quad (12.37)$$

bzw.

$$\mathbf{X}_e = T^{-1} \cdot \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{X}_a \quad (12.38)$$

Dabei wird \mathbf{G}^{-1} als inverse Matrix von \mathbf{G} bezeichnet.

12.3.4 Bestimmung der Gewichtsfunktionen $g(t)$ für den allgemeinen Fall

Die Gewichtsfunktion $g(t)$ wird wie folgt bestimmt:

$$g(t) = x_a(t) \mid_{x_e(t)=\delta(t)} \quad (12.39)$$

Die experimentelle Bestimmung von $g(t)$ wurde in den vorhergehenden Abschnitten behandelt. Die Bestimmung der Gewichtsfunktion kann über einen Testversuch mit einem Impuls als Eingangsfunktion (siehe Abschnitt 12.3.2 Signalanalyse, Seite 367) erfolgen. Wird eine Sprungfunktion als Eingangsfunktion benutzt, so muss über eine entsprechende Differentiation die Gewichtsfunktion gewonnen werden (siehe Abschnitt 11.4 Übertragungssysteme, Tabelle 11.5, Seite 320).

Nicht immer lassen sich am realen Objekt Experimente zur Bestimmung der Gewichtsfunktion durchführen. Ist dies der Fall, können die realen Eingangs- und Ausgangssignale zur Berechnung von $g(t)$ herangezogen werden. Die Matrixgleichung zur Berechnung des Ausgangssignals (siehe Abschnitt 12.3.3 Signalsynthese, Seite 369)

$$\begin{bmatrix} x_a(1) \\ x_a(2) \\ x_a(3) \\ \vdots \\ x_a(k) \end{bmatrix} = T \cdot \begin{bmatrix} g(1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ g(2) & g(1) & 0 & \cdots & 0 \\ g(3) & g(2) & g(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ g(i) & g(i-1) & g(i-2) & \cdots & g(1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_e(1) \\ x_e(2) \\ x_e(3) \\ \vdots \\ x_e(i) \end{bmatrix} \quad (12.40)$$

lässt sich für die Bestimmung von $g(t)$ bzw. der Matrix \mathbf{G} verwenden. Wenn für einen Beobachtungszeitraum sowohl die Eingangs- als auch die Ausgangsfunktion bekannt sind, kann aus dem obigen Gleichungssystem vorteilhafterweise folgende Matrixgleichung entwickelt werden:

$$\begin{bmatrix} x_a(1) \\ x_a(2) \\ x_a(3) \\ \vdots \\ x_a(k) \end{bmatrix} = T \cdot \begin{bmatrix} x_e(1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_e(2) & x_e(1) & 0 & \cdots & 0 \\ x_e(3) & x_e(2) & x_e(1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ x_e(i) & x_e(i-1) & x_e(i-2) & \cdots & x_e(1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g(1) \\ g(2) \\ g(3) \\ \vdots \\ g(i) \end{bmatrix} \quad (12.41)$$

Die entsprechende Matrixgleichung lautet:

$$\mathbf{X}_a = \mathbf{T} \cdot \mathbf{X}_e \cdot \mathbf{G} \quad (12.42)$$

bzw.

$$\mathbf{G} = \mathbf{T}^{-1} \cdot \mathbf{X}_a \cdot \mathbf{X}_e^{-1} \quad (12.43)$$

Damit lässt sich die Gewichtsfunktion $g(t)$ durch eine Wertefolge beschreiben.

In der messtechnischen Praxis sieht die Bestimmung meist etwas anders aus. Bei obiger Herleitung wurde vorausgesetzt, dass der Prozess zu Zeiten $t < 0$ nicht existiert und erst mit dem ersten Eingangsimpuls gestartet wird. Reale Prozesse laufen unabhängig von deren Beobachtung ab. Daher muss man an einem beliebigen Zeitpunkt mit der Beobachtung der Ein- und Ausgangssignale beginnen. Die Genauigkeit der Bestimmung der Gewichtsfunktion $g(t)$ muss vom Bearbeiter festgelegt werden. Dabei sind die Fragen des Messaufwandes und der Dynamik des Prozesses die Hauptkriterien für die Festlegung der Abtastbreite T und der Anzahl der Abtastwerte n . Dies ist die gleiche Problematik wie bei der Behandlung von diskontinuierlichen Messsignalen und deren Fehlerbeschreibung (siehe auch GRÄBER: Lehrbrief Automatisierungstechnik).

Legt man fest, dass stets m Werte für die Bestimmungsgleichungen zu berücksichtigen sind, so sind $2 \cdot m$ Gleichungen aufzustellen, um die m Stützstellen der Gewichtsfunktion $g(t)$ zu ermitteln. Daraus folgt, dass man den Prozess bereits vor einer expliziten Prognostizierung über die Dauer von $2 \cdot m$ Abtastintervalle T , d.h. über einen Zeitraum von $2 \cdot m \cdot T$, beobachten muss (siehe Abbildung 12.16). Entsprechend diesem Schema kann folgendes Gleichungssystem aufgestellt werden:

$$x_a(t_4) = T (g(\tau_4) x_e(t_1) + g(\tau_3) x_e(t_2) + g(\tau_2) x_e(t_3) + g(\tau_1) x_e(t_4)) \quad (12.44)$$

$$x_a(t_5) = T (g(\tau_4) x_e(t_2) + g(\tau_3) x_e(t_3) + g(\tau_2) x_e(t_4) + g(\tau_1) x_e(t_5))$$

$$x_a(t_6) = T (g(\tau_4) x_e(t_3) + g(\tau_3) x_e(t_4) + g(\tau_2) x_e(t_5) + g(\tau_1) x_e(t_6))$$

$$x_a(t_7) = T (g(\tau_4) x_e(t_4) + g(\tau_3) x_e(t_5) + g(\tau_2) x_e(t_6) + g(\tau_1) x_e(t_7))$$

Damit hat man vier Gleichungen mit vier unbekanntem Gewichtsfunktionsanteilen, wodurch das Gleichungssystem eindeutig lösbar wird. Da sowohl die Beobachtungswerte, allgemein die Messwerte, des Eingangssignals als auch die des Ausgangssignals fehlerbehaftet sind, werden in der Praxis mehr Gleichungen aufgestellt, was zu einem überbestimmten Gleichungssystem führt. Sie werden mittels spezieller iterativer Verfahren, z.B. dem HOUSEHOLDER-Verfahren gelöst. Die Lösung ist dann der Wertebereich der Gewichtsfunktionsanteile, die mit der kleinsten Summe der quadratischen Abweichung das Gleichungssystem erfüllen.

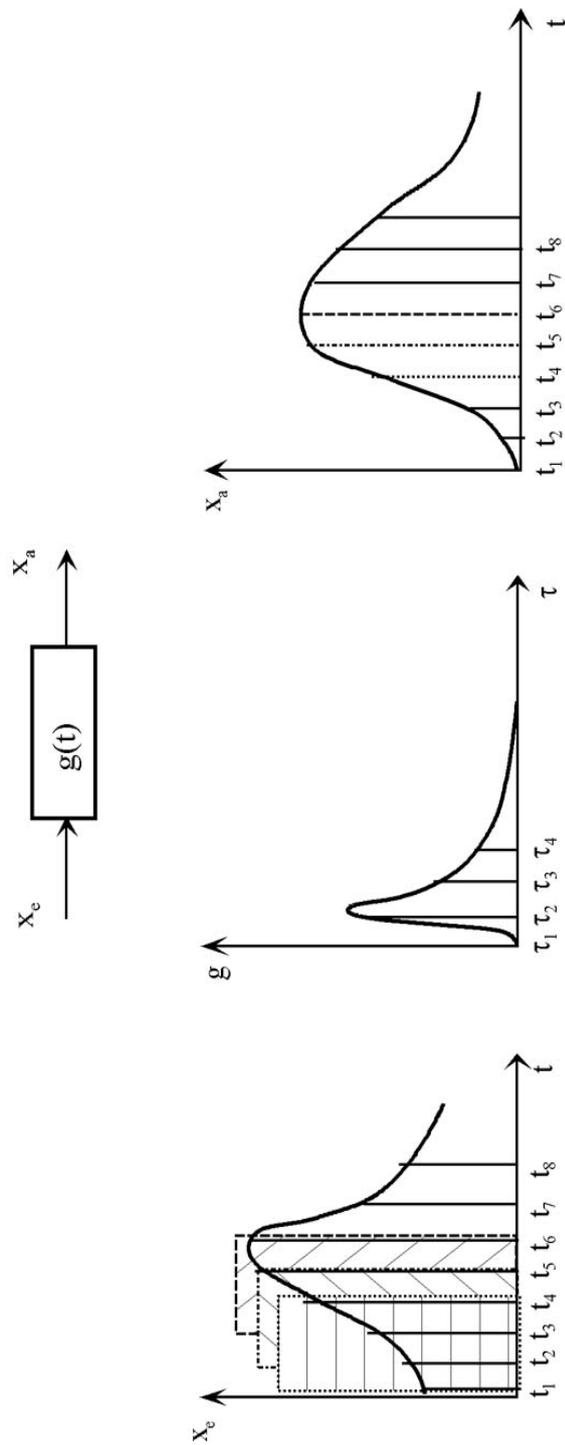


Abbildung 12.16: Bildung des diskontinuierlichen Antwortsignals aus den Messwerten

12.3.5 Prognosemodelle

Die Verwendung der Modelle zur Prognose von wasserwirtschaftlichen Ereignissen stellt auch ein Hauptanwendungsgebiet der Faltungsoperation dar. Die Vorgehensweise bei der Prognose lässt sich wie folgt algorithmieren. Voraussetzung der Anwendung des Faltungsintegrals zur Prognose ist, dass der Prozess bereits in einer Vorbereitungszeit beobachtet wurde, d.h., bevor eine Prognose durchgeführt werden kann, müssen mittels geeigneter Messtechnik die Ein- und Ausgangssignale des betrachteten Systems erfasst werden. Man spricht auch von einer Lernphase des Modells in dieser Zeit. Diese Messwerte dienen zur Bestimmung der Gewichtsfunktion $g(t)$, exakterweise $g(i)$ bzw. \mathbf{G} . Wieviel Zeit als Lernphase berücksichtigt wird, hängt u.a. von der historischen Datenlage, den Genauigkeitsanforderungen und dem gewünschten numerischen Aufwand ab.

An folgendem Beispiel soll die Handhabung demonstriert werden (siehe auch Abbildung 12.16, Seite 375). In diesem Fall existieren Messwerte des Eingangssignals für einen Bereich von sieben Abtastintervallen vor dem Prognosehorizont. Das Ausgangssignal wurde seit vier Intervallen gemessen. Aus dieser Wertemenge lassen sich folgende vier Gleichungen mit den Unbekannten g_1 bis g_4 formulieren. Es wird in diesem Beispiel folglich nur mit vier Stützstellen der Gewichtsfunktion gearbeitet. Für reale praktische Aufgaben ist dies im Allgemeinen zu grob quantisiert:

$$x_{a4} = T \cdot (g_4 x_{e1} + g_3 x_{e2} + g_2 x_{e3} + g_1 x_{e4}) \quad (12.45)$$

$$x_{a5} = T \cdot (g_4 x_{e2} + g_3 x_{e3} + g_2 x_{e4} + g_1 x_{e5})$$

$$x_{a6} = T \cdot (g_4 x_{e3} + g_3 x_{e4} + g_2 x_{e5} + g_1 x_{e6})$$

$$x_{a7} = T \cdot (g_4 x_{e4} + g_3 x_{e5} + g_2 x_{e6} + g_1 x_{e7})$$

Mittels geeigneter Verfahren zur Lösung von Gleichungssystemen erhält man die Gewichtsfunktionsanteile g_1 bis g_4 . Diese werden in eine Bestimmungsgleichung für den ersten Prognosezeitschritt (x_{a8}) eingesetzt. Damit kann der Prognosewert explizit berechnet werden:

$$x_{a8Prog} = T \cdot (g_4 x_{e5} + g_3 x_{e6} + g_2 x_{e7} + g_1 x_{e8}) \quad (12.46)$$

Parallel zur Prognose sollte der Prozess weiterhin messtechnisch überwacht werden. In diesem Fall erhält man zum Zeitpunkt 8 ein neues Wertepaar x_{e8Prog} und x_{a8gem} . Dieses kann zur Berechnung neuer Gewichtsfunktionsanteile benutzt werden. Bei Beibehaltung der Anzahl der Gewichtsfunktionsanteile geht das Eingangssignal x_{e1} nicht mehr in die Berechnung ein. Die erste Gleichung mit dem Eingangssignal x_{e1} kann aber auch in der Berechnung bleiben, und es stehen dann fünf Gleichungen für die Bestimmung der vier Gewichtsfunktionsanteile zur Verfügung. Dieses überbestimmte Gleichungssystem wird dann iterativ mit

einem entsprechendem Verfahren, z.B. dem HOUSEHOLDER- Verfahren, gelöst. Die gefundenen Werte repräsentieren die Übertragungscharakteristik des untersuchten Systems besser als dies mit dem bestimmten System möglich ist. Dieser Vergleich zwischen Prognose und realem Prozess wird auch als ständig lernendes System bezeichnet.

12.3.6 Aufgaben zur Anwendung des Faltungsintegrals:

1. Bei einem Pumpversuch wurden folgende Grundwasserstände gemessen (siehe Abbildung 12.17)

a) Berechnen Sie das Wasserdefizit (Volumen) des Absenkungstrichters, wenn der Grundwasserleiter folgende Kennwerte besitzt.

$$h_n = 16m, M = 10m, k = 0,001m \cdot s^{-1}, S_0 = 0,0001m^{-1}, n_0 = 0,20$$

b) Berechnen Sie mittels der Methode der Übertragungsglieder und dem unter a) gefundenen Wert für den Volumenstrom \dot{V} die Absenkungskurve für eine Förderleistung von $0,005m^3 \cdot s^{-1}$.

Stellen Sie für dieses Modell die ersten vier Gleichungen des Faltungsintegrals bis zum Beobachtungszeitpunkt von $t = 1d$ auf.

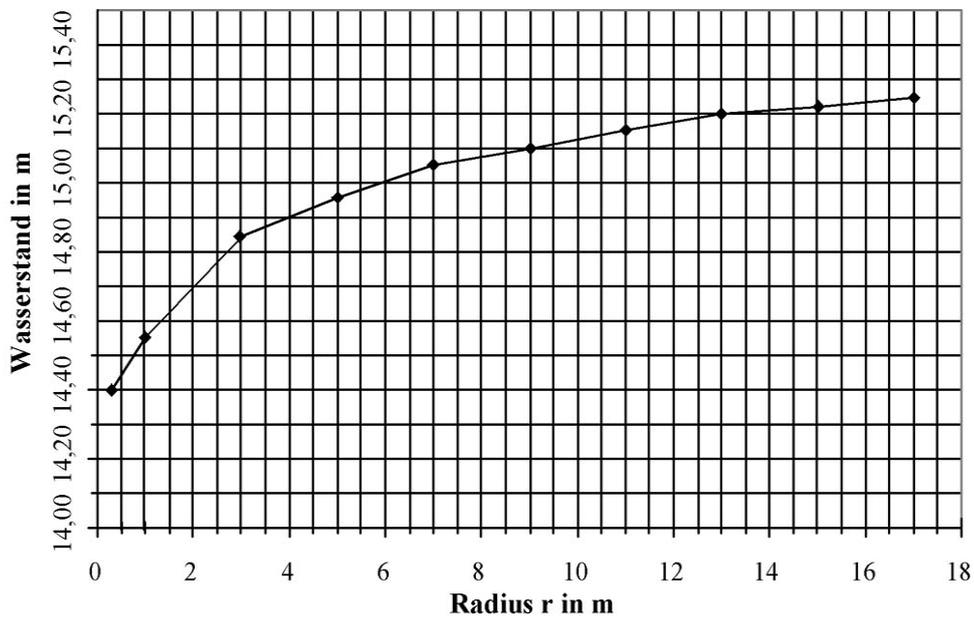


Abbildung 12.17: Grundwasserstand in Abhängigkeit vom Radius

2. Bei einem Pumpversuch wurden folgende Grundwasserstände gemessen:

$\dot{V} \left[\frac{dm^3}{s} \right]$	0	15	15	15	15	15	15	15	15	15	15
$s [cm]$	16,00	15,25	15,12	15,07	15,01	14,96	14,95	14,94	14,94	14,94	14,938
$t [min]$	0	15	30	45	60	75	90	105	120	135	135

Der Grundwasserleiter hat folgende Parameter:

$$h_n = 16m, M = 10m, k = 0,001 \frac{m}{s}, S_0 = 0,0001, n_0 = 0,20$$

Stellen Sie für dieses Modell die ersten vier Gleichungen des Faltingsintegrals bis zum Beobachtungszeitpunkt von $t = 135min$ auf.

3. Prognostizieren Sie den Temperaturverlauf in einer Uferfiltratsfassung unter Verwendung des Faltungsintegrals, wenn folgende Messwerte bekannt sind:

δ_{Fluss}° [°C]	14,2	16,0	17,7	19,4	17,2	16,0	17,6	18,6	14,8	12,0	13,7
$\delta_{Fass.gemes.}^{\circ}$ [°C]	8,5	10,0	11,4	14,0	14,1	14,7	15,4	15,8	15,6	14,9	14,1
$\delta_{Fass.progn.}^{\circ}$ [°C]											
Zeit [d]	0	15	30	45	60	75	90	105	120	135	150

Berechnen Sie den Temperaturverlauf ab dem sechsten Zeitschritt unter Verwendung von jeweils drei Gleichungen des Faltungsintegrals.

Vergleichen Sie die berechneten Temperaturen in der Fassung mit den gemessenen und korrigieren Sie die Gewichtsfunktionsanteile unter Berücksichtigung der gemessenen Werte.

Teil IV

Indirekte Parameteridentifikation

Die indirekte Parameteridentifikation soll hier als Methode zur Parameterbestimmung behandelt werden. Sie steht im Gegensatz zu den bei GRÄBER "Grundwassermesstechnik" beschriebenen physikalischen und chemischen Verfahren zur direkten Parameterbestimmung (im Englischen als "parameter estimation" bezeichnet). Die Methoden zur indirekten Parameteridentifikation sind mathematische, die entsprechend der experimentellen Prozessanalyse die Parameter zu einem Übertragungssystem bestimmen. Das Übertragungsverhalten kann dabei mittels experimenteller oder theoretischer Prozessanalyse gefunden werden. Entsprechend werden die identifizierten Parameter mehr oder weniger physikalisch/chemisch interpretierbar sein. Auf alle Fälle werden Parameter gefunden, die das Verhalten des Systems im Geltungsbereich des Experimentes gut widerspiegeln.



Kapitel 13

Schätzverfahren

In der wasserwirtschaftlichen Praxis wird die experimentelle Prozessanalyse vorrangig zur Parameterbestimmung benutzt. Dabei wird durch eine theoretische Prozessanalyse die Modellstruktur festgelegt. Diese Modellstruktur versucht man in mathematisch einfache Darstellungen zu überführen. Durch die Lösung von Bestimmungsgleichungen oder durch Lösung eines Parameterapproximationsproblems können dann die Parameter ermittelt werden. Es besteht somit die Aufgabe, auf Grund von Strukturkenntnissen oder -annahmen, ein solches Modell zu bestimmen, das

- die Eigenschaften des Systems so genau als notwendig widerspiegelt und
- die überlagerten Störeinflüsse und Fehler weitgehend eliminiert.

Zur Befriedigung dieser Forderungen dient der Vergleich der Ausgangsgrößen des Originals als Funktion der Eingangsgrößen oder einer unabhängigen Variablen (Zeit oder Ort) mit denen des Modells. Im Ergebnis dessen ist eine Veränderung der Parameter des Modells vorzunehmen oder das Modell selbst solange zu verändern, bis die Abweichung ein Minimum erreicht hat. Die Veränderungen können nach einer bestimmten Strategie (über Suchalgorithmen, Optimierungsprogramme), statistisch (Zufallsgenerator) oder empirisch erfolgen. Auch der visuelle Vergleich zwischen den beiden grafischen Darstellungen (Original- und Modellausgangssignal) ist möglich.

Diese Aufgabe wird auch als Parameterschätzung bezeichnet. Insbesondere die im Folgenden vorzustellenden Vorgehensweisen werden als **iterative Schätzverfahren** klassifiziert.

Bei der algorithmierten oder iterativen Modellanpassung (siehe Abbildung 13.1) wird versucht, den gleichen Eingangsvektor, den Stellvektor y , sowohl auf den Prozess als auch auf das Modell wirken zu lassen. Mit einem ersten Parametersatz, den Startparametern, lässt sich der Ausgangsvektor des Modells x_M^1 als erste Näherung berechnen. Die Abweichung dieses Vektors von dem Ausgangsvektor des Prozesses wird als Güte der Anpassung des Modells bezeichnet. Bei den wasserwirtschaftlichen Anwendungen hat sich die quadratische Bewertung durchgesetzt. Das Ziel der Parameteränderung muss nun die Minimierung dieses Wertes Q sein.

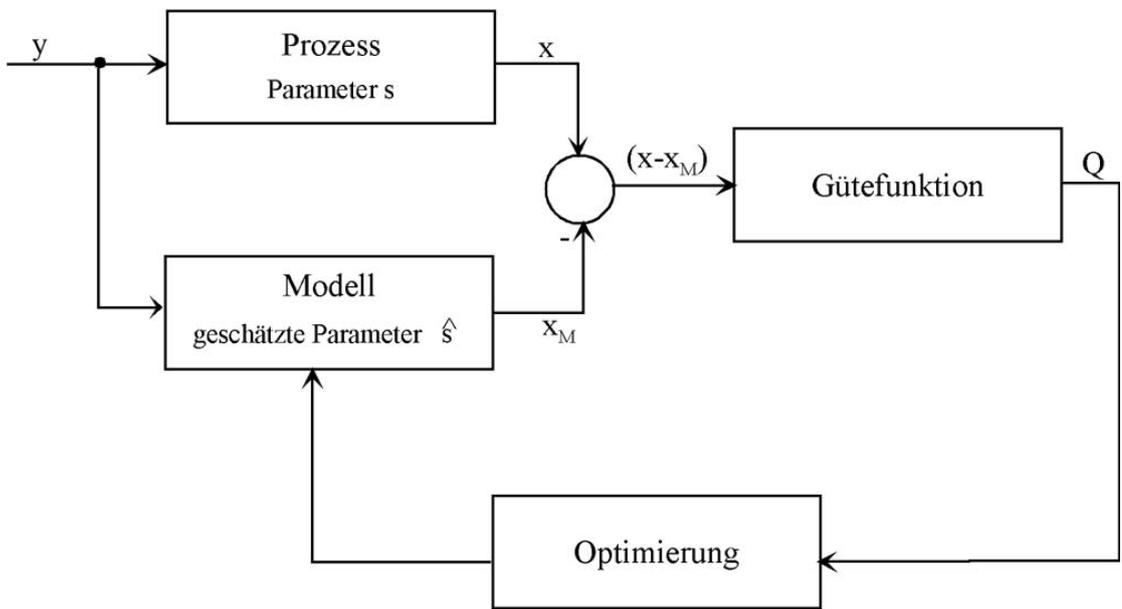


Abbildung 13.1: Iterative Modellanpassung

Kapitel 14

Strömungsparameter

14.1 Pumpversuchsauswertung

14.1.1 Grundlagen

Die Auswertung von Pumpversuchen, bei denen z.B. aus einem Brunnen Wasser gefördert und die Absenkung in Abhängigkeit von Ort und Zeit diskontinuierlich registriert wird, ist eine sehr aussagekräftige und repräsentative Methode zur Ermittlung geohydraulischer Parameter. Sie hat gegenüber den Laborverfahren die Vorteile, dass sie

- an ungestörten Grundwasserleitern durchgeführt wird und
- in der Regel integrale Aussagen über den Grundwasserleiter in dem betrachteten Strömungsfeldabschnitt trifft.

Die Parameterbestimmung von Grundwasserleitern geschieht bei den direkten Laborversuchen an Bodenproben, die mittels Stechzylinder oder aus dem Bohrgut gewonnen werden. Die Nachteile bestehen bei diesen Verfahren zum einen darin, dass nur eine punktuelle Parameterbestimmung in dem normalerweise sehr inhomogenen Grundwasserleiter erfolgt. Zum anderen wird durch die Probenahme das Korngerüst des Bodens zerstört und damit ein anderes Medium labormäßig ausgewertet. Ein dritter Unterschied besteht darin, dass im Labor der gesamte Wassergehalt bestimmt wird, während in der Natur und damit auch beim Pumpversuch nur das entwässerbare Porenvolumen zur Wirkung kommt. Auf Grund des integralen Charakters der Pumpversuche erhöht sich die Repräsentanz der mittels dieses Verfahrens bestimmten Parameter (siehe Tabelle 14.1).

Tabelle 14.1: Unterschiede zwischen Pumpversuchsauswertung und Labormethoden

Charaktereigenschaft	Labormethode	Pumpversuchsauswertung
Örtliche Ausdehnung	punktuell	integral
Repräsentanz	klein	groß
Korngerüst	zerstört	ungestört
Speicherkapazität	Gesamtwasservolumen	entwässerbares Volumen
Aufwand	relativ gering	sehr hoch

Andererseits sind die Pumpversuche wesentlich aufwendiger und teurer als Laboruntersuchungen. Deshalb muss der Versuchsplanung, Durchführung und Auswertung besonderer Wert beigemessen werden. Meist sind auch nur einmalige Versuchsdurchführungen möglich.

Für die Auswertung solcher Pumpversuche werden in der Praxis besonders zwei Verfahren, angewendet:

- die grafischen Verfahren; in der wasserwirtschaftlichen Praxis meist als straight-line-Verfahren und als Verfahren der typischen Kurven bezeichnet und
- die Suchverfahren bzw. die Optimierungsverfahren.

Bei den Pumpversuchen wird als Modell die Brunnenanströmung benutzt. Wie im Abschnitt 8.1 THEISSche Brunnengleichung, Seite 204 hergeleitet, eignet sich für die Berechnung von Absenkungsverläufen infolge von Wasserentnahme aus Brunnen die Lösung der partiellen Differentialgleichung nach THEIS. Dieses Modell kann natürlich nur näherungsweise für die praktischen Strömungsverhältnisse angenommen werden. Die Verwendung eines Modells mit besserer Widerspiegelung des Originals verbietet sich auf Grund der zu großen Anzahl freier Parameter, die es dann anzupassen gelte. Die wesentlichste Einschränkung der analytischen Modelle besteht in der Berücksichtigung nur eines Grundwasserleiters. Die Konstanz der Parameter Transmissibilität T und Speicherkoeffizient S sowie die horizontale Sohlage können bei der geringen räumlichen Ausdehnung der Pumpversuche als gegeben vorausgesetzt werden. Natürlich muss auch beachtet werden, dass die Transmissibilitätsänderung während des Absenkungsvorganges vernachlässigbar klein bleibt (Linearisierung um den Arbeitspunkt).

Die Gütefunktion GF wird in dem Fall der Pumpversuchsauswertung als Summe der quadratischen Abweichung der Messwerte am Originalprozess und Modellergebnissen an den verschiedenen Orts- und Zeitpunkten definiert (siehe Abbildung 14.1):

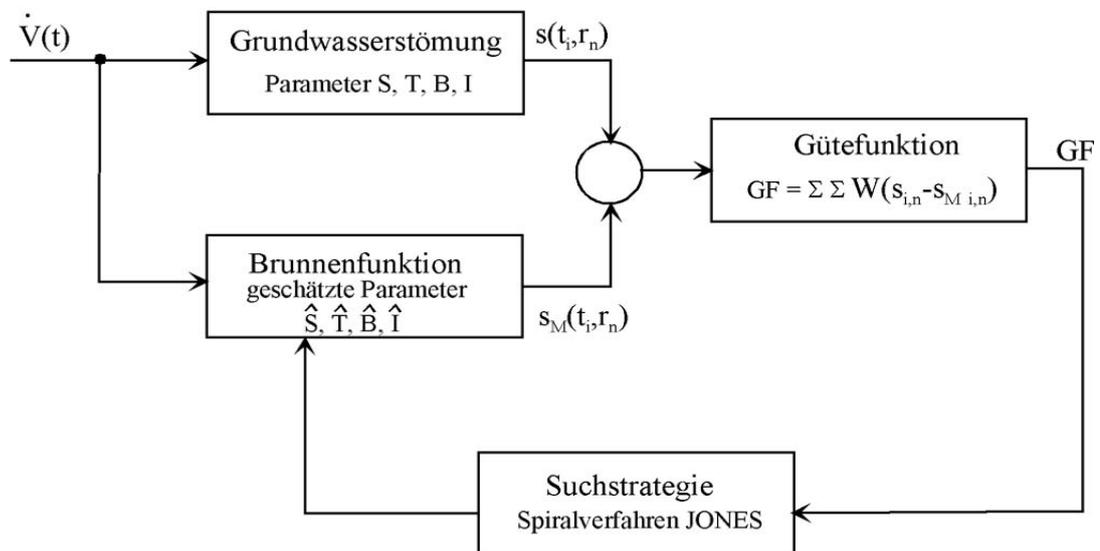


Abbildung 14.1: Iterative Modellanpassung bei einem Pumpversuch

$$GF = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m W_{i,j} \cdot (s_{i,j} - s_{Mi,j})^2 \quad (14.1)$$

mit:

$W_{i,j}$	Wichtungsfaktor
s	Absenkungswerte des Originals
s_M	Absenkungswerte des Modells
m	maximale Anzahl der Zeitschritte
n	maximale Anzahl der örtlichen Beobachtungspunkte

14.1.2 Praktische Realisierung

Zur Anpassung der Parameter an die Messwerte wird die Methode der kleinsten Fehlerquadrate (MKQ) benutzt. Das Ziel dabei ist es, die Gütefunktion GF zu minimieren. Im Abschnitt 4.3 Methode der kleinsten Fehlerquadrate, Seite 102 wurden allgemein entsprechende effektive Verfahren aufgezeigt. Es hat sich gezeigt, dass die Suchstrategie auf der Basis der nichtlinearen Regression unter Ausnutzung des Gradienten für den Einsatz bei der Pumpversuchsauswertung am besten geeignet ist. Durch den Einsatz des Spiralverfahrens nach JONES (DAMMERT) konnte die Anzahl der Suchschritte bei der Pumpversuchsauswertung drastisch (Faktor 10) gegenüber dem ROSENBROCKSchen Suchalgorithmus reduziert werden. Dieses Verfahren setzt voraus, dass die Gütefunktion stetig und differenzierbar ist. Beides ist bei der analytischen Lösung der Brunnenfunktion nach THEIS gegeben.

Zur praktischen Realisierung wurde von BEIMS/GRÄBER das Programmsystem PSU (Pumpversuchsauswertung) entwickelt. Dieses Programmsystem (siehe Abbildung 14.2) hat einen modularen Aufbau, der es erlaubt, beliebige Module zur Bildung der Gütefunktion und des Suchalgorithmus mit entsprechenden Hauptprogrammen zu koppeln.

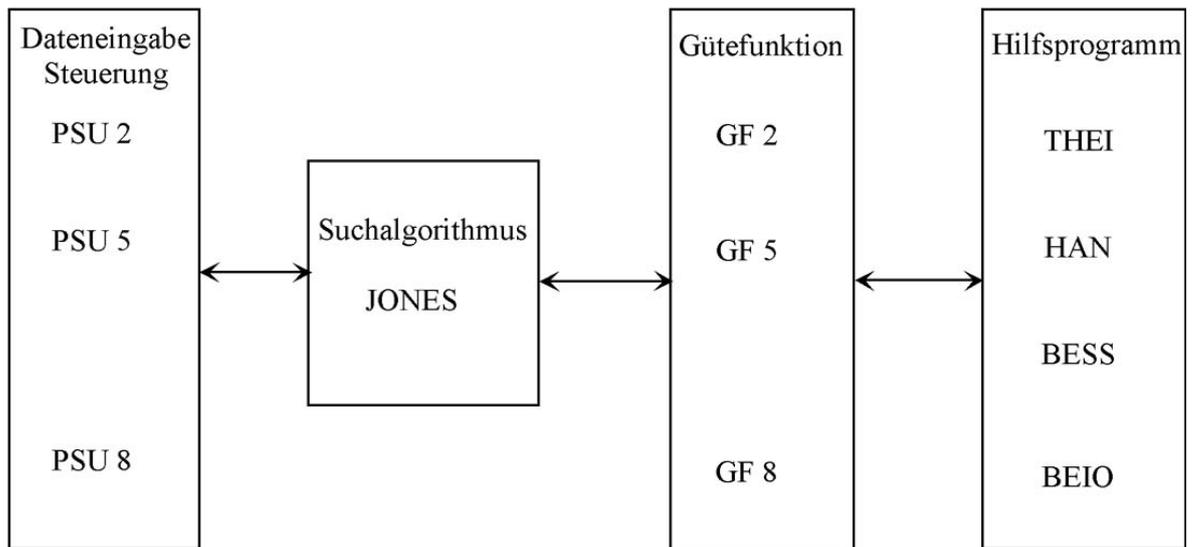


Abbildung 14.2: Programmsystem zur Pumpversuchsauswertung nach BEIMS/GRÄBER

Mit den nachfolgend aufgeführten Versionen PSU2, PSU5 und PSU8 (siehe Tabelle 14.2) können die wesentlichsten aller praktischen Pumpversuche ausgewertet werden.

Tabelle 14.2: Realisierte Programmversionen mit geohydraulischem Schema

Programm	Geohydraulisches Schema	Ergebnisse
PSU2	Unendlich ausgedehnter Grundwasserleiter ohne Speisung	T, S
PSU5	Unendlich ausgedehnter Grundwasserleiter mit Speisung	T, S, B
PSU8	Einseitig begrenzter Grundwasserleiter ohne Speisung	T, S, λ^*

In der Tabelle 14.2 bedeuten:

$T \left[\frac{m^2}{s} \right]$ Transmissibilität, Profildurchlässigkeit

$S [-]$ Speicherkoeffizient

$B [m]$ Speisungsfaktor

$\lambda^* [m]$ wirksame Randbedingungsentfernung

Die Programme PSUX sind in Form von Hauptprogrammen geschrieben und realisieren die Datenein- und -ausgabe sowie die Steuerung des Suchalgorithmus. Als Ausgabe können durch Setzen entsprechender Steuervariablen die angepassten Werte jedes Suchschrittes oder nur die Parameter dienen, die die Anpassung entsprechend der vorgegebenen Fehler-

schanke ergeben. Weiterhin ist ein grafischer Vergleich der Messwerte des Pumpversuches und der angepassten Absenkungskurve möglich. Das Suchprogramm wurde nach dem JONESSchen Spiralverfahren realisiert. Es ermittelt auf der Basis der nichtlinearen Regression unter Ausnutzung des Differentials das Minimum der Gütefunktion (siehe Abbildungen 14.3 und 14.4). Die Gütefunktion ist entsprechend der geohydraulischen Gegebenheiten auszuwählen. Sie ist definiert als die Summe der quadratischen Abweichungen zwischen den Messwerten und der theoretischen Absenkungskurve. Im Modul der Hilfsprogramme sind wichtige Unterprogramme zur Lösung der Brunnenströmungsgleichung zusammengefasst, so z.B. die Brunnenfunktionen $W(\sigma)$ nach THEIS und $W(\sigma, B)$ nach HANTUSCH sowie die BESSEL-Funktionen $K_0(x)$ und $I_0(x)$.

Ein besonderes Problem besteht in der Suche der Parameter B (Speisungsfaktor) und λ^* (wirksame Randbedingungsentfernung), da sie von T und S nicht unabhängig sind. Der Suchalgorithmus ist aber nur dann für mehrere Parameter einzusetzen, wenn diese voneinander unabhängig sind. Es wird in diesen Fällen der Trick gemacht, in der Absenkungskurve Gebiete auszugrenzen, die von den verschiedenen Parametern dominant abhängen. So kann physikalisch begründet werden, dass die Absenkung in der Anfangsphase eines Pumpversuches im Wesentlichen von der Transmissibilität T und dem Speicherkoeffizienten S des brunnennahen Raumes abhängen. In der quasistationären Phase kommen als weitere Wirkgrößen der Speisungsfaktor B und/oder die Randbedingung (wirksame Randbedingungsentfernung λ^*) zur Wirkung. Aufbauend auf diese Einteilung der Absenkungskurve in verschiedene Phasen wird eine so genannte Stufensuche durchgeführt. In der Phase 1 werden die Parameter T und S gesucht. Die Messwerte der Phase 2 dienen zur Ermittlung des Speisungsfaktors und/oder der wirksamen Randbedingungsentfernung. Die Parameter T und S werden während dieser Phase als bekannt (aus Phase 1 ermittelt) angesetzt und damit nicht in den Suchprozess einbezogen. Die Messwerte aus dem Wiederanstiegsprozess werden in einer Phase 3 zusammengefasst. Mit ihnen lässt sich nochmals eine Verbesserung der angepassten Werte erreichen. In dieser Phase werden die Parameter der Phase 2 als bekannt, d.h. als nicht anpassbar, betrachtet und wiederum nur eine Suche nach den beiden Werten T und S durchgeführt.

Die Pumpversuchsauswertung mit den Programmen PSUX kann natürlich nur so gut sein wie die Messwerte, die Absenkungswerte aus dem Pumpversuch, sind und wie gut das Modell der Brunnenanströmgleichung die Naturprozesse widerspiegelt. Für geohydraulisch komplizierte Bedingungen muss auf andere, z.B. dem Pumpversuchssimulator, zurückgegriffen werden.

Die Aussagekraft von Pumpversuchen bzw. allgemein von Verfahren der experimentellen Prozessanalyse hängt auch von dem verwendeten Testsignal ab. Beim klassischen Pumpversuch ist dies eine Sprungfunktion mit der Sprunghöhe \dot{V} , der geförderten Wassermenge. Die besten Ergebnisse könnten bei der Verwendung eines DIRAC-Impulses (theoretischer Impuls mit einer Höhe von unendlich und einer Zeitdauer, die gegen Null geht) erzielt werden. Dieser ist technisch nicht realisierbar. Als Kompromiss haben sich die Impulsfunktion,

die Sprungfunktion, periodische Signale und stochastische Signalfolgen durchgesetzt. Für die Bestimmung des stationären Endzustandes, das so genannte statische Verhalten, ist die Sprungfunktion zu bevorzugen. Eine Kombination verschiedener Testsignale in den Varianten

- Sprungfunktion - Impulsfunktion,
- Sprungfunktion - periodische Signale oder
- Sprungfunktion - stochastische Signalfolgen

führen zu effektiven Ermittlungen des dynamischen Übergangs- und des statischen Endzustandes.

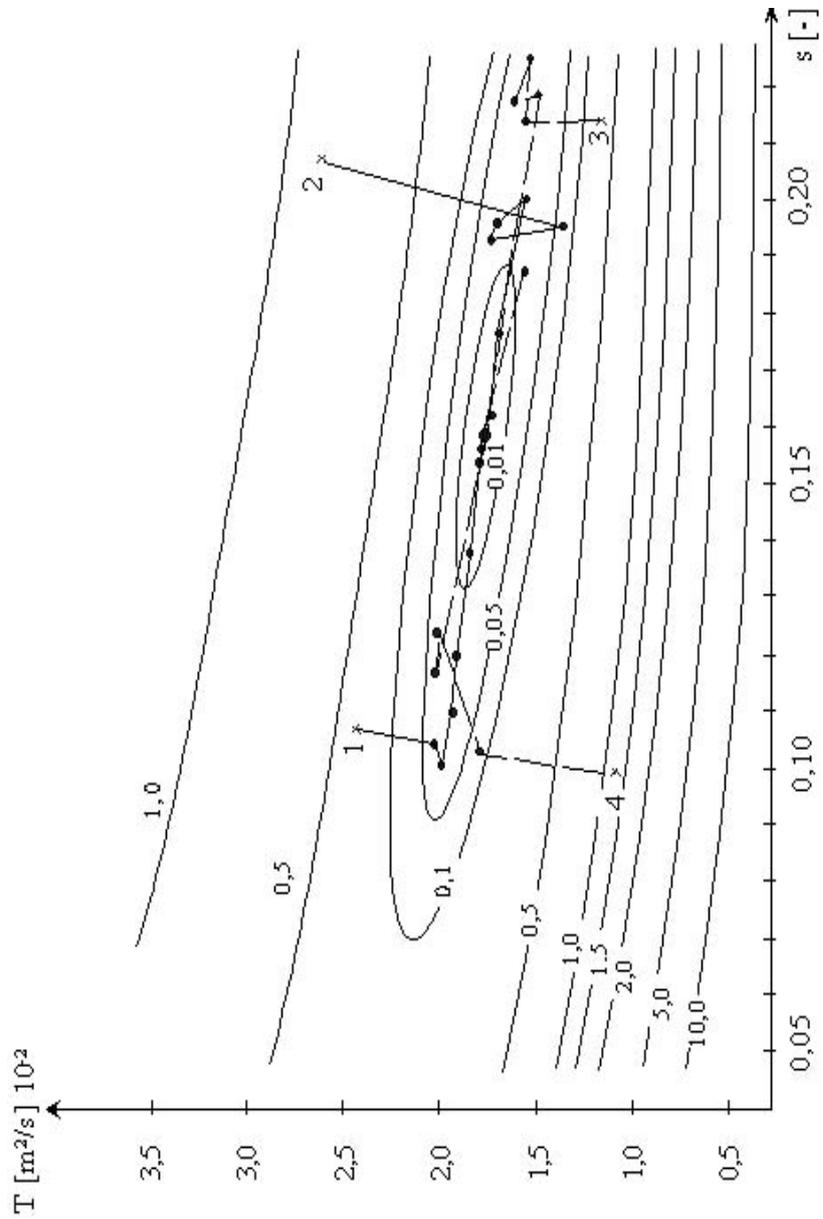


Abbildung 14.3: Gütegebirge bei einer Pumpversuchsauswertung mit dem Suchverlauf von unterschiedlichen Startpunkten

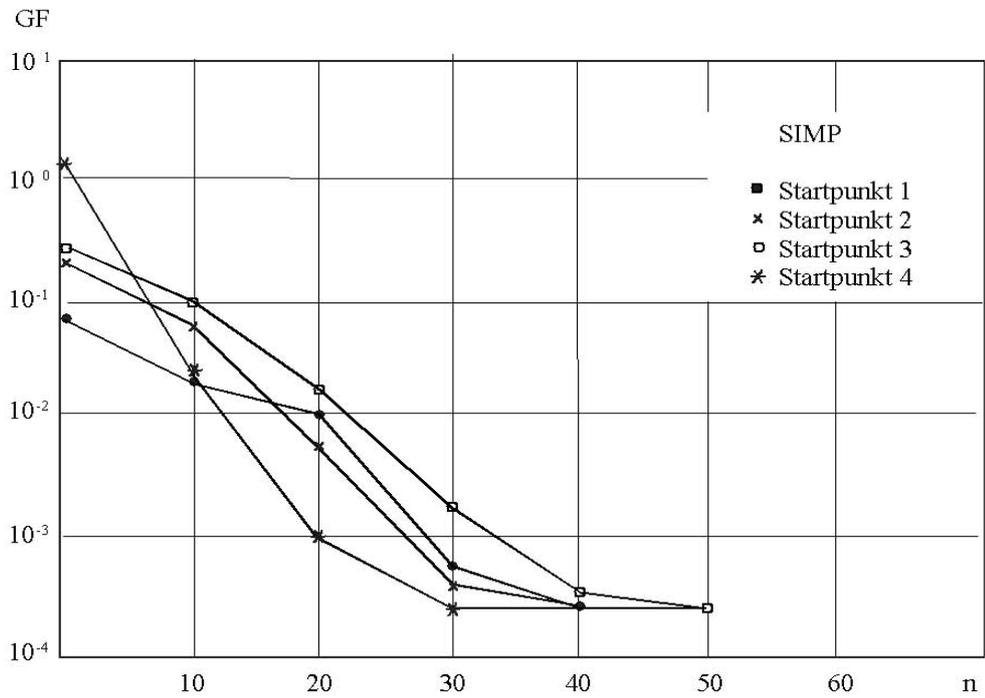
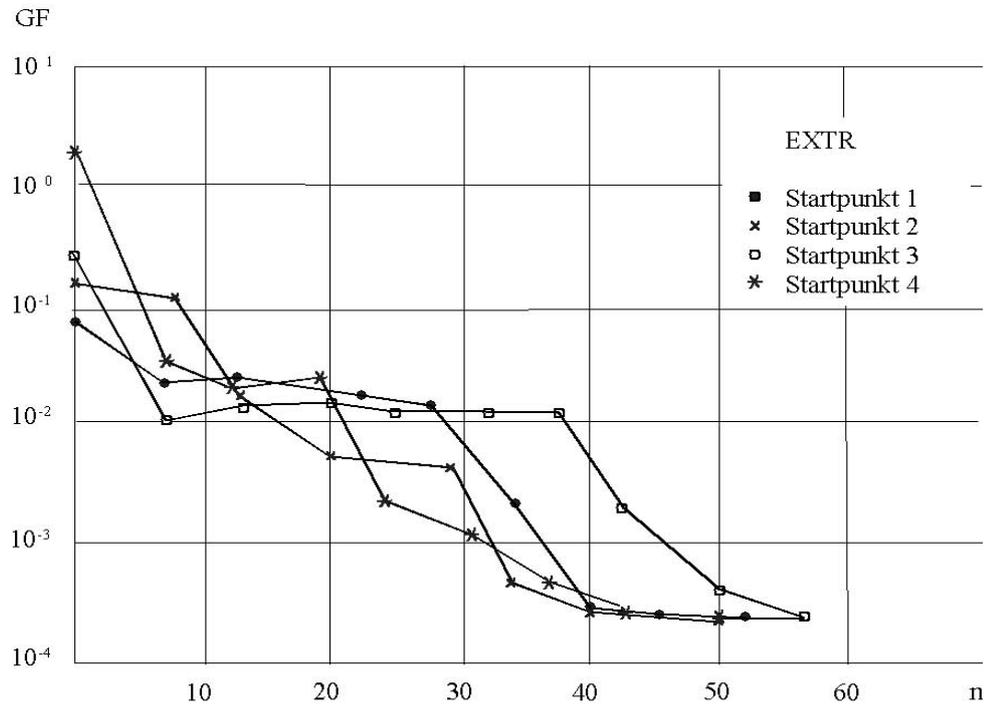


Abbildung 14.4: Iterationsverhalten bei der Pumpversuchsauswertung

14.2 Pumpversuchssimulator

Das oben dargestellte Programmpaket PSUX zur Auswertung von Pumpversuchen mit den dazugehörigen analytischen Lösungen auf der Basis der Brunnenfunktion von THEIS bzw. HANTUSCH weist erhebliche Einschränkungen auf. So können bei diesem System nicht alle Eigenschaften des Grundwasserleiters wie Anisotropie, Schichtung, Heterogenität oder Kapillarraum und nicht alle möglichen Eigenschaften des Brunnenausbaues wie Unvollkommenheit, Brunnendurchmesser, Zufluss durch die Brunnensohle, Filterverluste und anderes berücksichtigt werden. Sowohl bei der Verwendung von natürlichen Signalen zur Parameteridentifikation, als auch bei künstlich erzeugten Testsignalen, wie bei den Pumpversuchen, muss davon ausgegangen werden, dass es sich in der Regel um einmalige Vorgänge, die u.a. auf Grund der Kosten nicht wiederholbar bzw. veränderbar sind, handelt. Deshalb ist es notwendig, sich intensiv mit der Versuchsplanung derartiger Feldtests zu beschäftigen.

Von MUCHA/PAULIKOVA wurde ein numerisches Modell beschrieben, mit dem Pumpversuche simuliert und interaktiv ausgewertet werden können. Dieses Modell basiert auf einem vertikalebene rotationssymmetrischen quantisierten Strömungsmodell, welches praktisch keine vereinfachende Annahmen berücksichtigt. Von BEIMS/GRÄBER ist dies in ein Programmsystem WELL, den so genannten Pumpversuchssimulator, umgesetzt worden. An diesem können ausgehend von hypothetischen Annahmen über das zu untersuchende Gebiet die Wirkung eines Pumpversuches demonstriert und optimiert werden. Mit diesem Modell lassen sich neben der Inhomogenität die Existenz mehrerer Grundwasserleiter und auch Gestaltungselemente des brunnennahen Raumes berücksichtigen. Die Transmissibilität kann in ihrer horizontalen und vertikalen Inhomogenität berücksichtigt werden. Weiterhin kann der spezifische elastische sowie der gravimetrische Speicherkoeffizient verarbeitet werden. Das Modell erfasst freie Grundwasserströmungsverhältnisse als ein kompressibles System und die freie Oberfläche als eine bewegliche Grenze. Dabei wird die Transmissibilität entsprechend der konkreten Lage der freien Oberfläche berechnet. Am letzten Radiuspunkt r_n wird das System als undurchlässig angesehen, d.h. die Diskretisierung muss so gewählt werden, dass dort praktisch keine Absenkung auftritt (siehe Abbildung 14.5, Seite 402).

An Hand einer grafischen Ausgabe kann die Wirkung der verschiedenen Eingangssignale demonstriert und gleichzeitig die optimalen Messzeitpunkte in Abhängigkeit der Entfernung und des Absenkungsgradienten für den realen Pumpversuch ermittelt werden. Die örtliche Lage der Pegelbeobachtungsrohre ist meist auf Grund technologischer Bedingungen vorgegeben.

Der Pumpversuchssimulator WELL wird für folgende Aufgabengebiete eingesetzt:

- Analyse von Vereinfachungen und Annahmen, die den verschiedenen analytischen Lösungen zu Grunde liegen.
- Ermittlung der Strömungs- und Geschwindigkeitsverhältnisse in der Nähe des Brun-

nens.

- Berechnung von typischen Kurven für spezielle Brunnen- und Grundwasserleiterverhältnisse.
- Interaktive Pumpversuchsauswertung.

Die Arbeit mit dem Pumpversuchssimulator WELL stellt somit eine wesentliche Ergänzung der Pumpversuchsauswertung und -interpretation dar. Der Einsatz als Modell bei der indirekten Parameteridentifikation ist nur mittels großem speziellen Aufwand möglich.

Der Pumpversuchssimulator ist ein vertikales Finite-Differenzen-Modell, dessen Quantisierung in vertikaler Richtung entsprechend der geologischen Schichtung und der Brunnengeometrie erfolgt. In horizontaler Richtung wird die Quantisierung logarithmisch durchgeführt ($r_i = r_{i+1} \cdot 10^{0,25}$). Die Knotenpunkte liegen im Schwerpunkt des Gitternetzes, d.h. sie sind gegenüber der geometrischen Mitte um den Betrag Δr_i nach außen verschoben:

$$\Delta r_i = \frac{(r_{i+1} - r_i)^2}{6(r_{i+1} + r_i)} \quad (14.2)$$

Die Durchlässigkeitswerte sind als hydraulische Leitwerte zwischen den Knoten definiert. Für den Leitwert in horizontaler Richtung, beispielsweise zwischen den Knoten 5/4 und 6/4, ist unter Annahme der DUPUIT-THIEM-Gleichung für die Grundwasserströmung zu einem Brunnen:

$$TF_{5/4} \rightarrow = \frac{2\pi k_{h,4} b_4}{\ln\left(\frac{r_6}{r_5}\right)} \quad (14.3)$$

mit:

$k_{h,4}$ horizontaler Durchlässigkeitskoeffizient der 4. diskretisierten Schicht

b_4 Mächtigkeit der 4. Schicht

r_5, r_6 Radien der Knoten 5 und 6

Der Leitwert in vertikaler Richtung, beispielsweise zwischen den Knoten 6/2 und 6/3 ergibt sich zu:

$$TF_{6/2} \uparrow = \pi(r_7^2 - r_6^2) \left(\left(\frac{2k_{v,2}}{b_2} \right) + \left(\frac{2k_{v,3}}{b_3} \right) \right) \quad (14.4)$$

$$TF_{6/2} \uparrow = \frac{2\pi(r_7^2 - r_6^2)(k_{v,2}b_3 + k_{v,3}b_2)}{b_2b_3} \quad (14.5)$$

mit:

$k_{v,2}, k_{v,3}$ vertikaler Durchlässigkeitskoeffizient der 2. bzw. 3. Schicht

b_2, b_3 Mächtigkeit der 2. bzw. 3. Schicht

r_6, r_7 Radien der Elementenutzgrenzen 6 und 7

Aus den Leitwerten ergibt sich dann als fließende Wassermenge beispielsweise zwischen den Knoten 5/4 und 6/4:

$$\dot{V}_{5,4,6,4} = TF_{5/4} \rightarrow (H_{5/4} - H_{6/4}) \quad (14.6)$$

wobei $H_{5/4}$ und $H_{6/4}$ die Piezometerhöhen in den Knoten 5/4 und 6/4 sind. Der Speicherkoeffizient S bezeichnet das Verhältnis des Volumens an Wasser einer Einheit, die bei einer Standrohrspiegelhöhenänderung um $1m$ frei wird, zum Gesamtvolumen dieser Einheit. So ist der Speicherfaktor im Knoten 6/5 z.B.:

$$SF_{6/5} = S_{s,5} b_5 \pi (r_7^2 - r_6^2) \quad (14.7)$$

$S_{s,5}$ spezifischer elastischer Speicherkoeffizient der 5. Schicht

b_5 Mächtigkeit der 5. Schicht

r_6, r_7 Radien des dazugehörigen Elementes

Der Speicherfaktor für die freie Wasseroberfläche z.B. am Knoten 5/1 ist:

$$SF_{5,1} = S_y \pi (r_6^2 - r_5^2) \quad (14.8)$$

S_y Gravitationsspeicherkoeffizient

Das freiwerdende Wasservolumen ergibt sich somit für den Knoten 5/1 zu:

$$V_{5,1} = SF_{5,1} (H_{5,1,t} - H_{5,1,t-\Delta t}) \quad (14.9)$$

$H_{5,1,t}$ und $H_{5,1,t-\Delta t}$ sind die Potentiale am Knoten 5/1 zu den Zeitpunkten t und $t-\Delta t$, wobei Δt das Zeitintervall ist. Der Speicherfaktor für den Brunnen ergibt sich für den Knoten 1/1 zu:

$$SF_{1,1} = \pi r_{1,j}^2$$

$r_{1,j}$ wirksamer Brunnenradius der j -ten Schicht

Die linearen Brunnenverluste sind im Koeffizient φ enthalten:

$$\text{Brunnenverluste} = \frac{\dot{V}}{4\pi T} \varphi$$

Die Strömung aus der 4. Schicht in den Brunnen ergibt sich durch den Faktor:

$$TF_{1/4} = \frac{2\pi k_{h/4} \cdot b_4 c/a}{\ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right) + \frac{c}{2}}$$

wobei c/a die relative Position des Knotenpunktes 1/4 zwischen dem Wasserstand im Brunnen und dem Wasserstand im Knoten 2/1 ist. Die Strömung in den Brunnen kann durch den Filter oder die Brunnensohle erfolgen.

Die Zeitdiskretisierung beginnt mit einer kleinen Schrittweite Δt und wird automatisch nach der Vorschrift

$$\Delta t_{i+1} = \Delta t_i \cdot 10^{0,1} \quad (14.10)$$

vergrößert.

Wenn die Fördermenge nicht konstant ist, erfolgt die Eingabe der Zeitschritte und der Fördermenge von Hand nach jeder Berechnungszeit.

Die entstehende Bandmatrix mit den fünf Diagonalelementen wird nach einer direkten Methode (GAUSS-Verfahren) gelöst.

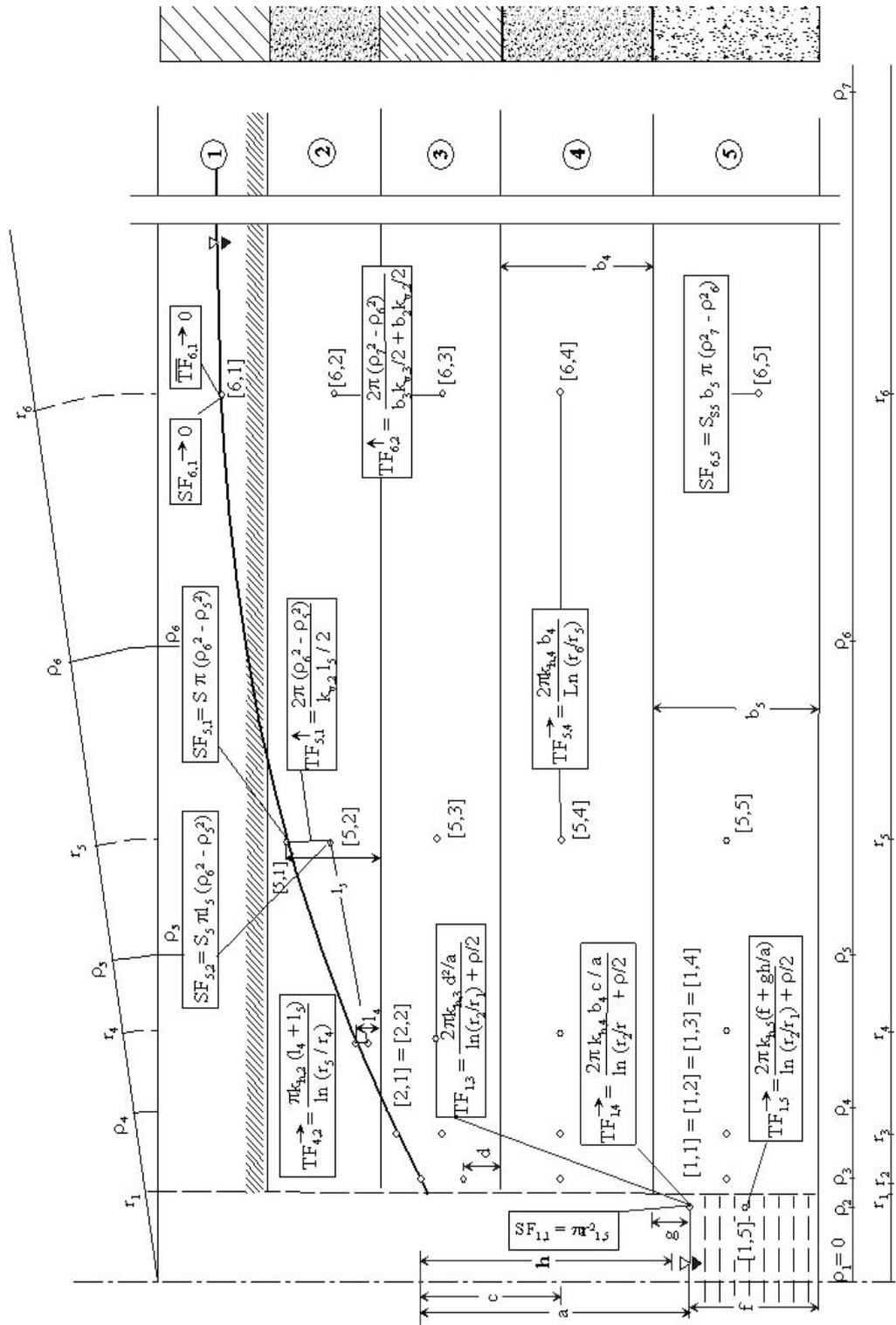


Abbildung 14.5: Strukturschema des Pumpversuchssimulators (BEIMS/MUCHA/GRÄBER)

Kapitel 15

Saugspannungsverteilung

Ein anderes Gebiet der Anwendung der Methoden zur Parameteridentifikation des Systems Boden ist im Labormaßstab bei der Ermittlung der Saugspannungs-Sättigungs-Verteilung (SSV) im ungesättigten Bereich vorhanden. Das Messverfahren für dieses Verhalten des Bodens ist bei GRÄBER "Grundwassermesstechnik" näher beschrieben und das mathematische Modell hierzu im Abschnitt 6 Differentialgleichungen, Seite 183 der Grundwasserprozesse abgeleitet.

Typisch für das Saugspannungs-Sättigungs-Verhalten ist der hystereseähnliche Zusammenhang zwischen der Saugspannung p_k und der Sättigung n_b . Als mathematisches Modell dieser SSV-Kurven wurde von LUCKNER/SHESTAKOV eine Gleichung angegeben, wobei A, B, C, und D vier Konstanten sind, die aus der versuchstechnisch gewonnenen oberen (Entwässerung) und der unteren (Bewässerung) Grenzkurve der Hystereseäste getrennt bestimmt werden müssen:

$$\Theta = \frac{\Theta - A}{n - A - B} = \left[\frac{1}{1 + C \frac{D}{p_c}} \right]^{(1-1/D)} \quad (15.1)$$

Das Bestimmen dieser Parameter fällt in das Aufgabenspektrum der indirekten Parameteridentifikation, wobei es sich in diesem Fall um die Approximation einer statischen Kennlinie handelt. Aus diesem Grund müssen keine Aussagen über die Art der Testsignale getroffen werden. Das dynamische Verhalten entsprechend der partiellen Differentialgleichung für diesen Prozess wird derzeit noch nicht ausgewertet.

Die Ermittlung der vier Parameter kann dabei nach dem empirischen grafischen Verfahren (Verfahren der typischen Kurven) oder dem mathematischen Suchalgorithmus erfolgen. Das erste Verfahren wird benutzt, um in der Phase der Versuchsplanung, die Startwerte für die Suchstrategie zu erhalten und zum anderen optimale Versuchsbedingungen (Messpunktwahl) zu erreichen. Der mathematische Suchalgorithmus wird dann zur möglichst genauen Approximation des mathematischen Modells an die gefundenen Messwertepaare (p_k, n_b) benutzt. Auch hier erfolgt die Anpassung über das quadratische Gütekriterium, das hier die Abweichungen zwischen n_0 und n_m bei allen eingestellten Arbeitspunkten (Druckstufen) repräsentiert. Zur Minimumsuche wurde das Grabenverfahren nach FIBONACCI eingesetzt. Dieses hat den Vorteil, dass es relativ "robust" ist, aber bereits bei einer sehr groben Näherung stagniert. Dieses Verhalten hängt u.a. auch von dem relativ flachen Gütegebirge ab. Es wird deshalb vorgeschlagen, das Verfahren nach POWELL einzusetzen. Dieses zeigt gutes Konvergenzverhalten. Da das Gütegebirge, bedingt durch seine abstrakte Formulierung, so ausgebildet ist, dass auch Minima in Bereichen existieren, die physikalisch keine sinnvolle Interpretation zulassen (z.B. negative Sättigung), wurden spezielle Gewichtsfunktionen eingeführt. Sobald physikalisch bedingte Grenzen für die Sättigung erreicht werden (Restsättigung der Luft bzw. des Wassers), erhält die Gütefunktion entsprechende Maximalwerte. Das Gradientenverfahren der nichtlinearen Regression, wie es bei der Pumpversuchsauswertung vorteilhaft eingesetzt wird, versagt hier, da das Gütegebirge sehr flach verläuft und an den physikalisch bedingten Ränder Knickstellen aufweist, die der geforderten Differenzierbarkeit widersprechen.

LITERATURVERZEICHNIS

INDEX-Verzeichnis

- Übergangsfunktion, 318
- Übertragungsfunktion, 318

- Analoge Signale, 314
- Anfangsbedingungen, 199
- Anfangswertaufgabe, 167
- Assoziativgesetz, 10, 48
- Aufgaben
 - Algebraische Ausdrücke, 3
 - Analyt. Berechnung von Grundwasserströmungen
 - THEIS-sche Brunnengleichung, 234
 - Aufstellen von DGL, 114
 - Berechnung von Matrixgleichungen, 15
 - experimentelle Prozessanalyse, 361
 - Faltungintegral, 378
 - Interpolation nach
 - LAGRANGE, 100
 - Lösung von
 - Gleichungssystemen mittels CRAMERScher Regel, 41
 - Gleichungssystemen mittels GAUSSschen Algorithmus, 41
 - Lösung von DGL
 - erster Ordnung, 126
 - höherer Ordnung, 138
 - LAPLACE-Transformation, 153
 - Numer. Berechnung von Grundwasserströmungsprozessen
 - Finite-Differenzen-Methode, 281
 - Numerische Integration, 164, 179
 - Vektorrechnung, 60

- Beispiel
 - Addition von Matrizen, 8
 - Anwendung der Divergenz, 53
 - Anwendung des Gradienten, 52
 - Aufstellen von DGL, 113
 - EULER-Verfahren, 170
 - Interpolation, 66

- Interpolation nach
 - LAGRANGE, 74
 - NEWTON, 82
 - Polynomansatz, 71
 - Splinefunktion, 92
- Inverse Matrix, 11
- Lösung von
 - DGL 2. Ordnung, 134
 - DGL 3. Ordnung, 136
 - DGL mittels LAPLACE-Transformation, 148
 - DGL-System mittels LAPLACE-Transformation, 151
 - Gleichungssystem mittels Matrizen, 26
 - Gleichungssystemen mittels CRAMERScher Regel, 23
 - Gleichungssystemen mittels GAUSSschen Eliminationsverfahrens, 20
 - inhomogene DGL, 124
 - Laplace-Transformation, 142
 - LU-Zerlegung, 30
 - Multiplikation von Matrizen, 9
 - Predictor-Corrector-Verfahren, 178
 - Rechteckregel, 158
 - RUNGE-KUTTA-Verfahren, 175
 - SIMPSONsche Regel, 162
 - Transponierte Matrix, 5
 - Trennung der Variablen, 119
 - Vektorrechnung, 56
- Betrag
 - von Vektoren, 49
- Bilanzgleichung, 184, 193, 249
- Brunnenfunktion
 - THEIS, 206

- CAUCHY-Bedingung, 200
- CG-Verfahren, 42
- Charakteristengleichung, 131

- DARCY-Gesetz, 192

- Determinante, 13
- Determinate
 - Cramersche, 23
 - VANDERMONDSche, 70
- Differentiation
 - von Vektoren, 51
- Differenzen
 - dividierte, 78
- Digitale Signale, 315
- DIRAC-Impuls, 307
- DIRICHLET-Bedingung, 200
- Diskontinuierliche Signale, 314
- Diskrete Signale, 314
- Diskretisierung, 242
- Distributivgesetz, 10, 48
- Divergenz, 53
- DUHAMEL-Integral, 369
- Dupuit-Annahmen, 192
- Einheits-
 - Impuls, 307
 - Rampenfunktion, 308
 - Sprung, 308
- Elementarvolumen
 - Repräsentatives, 185
- EULER-Konstante, 206
- Exponentialausdrücke, 2
- Faltung-
 - Integral, 369
 - Operation, 369
- GALERKIN-Verfahren, 266
- GAUSS
 - Satz von, 53
- Gesetz
 - Assoziativ, 48
 - Distributiv, 48, 51
 - Kommutativ, 48, 50
- Gewichtsfunktion, 318
- Girinskij-Potential, 195
- Gleichgröße, 305
- Gleichung
 - Konvektions-Diffusions-, 185
 - Leitungs-, 185
- Gleichungssystem
 - überbestimmtes, 17
 - bestimmtes, 17
 - unbestimmtes, 17
- Gradient, 51
- GREENSche Formel, 268
- Grenzbedingungen, 199
- Grundgleichung
 - Dynamische, 184
- Grundsignale
 - Sprungfunktion
 - Dirac-Impuls, 305
- Grundwasserströmungsgleichung
 - Horizontalebene, 194
- Impuls
 - Dirac-Impuls, 305
- Informationsparameter, 304
- Integraltransformation
 - diskrete, 141
 - stetige, 140
- Interpolation
 - Splinefunktion
 - kubische, 87
- Kapillardruck-Sättigungsbeziehung, 189
- Kommutativgesetz, 10, 48
- Kontinuierliche Signale, 314
- Konvektions-Diffusions-Gleichung, 185
- Kräftegleichgewichtsgesetz, 192
- Kreisschaltung, 336
- LAPLACE-Operator, 51
- Leakagefaktor, 230
- Leitungsgleichung, 185
- Logarithmen Gesetze, 2
- Matrix
 - Addition, 8
 - Bandmatrix, 7
 - Determinante, 13
 - Division, 9
 - Einheitsmatrix, 6

- inverse, 9, 10
- Multiplikation, 8
- quadratische, 9
- Subtraktion, 8
- Symmetrische, 5
- transponierte, 4
- Methode
 - Ansatz-, 120
 - Substitution, 129
 - Trennung der Variablen, 117
 - Variation der Konstanten, 121
- Mischstelle, 311
- Modell
 - diskontinuierlich, 242
 - diskretes, 242
- Modellbildung
 - experimentelle, 294
 - theoretische, 294
- NABLA-Operator, 51
- NEUMANN-Bedingung, 200
- Operator
 - LAPLACE-, 51
 - NABLA-, 51
- Parallelschaltung, 336
- Partialbruchzerlegung, 149
- Produkt
 - Integration, 123
 - Skalar-, 49
 - Vektor-, 50
 - von Vektoren, 49
- Produktenregel, 123
- Prozessanalyse
 - experimentelle, 294, 302
 - theoretische, 294, 301
- Quantisierung, 242
 - Informationsparameter, 314
 - unabhängige Variable, 314
- Rückführungsschaltung, 336
- Rückkopplungsschaltung, 336
- Randbedingung
 - 1. Art, 221, 263
 - 2. Art, 221, 261
 - 3. Art, 225, 262
 - CAUCHY, 200
 - DIRICHLET, 200
 - gekoppelte Oberflächen-Grundwassermodelle, 201
 - NEUMANN, 200
- Reihenschaltung, 336
- Rotation, 54
- Schätzaufgabe, 102
- Signal, 304
- Signale, 314
- Signalträger, 304
- Sinusfunktion, 305
- Skalarprodukt, 49
- Speicherkoeffizient, 193
- Spiegelungsmethode, 221
- Splinefunktion
 - kubische, 87
- Sprungfunktion, 305
- Strömung
 - rotationssymmetrisch, 186
- Strömungsfeld
 - parallel
 - Grabenanströmung, 186
- Transmissibilität, 194
- Vektorprodukt, 50