

Methodische Ansätze zur geologischen 3D-Modellierung oberflächennaher Schichtenfolgen und ihre Auswirkung auf die numerische Grundwassermodellierung

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

Naturwissenschaftlichen Fakultät III
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von Herrn Tobias Hubert

geb. am 03.08.1977 in Halle (Saale)

Gutachter:

1. Prof. Dr. Peter Wycisk

2. Prof. Dr. Helmut Schaeben

Halle (Saale), verteidigt am 11.07.2011

“Modelle unterscheiden sich in irgendwelchen Merkmalen von ihren ‚Originalen‘ – sonst wären sie nicht deren Modelle, aber sie haben auch manches mit ihnen gemeinsam – sonst wären sie nicht deren Modelle.“

STEINBUCH, K. (1977, S. 10)

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen eines Stipendiums der Graduiertenförderung des Landes Sachsen-Anhalt unterstützt. Hierfür möchte ich mich an dieser Stelle bedanken.

Besonderer Dank gilt meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Peter Wycisk. Bei ihm möchte ich mich für die Initiierung und die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit und ganz besonders für das entgegengebrachte Vertrauen bedanken.

Ebenfalls ganz herzlich bedanken möchte ich mich bei Herrn Dr. habil. Wolfgang Gossel für die fachliche Unterstützung, die zahlreichen Diskussionen und konstruktive Kritik sowie die kritische Durchsicht meiner Arbeit.

Mein persönlicher Dank gilt ebenso den Herren Dipl.-Geol. Ronny Lähne, Dipl.-Geol. Holger Fabritius, Dipl.-Geol. Christian Neumann, Dr. Ahmed Sefelnasr, Dipl.-Geol. Andreas Wollmann, Dipl.-Geol. Mark Pohlert, Dipl.-Geol. Dirk Schlesier und Dr. Tilmann Steinmetz. Sie alle haben durch fruchtbare Diskussionen zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen und mich in meiner Motivation bestärkt.

Bedanken möchte ich mich ebenfalls bei den Herren Prof. Dr. Helmut Schaeben und Dr. Marcus Apel vom Institut Geoinformatik der TU Bergakademie Freiberg. Sie haben mir die Einbeziehung der Modelliersoftware GOCAD ermöglicht.

Für die Bereitstellung verschiedener Daten bedanke ich mich bei Herrn Dr. Ralf Ruske.

Ganz herzlich danke ich auch Frau Dr. Bettina Bayer für die Korrektur der Arbeit.

Mein ganz besonderer Dank geht an meine Lebensgefährtin Dana Küster. Sie hat mir stets den notwendigen Freiraum gegeben, mir unendlich viel Geduld entgegengebracht und mich bei der Korrektur der Arbeit unterstützt.

Abschließend möchte ich mich bei allen, die mich bei meinem Vorhaben unterstützt haben, herzlich bedanken. Insbesondere meine Familie und Freunde haben in unterschiedlicher Weise zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen und mir stets moralische Unterstützung gegeben.

Tobias Hubert,
Halle (Saale) im Januar 2011

Erklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt zu haben.

Alle Stellen, die dem Wortlaut oder Sinn nach anderen Arbeiten entnommen sind, wurden durch Angabe der Quellen als Zitate kenntlich gemacht.

Halle (Saale), 18. Januar 2011

Tobias Hubert

Kurzzusammenfassung

Die Erstellung und Verwendung von hochauflösenden geologischen 3D-Modellen des oberflächennahen Untergrundes findet zunehmend in den Bereichen der angewandten Geowissenschaften Einzug. Besonders in den weit gefassten Anwendungsgebieten der Hydro- und Umweltgeologie werden geologische 3D-Modelle heute oft in Vorbereitung auf die Modellierung von Grundwasserströmungs- und Transportprozessen erstellt.

Im Hinblick auf die modelltechnische Erfassung von oberflächennahen geologischen Lagerungsverhältnissen lassen sich die verfügbaren Konzepte in halbautomatische und weitestgehend automatisierte Verfahren untergliedern. Neben den implementierten Möglichkeiten zur räumlichen Repräsentation von Geo-Objekten und -körpern im 3D-Raum und der verfügbaren Datenbasis, beeinflusst der methodische Ansatz, welcher in den verschiedenen Modellierwerkzeugen für die modelltechnische Umsetzung zur Verfügung steht, die Ergebnisse einer geologischen 3D-Modellierung maßgeblich.

Unter Verwendung eines Einheitsdatensatzes aus einem komplex strukturierten Modellstandort werden die Ergebnisse und Auswirkungen, die in Verbindung mit der Anwendung verschiedener methodischer Ansätze zur geologischen 3D-Modellierung zu erwarten sind, vergleichend betrachtet und dargestellt. Hierzu wurden unter verschiedenen Modellierwerkzeugen mehrere geologische 3D-Modelle des wissenschaftlich gut erforschten Modellstandortes Bitterfeld-Süd erstellt und die Ergebnisse gegen ein als Referenz definiertes Modell verglichen. Der Schwerpunkt des Vergleiches lag dabei auf der Analyse von Effekten und Besonderheiten, die mit der Anwendung von unterschiedlichen methodischen Konzepten verbunden sind. Neben Schichtunterkanten, Mächtigkeitenverteilungen, Schichtkörperverbreitungen und Schichtkubaturen wird ebenfalls die strukturelle Heterogenität von Schichtkörpern betrachtet.

In einem weiteren Schritt wurden die Ergebnisse aus den verschiedenen geologischen 3D-Modellen in hydrogeologische Modelle überführt. Ein weiterer Vergleich dient dazu, die Auswirkungen der unter den verschiedenen methodischen Ansätzen erreichten Ergebnisse auf die hydrogeologische Modellierung aufzuzeigen. Neben hydraulischen Druckhöhen wird ebenfalls der Verlauf von Bahnlinien vergleichend betrachtet.

Die Resultate der geologischen Modellierung offenbaren, dass der verwendete methodische Ansatz, unter dem geologische Strukturen in einem Modellierwerkzeug erfasst werden, einen erheblichen Einfluss auf die Modellergebnisse haben kann. Obwohl alle Modelle nicht im Widerspruch zur verwendeten Datenbasis stehen, unterscheiden sich die Ergebnisse, die unter den verschiedenen betrachteten Konzepten zur modelltechnischen Umsetzung erreicht wurden, zum Teil deutlich.

Die Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung zeigen klar, dass bereits geringe strukturelle Unterschiede in einem veränderten Strömungsregime resultieren können. Während hydraulische Druckhöhen von derartigen Geometrieunterschieden eher lokal beeinflusst werden, reagiert der Verlauf von Bahnlinien deutlich sensibler auf strukturelle Abweichungen.

Abstract

The development and usage of high-resolution 3d models of the near subsurface is more and more common in the scopes of applied geosciences. Nowadays, 3d geological models are widely used in the fields of hydrogeology and environmental geology. They often provide the structural basis for modelling tasks related to groundwater flow and transport processes.

With reference to the geological modelling of the shallow subsurface the available concepts can be separated into two major groups: Semi-automated methods and methods which are nearly fully automated. Besides the integrated possibilities for representing geo-objects in 3d space and the available data for describing a geological situation, there are the methodical concepts, which are incorporated within the different modelling tools, that can affect the results of a 3d geological modelling process to a great extent.

Based on a uniform data set originated from a complex structured field site the results and effects related to the usage of different modelling concepts in 3d geological modelling are considered and described. Therefore, for the well investigated field site Bitterfeld-Süd several geological models have been developed using different modelling tools. The results were compared to a geological model which has been defined as a reference. The main objective of the comparison was to analyse the effects and impacts caused by the usage of different modelling concepts. The comparison involves the bottom surfaces of layers, thickness maps, the extension and the volume of layers as well as their structural heterogeneity.

Furthermore, the results of the different 3d geological models were used to design several hydrogeological models. A second comparison was made to examine the impacts of the structures coming from different 3d geological models on the outcomes of groundwater modelling. Besides the investigation of hydraulic heads the characteristics of pathlines were analysed as well.

The outcomes of the different geological modelling procedures demonstrate clearly that the methodical concept, which is used to capture geological structures within a modelling tool, can have a considerable impact on the modelling results. Although all of the geological models do not show any inconsistency with the input data the results which were achieved using different concepts of modelling differ considerably to some extent.

In addition the results of groundwater modelling identify the obvious relationships between small structural differences and changes within the field of flow. Whereas hydraulic heads are only locally affected by this kind of structural variation, pathlines are even more sensitive to minor structural changes.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|------|
| Danksagung | I |
| Erklärung | II |
| Kurzzusammenfassung | III |
| Abstract | IV |
| Inhaltsverzeichnis | V |
| Abbildungsverzeichnis | VII |
| Tabellenverzeichnis | XII |
| Abkürzungen | XIII |
| 1. Einleitung | 1 |
| 1.1 Problemstellung und Zielsetzung..... | 1 |
| 1.2 Methodische Umsetzung..... | 3 |
| 1.3 Strukturierung der Arbeit..... | 4 |
| 1.4 Hintergrund zum Modellstandort Bitterfeld-Süd..... | 5 |
| 2. Geologischer Rahmen | 7 |
| 2.1 Regionalgeologische Einordnung und Prätertiär..... | 7 |
| 2.2 Känozoikum..... | 8 |
| 2.2.1 Tertiär..... | 8 |
| 2.2.2 Quartär..... | 11 |
| 2.3 Modelltechnische Umsetzung und Hydrostratigraphie..... | 13 |
| 3. Geologische 3D-Modellierung – Modellierungskonzepte und Methoden | 17 |
| 3.1 Einführung..... | 17 |
| 3.1.1 Begriffliche Grundlagen..... | 17 |
| 3.1.2 Stand der Forschung..... | 18 |
| 3.2 Repräsentationsformen des geologischen Untergrundes..... | 22 |
| 3.2.1 Drahtmodelle..... | 22 |
| 3.2.2 Flächenmodelle..... | 23 |
| 3.2.3 Volumenmodelle..... | 25 |
| 3.2.4 Hybride Modelle..... | 30 |
| 3.3 Methodische Konzepte und Verfahren bei der geologischen 3D-Modellierung..... | 30 |
| 3.3.1 Halbautomatische Verfahren..... | 32 |
| 3.3.2 Automatisierte Verfahren..... | 33 |
| 3.4 Methodische Ansätze der betrachteten Modellierwerkzeuge im Detail..... | 36 |
| 3.4.1 Betrachtete Modellierwerkzeuge..... | 36 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 3.4.2 | Iterative, profilschnittgestützte Modellierung (flächenbasiert) – GSI3D, GMS | 40 |
| 3.4.3 | Iterative Modellierung über definierbare Kontrollelemente und -bedingungen (flächenbasiert) – GOCAD..... | 44 |
| 3.4.4 | Interpolative Modellierung (flächenbasiert) – MVS, GMS, RockWorks | 46 |
| 4. | Geologische 3D-Modellierung am Beispiel Bitterfeld-Süd | 51 |
| 4.1 | Datenbasis | 52 |
| 4.1.1 | Bohrungen | 52 |
| 4.1.2 | Digitales Geländemodell (DGM) | 53 |
| 4.1.3 | Thematische Karten..... | 54 |
| 4.1.4 | Digitale Orthophotos | 54 |
| 4.2 | GeoObject/GSI3D – Das Referenzmodell | 55 |
| 4.3 | MVS | 57 |
| 4.4 | RockWorks..... | 60 |
| 4.5 | GMS | 63 |
| 4.6 | GOCAD..... | 66 |
| 5. | Ergebnisse der geologischen 3D-Modellierung..... | 70 |
| 5.1 | Beeinflussende Faktoren | 70 |
| 5.2 | Ergebnisse unter dem konstruktiv-profilschnittgestützten Ansatz (GSI3D)..... | 74 |
| 5.3 | Ergebnisse der iterativen Modellierung über Kontrollelemente (GOCAD) | 82 |
| 5.4 | Ergebnisse unter dem interpolativen Ansatz (MVS, RockWorks, GMS)..... | 92 |
| 5.5 | Strukturelle Variabilität von Schichtkörpern | 105 |
| 6. | Hydrogeologische Modellierung | 113 |
| 6.1 | Eingangsdaten | 113 |
| 6.1.1 | Strukturen | 114 |
| 6.1.2 | Parameter..... | 115 |
| 6.1.3 | Rand- und Anfangsbedingungen | 116 |
| 6.2 | Modelltechnische Umsetzung – Strukturen und Parameter | 117 |
| 6.2.1 | Überführung der Schichtkörpergeometrien..... | 117 |
| 6.2.2 | Parametrisierung..... | 118 |
| 7. | Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung..... | 120 |
| 7.1 | Hydraulische Druckhöhen..... | 120 |
| 7.2 | Bahnlinien | 126 |
| 8. | Zusammenfassende Bemerkungen | 129 |
| 8.1 | Geologische 3D-Modellierung | 129 |
| 8.2 | Hydrogeologische Modellierung..... | 132 |
| 9. | Literatur | 134 |

Abbildungsverzeichnis

| | |
|---|----|
| Abb. 1.1: Schematische Übersicht zur methodischen Umsetzung..... | 4 |
| Abb. 1.2: Die Lage des Modellraumes Bitterfeld-Süd innerhalb Sachsen-Anhalts und der näheren Umgebung (Quelle der Satellitenaufnahmen: TravelTainment AG Aachen, 2001). | 6 |
| Abb. 2.1: Strukturbau der Halle-Wittenberger Scholle (nach MARTIKLOS et al., 2001; BEUTLER, 2001; RAPPSILBER, 2003; EHLING, 2008; Quelle: FRANKE, 2009). | 7 |
| Abb. 3.1: Ein Beispiel für die Mehrdeutigkeit eines einfachen Drahtmodells, welches ausschließlich über die Verbindungen von Knotenpunkten definiert ist. Dieses Modell lässt die Interpretation von mehreren Volumenkörpern zu (verändert nach MALLET, 2002). | 22 |
| Abb. 3.2: Flexibilität eines TINs im Vergleich zu einem regelmäßigen Raster. A zeigt einen Ausschnitt eines an die Bohrlokalitäten (rot) und die oberflächige Verbreitung geologischer Einheiten angepassten TINs. Unter B ist die Situation dargestellt, wie sie sich unter Verwendung eines regelmäßigen Grids bzw. Rasters ergibt. ... | 23 |
| Abb. 3.3: Geometrische Modellierung einer Faltenstruktur unter Verwendung von NURBS. (a) Datengrundlage (Kontrollelemente); (b) zusätzliche Profil- bzw. Kurvensegmente (Kontrollelemente); (c) NURBS-Fläche; (d) Volumenmodell, erstellt aus NURBS-Flächen (aus ZHONG et al., 2007). | 24 |
| Abb. 3.4: Klassifizierung der verschiedenen Grid-Typen (verändert nach CAUMON et al., 2005). | 25 |
| Abb. 3.5: <i>Octree</i> -Modell und irreguläre Zellzerlegung. Mit Enumerationsverfahren können Geokörper nur annähernd korrekt abgebildet werden (A & B). Die irreguläre Zellzerlegung ermöglicht dagegen eine genauere Approximation von Volumenkörpern (C & D). A - beispielhafte Schnittdarstellung auf Basis eines <i>Octree</i> -Modells; B - <i>Octree</i> -Modell von steil einfallenden Störungselementen; C - beispielhafte Schnittdarstellung auf Basis der irregulären Zellzerlegung; D - Volumenmodell, aufgebaut aus irregulären Elementarzellen. Quelle der Teilabbildungen: GABLE, C., Los Alamos National Laboratory (LANL). | 26 |
| Abb. 3.6: Das Prinzip des <i>Octree</i> -Verfahrens schematisch dargestellt. Die Untergliederung des 3D-Gitters erfolgt auf einer hierarchischen Ebene rekursiv und kann den Erfordernissen der abzubildenden Situation angepasst werden. | 27 |
| Abb. 3.7: Beispiele für 3D-Gitter mit unterschiedlichen Basisgeometrien (A - TIN, unstrukturiert; B - regelmäßiges Raster; C - polygonales, unstrukturiertes Grid), die jeweils an die Gestalt der abzubildenden Schicht- bzw. Volumenkörper angepasst wurden. C wurde nach MALLET (2002) und ROYER (2004) modifiziert..... | 28 |
| Abb. 3.8: Das Prinzip der <i>Sweep</i> -Repräsentation am Beispiel eines Tunnels. Die Tunnelgeometrie lässt sich zum Beispiel durch Trajektion einer Kreisfläche entlang einer dreidimensionalen Kurve erstellen..... | 29 |
| Abb. 3.9: Verfahren und methodische Ansätze bei der geologischen 3D-Modellierung. | 32 |
| Abb. 3.10: Schematische Darstellung einer geologischen 3D-Modellierung über die Konstruktion vernetzter Profilschnitte. Nach der Definition eines Profilschnittnetzes (A) wird zwischen einzelnen Bohrungen („harte“ Daten) der mögliche Verlauf der Schichtgrenzen digitalisiert („weiche“ Daten) und mit Attributen versehen (B und C). Es erfolgt somit ein iterativer Aufbau eines konsistenten und mit geologischem Hintergrundwissen belegten Profilschnittnetzes (D), welches zur Erstellung geologischer Schichtflächen dient (E). Unter Berücksichtigung einer regionalen Modellhierarchie werden über die vertikale Vernetzung der Schichtflächen schließlich die Volumenkörper des geologischen 3D-Modells generiert (F)..... | 41 |
| Abb. 3.11: Identischer Ausschnitt einer geologischen Schichtfläche, erstellt auf der Basis von virtuellen Profilschnitten. Die Lage der zugehörigen Profilschnitte ist in rot dargestellt. A - direkte Triangulation zwischen den Datenpunkten der Profilschnitte; B - Interpolation auf eine Fläche mit vorgegebener Basisgeometrie. Deutlich sind die Auswirkungen der verschiedenen Verfahren, die zur Flächenerstellung angewendet wurden, erkennbar..... | 42 |
| Abb. 3.12: Die Auswirkung ausgewählter <i>Constraints</i> auf die Interpolation von geologischen Flächen. A zeigt die Wirkung richtungsabhängiger <i>Constraints</i> auf das Interpolationsergebnis (verändert nach MALLET, 2002). In B wurde die untere Fläche mit Hilfe eines Mächtigkeits- <i>Constraints</i> in Relation zur oberen Fläche interpoliert (verändert nach GALERA et al., 2003). C zeigt ein Beispiel einer Flächeninterpolation auf der Grundlage vertikal | |

| | |
|--|----|
| orientierter Kontrollelemente, welche iterativ aus Bohrdaten und einem Verbreitungspolygon gewonnen wurden..... | 45 |
| Abb. 3.13: Vereinfachte Darstellung des Prozessablaufes einer interpolativen geologischen 3D-Modellierung. Auf Grundlage der Eingangsdaten (A) sowie einer definierten Basisfläche (B) werden zunächst unter Verwendung von Interpolationsverfahren die einzelnen Schichtgrenzen erstellt (C). Nach der Anpassung an eine regionale Modellhierarchie (D) wird dann auf Basis der Grenzflächen ein Volumenmodell generiert (E)..... | 48 |
| Abb. 3.14: A - schematische Schnittdarstellung einer Kippenstruktur. In B sind die Ergebnisse der Modellierung dieser Struktur dargestellt. Die Punkte repräsentieren die Stützpunkte der interpolierten Grenzflächen, welche hier einen äquidistanten horizontalen Abstand besitzen. Die gestrichelten Linien zeigen den potentiellen Verlauf der interpolierten Schichtgrenzen vor ihrer Anpassung entsprechend der Modellhierarchie. Die durchgängigen Linien sind bereits gemäß der Modellhierarchie korrigiert. Die Verschleppung resultiert aus der Anpassung ihrer Z-Werte an hierarchisch höher eingestufte Flächen. C zeigt ein Beispiel aus einem realen Modell..... | 49 |
| Abb. 3.15: Schematische Darstellung des Verlaufes von geologischen Grenzflächen in der Umgebung von Erosionsstrukturen. Unter A ist der Flächenverlauf dargestellt, wie er realen Verhältnissen nahe kommt. B zeigt die Ergebnisse einer Modellierung, wenn neben einer regionalen Modellhierarchie die Bedingung gilt, dass alle Schichtglieder in sämtlichen Modell-Bohrungen repräsentiert sein müssen (verändert nach HUBERT, 2005)... | 50 |
| Abb. 4.1: 3D-Darstellung der besonders komplexen und räumlich stark variierenden Schichtglieder des Modellgebietes Bitterfeld-Süd. 15fach überhöht, unvollständige Schichtenfolge. Die Abbildung wurde auf Basis des Referenzmodells (FABRITIUS, 2002) erstellt..... | 51 |
| Abb. 4.2: Das Modellgebiet befindet sich im SE des Bundeslandes Sachsen-Anhalt und umfasst eine Fläche von etwa 16 km ² . Für die vergleichende geologische 3D-Modellierung wurden einheitlich 114 stratifizierte Bohrungen verwendet..... | 53 |
| Abb. 4.3: Das Profilschnittnetz, wie es zur Erstellung des Referenzmodells zur Anwendung kam. Die Bohrlokalitäten sind als schwarze Punkte dargestellt. In rot: N-S verlaufende Profilschnitte; blau: E-W orientierte Schnitte; gelb bzw. grün: NE-SW bzw. NW-SE orientierte Profilschnitte. Die Detailschnitte im zentralen Bereich des Modellgebietes sind in grau gehalten..... | 56 |
| Abb. 4.4: Das Referenzmodell Bitterfeld-Süd, 15fach überhöht. Zum Zweck eines besseren Einblicks wurde ein Teil des Modells ausgeblendet. Deutlich sind die tief in die unterlagernde Schichtenfolge eingreifenden Bergbaukippen sowie die heterogene Situation im Zentrum des Modellgebietes zu erkennen. (Legende: siehe Anhang 3) | 57 |
| Abb. 4.5: Die Anpassung von Bohrungen und Modellhierarchie an die Bedingung, dass alle Schichtglieder über das gesamte Modellgebiet verbreitet sind. Das Auftreten von Linsenstrukturen resultiert in einer Zweiteilung der betroffenen Schichtglieder (M: Mächtigkeit)..... | 58 |
| Abb. 4.6: Die beiden unter MVS erstellten geologischen 3D-Modelle. Das unter A dargestellte Modell wurde allein auf der Grundlage von Bohrinformationen erstellt. In das unter B abgebildete Modell sind neben Bohrdaten auch Informationen aus dem digitalen Geländemodell eingeflossen. Diese wurden unter Berücksichtigung der Modellhierarchie sowie unter Verwendung von Verbreitungspolygonen schichtweise selektiert und den entsprechenden Daten zur Modellerstellung angehängt. In beiden Modellen wurde zum Zweck eines besseren Einblicks der südwestliche Teil ausgeblendet. Deutlich ist zu erkennen, dass die Modellierung allein auf der Basis von Bohrdaten zu keinen befriedigenden Ergebnissen führte. Dagegen spiegelt die geologische Situation des unteren Modells annähernd die Verhältnisse des Referenzmodells wider. Beide Darstellungen sind 15fach überhöht. Die über das gesamte Modellgebiet verbreiteten Schichtkörper sind ab einer Mächtigkeit von 0,1 m dargestellt. (Legende: siehe Anhang 3) | 60 |
| Abb. 4.7: Die Parameter, welche unter RockWorks in Vorbereitung einer Varianzanalyse definiert werden können. Auf Basis dieser Parameter werden die Datenpaare für die Varianzanalyse zusammengestellt. Anschließend wird das zuvor gewählte Variogrammmodell automatisch und programmintern an das experimentelle Variogramm angepasst..... | 61 |
| Abb. 4.8: Schematische Darstellung der Wirkungsweise des <i>High-Stop/Low-Pass</i> Filters: Durchdringen sich zwei Schichtflächen, wird die sekundäre Fläche zugunsten der primären Fläche angepasst..... | 62 |

- Abb. 4.9:** Das unter RockWorks erstellte Modell zeigt besonders im Zentrum, das durch komplexe geologische Verhältnisse geprägt ist, die von der Interpolation verursachten Artefakte. Die beschränkten Möglichkeiten zur Steuerung der Kriging-Interpolation führen besonders bei hoher räumlicher Variabilität zu *Over-* und *Undershoots*. Der SW-Teil des Modells wurde ausgeblendet. Darstellung 15fach überhöht. Die über das gesamte Modellgebiet verbreiteten Schichtkörper sind ab einer Mächtigkeit von 0,1 m dargestellt. (Legende: siehe Anhang 3)..... 63
- Abb. 4.10:** Ein Ausschnitt des Modellgebietes Bitterfeld-Süd in der Aufsicht. Unter GMS wurde die Information zur oberflächigen Verbreitung von Schichtkörpern (A) genutzt, um eine initiale Zielfläche für die Interpolation zu erstellen, die in ihrer Geometrie sowohl an die Lage der Bohrungen als auch an die Ausbisslinien der Schichtglieder angepasst ist (B). 64
- Abb. 4.11:** Zwei Variogramme aus dem Modellgebiet Bitterfeld-Süd. A zeigt das experimentelle Variogramm (mit Punkten besetzte Linie) sowie das Variogrammmodell (rote Linie) der Unterkante des Sandlösses. Die erste Abflachung der Kurve wird durch die Daten aus dem DGM verursacht, während der zweite Schwellenwert die Analyse der Bohrdaten repräsentiert. Unter B ist das Variogramm des Bitterfelder Flözkomplexes dargestellt. Diese Modellschicht wurde nicht mit Daten aus dem DGM erweitert. Das experimentelle Variogramm zeigt einen allmählichen Anstieg der Varianz. 66
- Abb. 4.12:** Das unter GMS entwickelte geologische 3D-Modell des Raumes Bitterfeld-Süd. Im Vergleich zu dem unter RockWorks erstellten Modell sind *Over-* und *Undershoots* hier deutlich weniger stark ausgeprägt. Der südwestliche Teil des Modells wurde zwecks eines besseren Einblicks ausgeblendet. Darstellung 15fach überhöht. Die über das gesamte Modellgebiet verbreiteten Schichtkörper sind ab einer Mächtigkeit von 0,1 m dargestellt. (Legende: siehe Anhang 3) 66
- Abb. 4.13:** Zwei unter GOCAD erstellte und mit verschiedenen *Constraints* belegte Schichtflächen des Modells Bitterfeld-Süd. Ihre Modellierung erfolgte iterativ, wobei zwischen den einzelnen Interpolationsschritten Art und Umfang der *Constraints* variiert wurden. In A ist die Unterkante der Auffülle dargestellt. B zeigt die Schichtunterkante der weichselzeitlichen Rinne, die das Modellgebiet in NNW-SSE-Richtung quert. Beide Flächen sind mit unterschiedlichem Maßstab dargestellt..... 68
- Abb. 4.14:** Das unter GOCAD erstellte Modell wurde auf der Basis von TINs generiert, die ausschließlich Bereiche mit realer Schichtverbreitung repräsentieren. Anders als unter MVS, RockWorks und GMS sind die entsprechenden Schichtunterkanten nicht über das gesamte Modellgebiet verbreitet. Der südwestliche Teil des Modells wurde ausgeblendet. Darstellung 15fach überhöht. (Legende: siehe Anhang 3) 69
- Abb. 5.1:** Die wesentlichen Faktoren, welche die Ergebnisse einer geologischen Modellierung beeinflussen können, stehen oft miteinander in Beziehung oder bedingen sich sogar gegenseitig. Bezüglich der Umsetzung einer Modellierung in einem Modellierwerkzeug lassen sich interne und externe Faktoren definieren. 70
- Abb. 5.2:** Partielle Explosionsdarstellung des Modellraumes Bitterfeld-Süd. Die grauen Pfeile bezeichnen jene Strukturen, die im Folgenden vergleichend betrachtet werden. Die Abbildung wurde auf Basis des Referenzmodells (FABRITIUS, 2002) erstellt. Darstellung 15fach überhöht. 73
- Abb. 5.3:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der Kippenkörper aus dem Referenzmodell. In beiden Darstellungen ist der im E des Modellgebietes gelegene, rekonstruierte Straßenpfeiler deutlich zu erkennen. Er ist nur in zwei Bohrungen belegt. Im W werden die Kippenkörper ebenfalls durch Straßenpfeiler separiert, welche hier jedoch bis zur Oberfläche reichen. Sie werden von der anstehenden, nicht anthropogen beeinflussten Schichtenfolge aufgebaut. SP – Straßenpfeiler. 77
- Abb. 5.4:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Periglazialhorizontes 1 aus dem Referenzmodell. Der Schichtkörper ist lückenhaft und mit deutlich variierenden Mächtigkeiten überwiegend im nördlichen Abschnitt des Modellgebietes verbreitet. 78
- Abb. 5.5:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluviatilen Rinne aus dem Referenzmodell. Die Rinnenstruktur verläuft ausgehend vom NW des Modellgebietes in Richtung SSW und wird südlich des zentralen Modellbereiches von den Kippenkörpern begrenzt..... 79

- Abb. 5.6:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Flözkomplexes Bitterfeld aus dem Referenzmodell. Die hohe räumliche Variabilität ergibt sich durch die ausgekohlten Bereiche, die eingeschnittene weichselzeitliche Rinne sowie Zonen, in denen die Kohle in ihrer ursprünglichen Mächtigkeit erhalten ist. SP – Straßenpfeiler; RB – Rinnenbasis. 80
- Abb. 5.7:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Oberen Bitterfelder Glimmersandes aus dem Referenzmodell. Deutlich ist in der Mächtigkeitssdarstellung die Erosionsbasis der weichselzeitlichen Rinne zu erkennen. Die Verbreitung der Rinnenstruktur wird durch die dunkelblaue, gestrichelte Linie markiert. RB – Rinnenbasis. 81
- Abb. 5.8:** Schematische Darstellung der Selektion von Stützpunkten unter Verwendung von Verbreitungspolygonen und definierten Pufferbereichen (Darstellung nicht maßstabsgetreu). 82
- Abb. 5.9:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der Kippenkörper aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Der im E gelegene Straßenpfeiler der ehemaligen Braunkohlenbahn kommt nur in Form einer Aufwölbung der Schichtunterkante zum Ausdruck. Die Flankenwinkel der Kippenstrukturen konnten modelltechnisch nur in generalisierter Form erfasst werden. SP – Straßenpfeiler. 87
- Abb. 5.10:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Periglazialhorizontes 1 aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Die Gestalt des Schichtkörpers wird neben der Datenbasis entscheidend vom Interpolationsverfahren sowie der Geometrie der überlagernden Schichtenfolge beeinflusst. 88
- Abb. 5.11:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluviatilen Rinne aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Mit dem implementierten modelltechnischen Ansatz konnte die Rinnenstruktur gut als solche modelliert werden..... 89
- Abb. 5.12:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Flözkomplexes Bitterfeld aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Die Straßenpfeiler im E und W des Modellgebietes sind weniger deutlich ausgeprägt. Dagegen ist die in den Flözkomplex eingeschnittene Rinnenstruktur im zentralen Bereich deutlich zu erkennen. SP – Straßenpfeiler; RB – Rinnenbasis. 90
- Abb. 5.13:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Oberen Bitterfelder Glimmersandes aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Deutlich ist in der Mächtigkeitssdarstellung die Erosionsbasis der weichselzeitlichen Rinne sowie der Mächtigkeitssprung entlang einer gedachten, SW-NE verlaufenden Linie zu erkennen. Die Verbreitung der Rinnenstruktur wird durch die dunkelblaue, gestrichelte Linie markiert. RB – Rinnenbasis. 91
- Abb. 5.14:** Das Phänomen der Schichtverschleppung, wie es stellenweise bei den unter MVS, RockWorks und GMS erstellten Schichtkörpern auftritt. Die Abbildung wurde auf Basis des unter GMS generierten Modells erstellt. Im W des Modellgebietes ist der Periglazialhorizont entlang des Bitterfelder Decktonkomplexes nach oben geschleppt. Der Raum zwischen Deckton und Periglazialhorizont wird durch weitere Schichtglieder eingenommen, die in ihrer Gestalt ebenfalls durch Verschleppung beeinflusst worden sind. Darstellung 15fach überhöht..... 94
- Abb. 5.15:** Die Berücksichtigung von Trends kann im Zuge der Interpolation in solitären Schichtelementen resultieren. Die Abbildung stellt das Problem schematisch dar: In Bohrung A sind alle Schichten und damit ihre Unterkanten (a, b und c) real vorhanden. In den Bohrungen B bis D fallen die Schichtflächen a und b zusammen, der entsprechende Schichtkörper ist hier nicht verbreitet. Die Berücksichtigung von Trends während der Interpolation kann zu einem welligen Erscheinungsbild der modellierten Schichtunterkante führen. Während die Flächenüberschneidung zwischen den Bohrungen B und C (gestrichelte Linie) durch die Anpassung an die Modellhierarchie korrigiert wird, ist der resultierende Schichtkörper zwischen den Bohrungen C und D verbreitet (roter Pfeil). Dabei ist sein Auftreten weder in Bohrung C noch in Bohrung D belegt. 96
- Abb. 5.16:** Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der Kippenkörper aus dem unter GMS entwickelten Modell. Der im E gelegene Straßenpfeiler der ehemaligen Braunkohlenbahn kommt nur in Form einer Aufwölbung der Schichtunterkante zum Ausdruck. Die

| | |
|--|-----|
| Flankenwinkel der Kippenstrukturen konnten modelltechnisch nur in generalisierter Form erfasst werden. SP – Straßenpfeiler. | 99 |
| Abb. 5.17: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Periglazialhorizontes 1 aus dem unter GMS entwickelten Modell. Im westlichen Teil der Schichtverbreitung wurde die Schichtunterkante entlang des Decktonkomplexes nach oben verschleppt – ein Resultat der modelltechnischen Umsetzung über Schichtflächen, die über das gesamte Modellgebiet verbreitet sind..... | 100 |
| Abb. 5.18: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluviatilen Rinne aus dem unter MVS entwickelten Modell. Mit dem implementierten modelltechnischen Ansatz konnte die Rinnenstruktur nur unzureichend abgebildet werden. Die Berücksichtigung von Anisotropien war unter MVS nicht sinnvoll anwendbar. | 101 |
| Abb. 5.19: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluviatilen Rinne aus dem unter RockWorks entwickelten Modell. Die Berücksichtigung von Richtungsabhängigkeiten resultierte unter anderem in inselförmigen, solitären Schichtelementen..... | 102 |
| Abb. 5.20: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Flözkomplexes Bitterfeld aus dem unter GMS entwickelten Modell. Sowohl die Straßenpfeiler im E und W als auch die Erosionsbasis der eingeschnittenen Rinne im zentralen Bereich des Modellgebietes sind nur unzureichend repräsentiert. SP – Straßenpfeiler; RB – Rinnenbasis. | 103 |
| Abb. 5.21: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Oberen Bitterfelder Glimmersandes aus dem unter MVS entwickelten Modell. Die Erosionsbasis der weichselzeitlichen Rinne ist nur ungenügend repräsentiert. Die Verbreitung der zugehörigen Rinnenstruktur wird durch die dunkelblaue, gestrichelte Linie markiert. RB – Rinnenbasis. | 104 |
| Abb. 5.22: Ungeachtet der modelltechnischen Darstellbarkeit sowie der Maßstabsabhängigkeit der aufgeführten Strukturen, kann ihre strukturelle Variabilität nicht oder nur eingeschränkt mittels einer Varianzanalyse über die Mächtigkeitsverteilung erfasst werden. Auch die zuvor getätigten Aussagen bezüglich der Beziehungen zwischen struktureller Heterogenität und (Gesamt-) Varianz, Semi-Varianz und Korrelationslänge sind auf diese Strukturen nur bedingt anwendbar. | 106 |
| Abb. 5.23: Beispielhafte Darstellung zweier omni-direktionaler Variogramme mit experimentellem (Semi-) Variogramm, angepasster sphärischer Variogrammfunktion mit zugehörigem Sill und entsprechender Korrelationslänge sowie der Varianz des Gesamtdatensatzes. | 108 |
| Abb. 5.24: Darstellung der aus der Varianzanalyse ermittelten Werte für Korrelationslänge und Sill bezogen auf die Mächtigkeitsverteilung der betrachteten Schichtkörper..... | 108 |
| Abb. 5.25: Vergleichende Darstellung der omni-direktionalen Variogramme der unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper aus den verschiedenen geologischen 3D-Modellen..... | 111 |
| Abb. 5.26: Vergleichende Darstellung der gerichteten Variogramme der unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper der fluviatilen Rinne und des Oberen Bitterfelder Glimmersandes..... | 112 |
| Abb. 6.1: Schematische Darstellung zur Erstellung, Anpassung und Parametrisierung des 3D-Gitters für die hydrogeologische Modellierung. Sowohl die Dimensionierung des Gitters als auch die Geometrie der hydrogeologischen Einheiten und ihre Parametrisierung basieren auf den Strukturen der geologischen 3D-Modelle. | 117 |
| Abb. 6.2: Die Einführung von Mindestmächtigkeiten kann unter Umständen dazu führen, dass ebenfalls Schichtgrenzen angepasst werden müssen, die vor einer entsprechenden Korrektur der überlagernden Schichtenfolge die Bedingung der Mindestmächtigkeit bereits erfüllten (rote Pfeile)..... | 118 |
| Abb. 6.3: Das gemäß der Verbreitung geologischer Einheiten parametrisierte MODFLOW-Grid, 15fach überhöht. Die Farbgebung entspricht jener der geologischen Schichtkörper, denen hydrogeologische Eigenschaften zugeordnet sind. In der Vergrößerung ist eine Abfolge von hydrogeologischen Einheiten mit Mindestmächtigkeit zu erkennen, welche entsprechend der Verbreitung von geologischen Einheiten parametrisiert ist. | 119 |

| | |
|---|-----|
| Abb. 7.1: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und GOCAD erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Glso – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil. | 122 |
| Abb. 7.2: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und MVS erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Glso – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil. | 123 |
| Abb. 7.3: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und RockWorks erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Glso – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil. | 124 |
| Abb. 7.4: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und GMS erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Glso – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil. | 125 |
| Abb. 7.5: Bahnlinien der verschiedenen hydrogeologischen Modelle, welche auf den unter GeoObject/GSI3D (Referenz), GOCAD, MVS, RockWorks und GMS erstellten geologischen Strukturmodellen basieren. Zur Orientierung sind die bereits in den Abbildungen 7.1 bis 7.4 dargestellten Schnittebenen mit geologischer Situation und Isohypsen bei 70 mNN unterlagert. Die Pfeile markieren ausgewählte, äquivalente Bahnlinien, deren Verlauf durch besonders große Abweichungen zum Referenzmodell charakterisiert ist. | 128 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|--|-----|
| Tab. 2.1: Stratigraphisches Normalprofil des Modellraumes Bitterfeld-Süd und modelltechnische Umsetzung.... | 16 |
| Tab. 5.1: Quantifizierung der relativen strukturellen Heterogenität der unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper aus den verschiedenen geologischen 3D-Modellen..... | 109 |

Abkürzungen

| | |
|-------------|---|
| Abb. | Abbildung |
| ATKIS | Amtliches Topographisch-Kartographisches Informationssystem |
| bzw. | beziehungsweise |
| ca. | circa |
| DGM | Digitales Geländemodell |
| E | Osten |
| etc. | et cetera |
| ggf. | gegebenenfalls |
| GIS | Geographisches Informationssystem |
| Kap. | Kapitel |
| k_f -Wert | Durchlässigkeitsbeiwert |
| k_{f-h} | Durchlässigkeitsbeiwert in horizontaler Richtung |
| k_{f-v} | Durchlässigkeitsbeiwert in vertikaler Richtung |
| N | Norden |
| rel. | relativ |
| S | Süden |
| S. | Seite |
| S_y | Specific yield (Speicherkoeffizient bzw. nutzbare Porosität bei ungespannten Verhältnissen) |
| S_s | Specific storage (Spezifische Speicherkoeffizient) |
| Tab. | Tabelle |
| TIN | Triangular Irregular Network |
| USGS | United States Geological Survey |
| u.s.w. | und so weiter |
| vgl. | vergleiche |
| Vorb. | Vorbereitung |
| W | Westen |
| z. B. | zum Beispiel |
| z. T. | zum Teil |
| 2,5D | zweieinhalbdimensional |
| 3D | dreidimensional |

1. Einleitung

Das enorme Potential, welches in der digitalen Verwaltung, Verarbeitung und Darstellung von Informationen mit Raumbezug begründet liegt, wird besonders im Zusammenhang mit der Erstellung und der Verwendung dreidimensionaler geologischer Strukturmodelle deutlich. Geologische 3D-Modelle bilden die Grundlage für die Behandlung umfassender und weiterführender Problem- und Fragestellungen. Ihre Einbindung in Bewertungsszenarien, denen eine Modellierung raumzeitlicher Prozesse zugrunde liegt, gewinnt zunehmend an Bedeutung. Hierzu zählen beispielsweise die Erfassung von Schadstofffahnen im Grundwasser oder die Abschätzung von Georisiken, wie sie unter anderem von Erdrutschen, Erdbeben, Lösungsprozessen im Untergrund oder künstlich angelegten Hohlräumen ausgehen (CULSHAW, 2003).

Insbesondere hochauflösende geologische 3D-Modelle des oberflächennahen Untergrundes kommen heute immer öfter auf den Gebieten der angewandten Geowissenschaften für die Aufklärung und Charakterisierung der geologischen (Struktur-) Verhältnisse zur Anwendung. Sie werden unter anderem für die Behandlung von komplexen Problemstellungen in den angewandten Bereichen der Hydrogeologie, Umweltgeologie und Ingenieurgeologie eingesetzt. Dabei hängen die Anforderungen an die zu erstellenden Modelle hinsichtlich Skalierung und Detailgenauigkeit sehr stark von der geologischen Situation und dem geplanten Einsatz in weiterführenden Anwendungen ab. So dienen geologische 3D-Modelle zum Beispiel in der Umwelt- und Hydrogeologie als konzeptionelle Grundlage für die Erstellung von Grundwasserströmungs- und Schadstofftransportmodellen. Oft müssen hierzu komplexe und detaillierte 3D-Modelle erstellt werden, um die räumliche Variabilität und Heterogenität von Grundwasserleitern und -geringleitern adäquat abbilden zu können. Dies gilt im Besonderen für Modellräume mit quartären und tertiären Schichtenfolgen, da diese häufig durch das Auftreten kleinräumiger und dennoch hydraulisch wirksamer Strukturen (Rinnen- und Linsenstrukturen, glaziale und glazigen überprägte Sedimente, anthropogen verursachte Veränderungen) geprägt sind.

1.1 Problemstellung und Zielsetzung

Digitale geologische 3D-Modelle werden heute zunehmend in den angewandten Bereichen der Geowissenschaften eingesetzt (WYCISK et al., 2005a). Dabei sind in der jüngeren Vergangenheit Entwicklungen und Anpassungen einzelner Softwarelösungen zu verzeichnen, die das Ziel verfolgen, den Problemstellungen und Anforderungen auf den Gebieten der Hydrogeologie, Umweltgeologie, Umweltchemie und Landschaftsökologie Rechnung zu tragen. So berichtet TURNER (2006) über einen Trend, dass ursprünglich für die Rohstoffindustrie entwickelte Modellierwerkzeuge zunehmend auch wertvolle Methoden und Mittel für die Behandlung von Fragestellungen der angewandten Geowissenschaften bereitstellen.

Wie jedoch RUSSEL et al. (2005) herausstellen, hat sich zwar auf den Anwendungsgebieten der Rohstoffindustrie bezüglich der geologischen 3D-Modellierung ein umfangreiches Wissen etabliert, jedoch fehlen im Zusammenhang mit der Modellierung oberflächennaher, quartärer Schichtenfolgen und vergleichbarer Ablagerungen umfassende Kenntnisse und Erfahrungen.

Die zunehmende Verbreitung und Anwendung von digitalen Modellierwerkzeugen zur Erstellung von oberflächennahen, dreidimensionalen geologischen Strukturmodellen muss deshalb auch unter einem kritischen Gesichtspunkt betrachtet werden. In diesem Zusammenhang beschreiben sowohl TURNER (2003a) als auch EVANS (2003) die Entwicklung von verschiedenen methodischen Ansätzen und Datengrundlagen und stellen diesbezüglich eine fehlende Standardisierung als problematisch heraus.

Die Erstellung digitaler geologischer 3D-Strukturmodelle ist in Abhängigkeit ihres Verwendungszwecks und der zu modellierenden geologischen Situation oft komplex und nur mit hochentwickelter Spezialsoftware konsistent und effektiv durchführbar. So erfordert nach THOMSEN et al. (2005) die geowissenschaftliche 3D-Modellierung in Abhängigkeit der Aufgabenstellung den Einsatz besonderer, problemspezifischer Verfahren und oftmals sehr komplexer Modellierwerkzeuge.

Im Zusammenhang mit der ausgesprochenen Spezialisierung der verschiedenen Softwarelösungen und der damit einhergehenden Entwicklung unterschiedlicher methodischer und modelltechnischer Ansätze beschreiben bereits WEBB & DAVIS (1998) die Problematik, in Abhängigkeit einer formulierten Zielstellung ein geeignetes Modellierungskonzept bzw. Modellierwerkzeug auszuwählen. Zudem stellen sie ebenfalls die Schwierigkeiten heraus, welche mit der Übertragung der natürlichen heterogenen Verhältnisse in die Modellebene verbunden sind.

Weiter bilden geologische Strukturmodelle eine der Hauptinformationsquellen für die hydrogeologische Modellierung. Die modelltechnisch erfassten 3D-Strukturen werden für die Erstellung des hydrogeologischen Modellgitters verwendet und bestimmen so dessen Geometrie maßgeblich. In Abhängigkeit der den Strukturen zugeordneten hydraulischen Eigenschaften können sie das im Zuge der hydrogeologischen Modellierung errechnete Strömungsregime entscheidend beeinflussen. Oftmals wird jedoch diese wichtige Informationsquelle nicht kritisch hinterfragt und die im geologischen 3D-Modell erfassten Strukturen als gegeben und fix hingenommen. Dies kann im Zusammenhang mit der hydrogeologischen Modellierung unter Umständen zu falschen Ergebnissen und Fehlinterpretationen führen.

Zielsetzung der Arbeit

Entsprechend den aufgeführten Problemfeldern setzt sich die vorliegende Arbeit mit den folgenden beiden thematischen Fragestellungen auseinander:

1. Welche Auswirkungen haben die Anwendung verschiedener methodischer Ansätze sowie die Art und Weise der modelltechnischen Umsetzung in Bezug auf die geologische 3D-Modellierung komplexer, oberflächennaher Lagerungsverhältnisse?
2. Wie wirken sich die unterschiedlichen Ergebnisse der geologischen 3D-Modellierung, welche unter verschiedenen methodischen Konzepten erreicht werden können, auf die Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung aus?

Dabei ist die vorliegende Arbeit methodisch orientiert und kann generell als Prinzipstudie betrachtet werden. Sowohl die Erstellung von geologischen 3D-Modellen unter Verwendung verschiedener methodischer Ansätze als auch die Aussagen und Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung sollen helfen, die geschilderten Probleme, die in Verbindung mit der Generierung und der weiterführenden Verwendung von dreidimensionalen Untergrundmodellen auftreten, zu erkennen und zu vermindern. In diesem Zusammenhang soll die Arbeit die Möglichkeiten zur konzeptionellen, modelltechnischen Erfassung komplex strukturierter Modellräume sowie die Vor- und Nachteile von methodischen Ansätzen aufzeigen und die Auswahl geeigneter Modellierungskonzepte erleichtern.

Die Motivation für einen Vergleich von methodischen Ansätzen und Verfahren zur geologischen 3D-Modellierung liegt dabei auch in Erfahrungen begründet, die über mehrere Jahre hinweg in der Arbeitsgruppe Hydro- und Umweltgeologie der MLU Halle-Wittenberg gesammelt wurden. Diese beruhen unter anderem auf der Erstellung einer Reihe komplexer geologischer und hydrogeologischer 3D-Modelle, die sich zum Teil neben ihrem Verwendungszweck auch im Hinblick auf die erfassten Skalenbereiche stark unterscheiden. In diesem Zusammenhang sei beispielhaft auf die Arbeiten von FABRITIUS (2002), NEEF (2002), WOLLMANN (2004), POHLERT (2004), HUBERT (2005), POHLERT (2005), SCHLESIER (2006), SEFELNASSR (2007), GOSSEL (2008) und LÄHNE (in Vorb.) verwiesen.

1.2 Methodische Umsetzung

Ein Vergleich von methodischen Ansätzen und Konzepten zur geologischen 3D-Modellierung setzt die Verwendung eines Einheitsdatensatzes voraus. In diesem Kontext wurden auf Grundlage einer einheitlichen Datenbasis, welche einem realen Modellgebiet mit komplexen geologischen Lagerungsverhältnissen entstammt, mehrere geologische Modelle unter Nutzung verschiedener methodischer Ansätze und Modellierwerkzeuge erstellt. Der Begriff Einheitsdatensatz bedeutet in diesem Zusammenhang, dass für jede Modellierung prinzipiell die gleichen Daten zur Verfügung standen. Wie in den entsprechenden Kapiteln beschrieben, ließen sich jedoch nicht unter allen Ansätzen und Softwarelösungen auch alle verfügbaren Daten in den Prozess der Modellerstellung einbinden.

Der Modellvergleich wird an ausgewählten Schichtkörpern durchgeführt. Neben Darstellungen zur Tiefenlage von Schichtunterkanten und Mächtigkeitsverteilungen werden ebenfalls Schichtverbreitungen, Schichtkubaturen sowie strukturelle Heterogenitäten betrachtet. Als Referenz dient dabei das von FABRITIUS (2002) unter einem konstruktiv-profilschnittgestützten Ansatz erstellte 3D-Modell „Bitterfeld-Süd“.

Die Strukturen der geologischen Modelle wurden in ein hydrogeologisches 3D-Gitter überführt und entsprechend der Geometrie der lithostratigraphischen Einheiten mit hydraulisch wirksamen Eigenschaften besetzt. Die Parametrisierung wurde dabei für jede hydrogeologische Modellschicht einheitlich gewählt, um im Anschluss an die Grundwassermodellierung strukturell bedingte Effekte eindeutig aufzeigen zu können. Unter diesem Aspekt wurden auch die Rand- und Anfangsbedingungen aller hydrogeologischen Modelle einheitlich defi-

niert. Als Ergebnis der stationären hydrogeologischen Modellierung wird neben hydraulischen Druckhöhen ebenfalls der Verlauf von Bahnlinien vergleichend betrachtet und dargestellt.

Sämtliche vergleichenden Untersuchungen, sowohl in Bezug auf die geologischen als auch die hydrogeologischen Modelle, sind auf die in den verwendeten Modellierwerkzeugen implementierten methodischen Ansätze, deren Besonderheiten sowie deren Auswirkungen auf die entsprechenden Modellergebnisse ausgerichtet. Eine Bewertung von einzelnen Modellierwerkzeugen wird nicht vorgenommen.

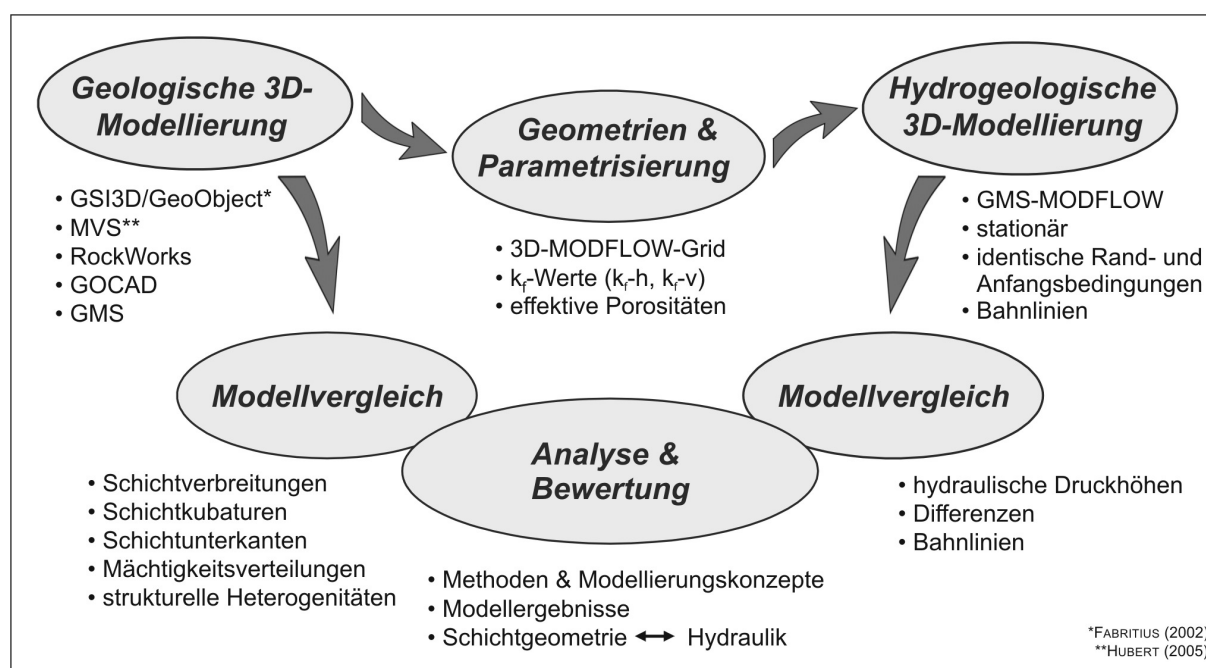


Abb. 1.1: Schematische Übersicht zur methodischen Umsetzung.

1.3 Strukturierung der Arbeit

Kapitel 2: Neben einem kurzen Abriss zur geologischen Entwicklungsgeschichte des Modellgebietes liefert dieses Kapitel ebenfalls einen Überblick zur hydrostratigraphischen Situation und zur Umsetzung der lithostratigraphischen Einheiten in den Modellen.

Kapitel 3: Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem theoretischen Hintergrund der geologischen 3D-Modellierung. Nach einer Einführung zu verwendeten Begrifflichkeiten und zum aktuellen Stand der Forschung werden zunächst die Möglichkeiten besprochen, mit denen Geo-Objekte und -körper im 3D-Raum repräsentiert werden können. Im weiteren Verlauf wird allgemein auf die Verfahren und Konzepte zur geologischen 3D-Modellierung eingegangen, bevor die verwendeten Modellierwerkzeuge näher vorgestellt und die in ihnen implementierten methodischen Konzepte detailliert erläutert und dargestellt werden.

Kapitel 4: Dieses Kapitel befasst sich mit der geologischen 3D-Modellierung am konkreten Beispiel – dem Modellstandort Bitterfeld-Süd. Nach der Beschreibung der zur Verfügung

stehenden Datenbasis wird die modelltechnische Umsetzung in den einzelnen Modellierwerkzeugen kurz vorgestellt sowie auf deren Besonderheiten eingegangen.

Kapitel 5: Nach einer Analyse der Faktoren, welche die Resultate einer geologischen 3D-Modellierung beeinflussen können, werden die Ergebnisse der verschiedenen geologischen 3D-Modelle an ausgewählten Schichtgliedern vergleichend dargestellt. Der Fokus liegt hier klar auf den verwendeten methodischen Konzepten. Anhand der exemplarisch ausgewählten Schichtkörper werden zudem die Besonderheiten und Effekte, die mit der Anwendung der betrachteten methodischen Ansätze zu erwarten sind, beschrieben. Weiter wird eine Möglichkeit aufgezeigt, die strukturelle bzw. geometrische Heterogenität von Schichtkörpern zu erfassen und vergleichend darzustellen.

Kapitel 6: In diesem Kapitel werden zunächst die Eingangsdaten, Parameter und Randbedingungen für die hydrogeologische Modellierung behandelt. Im weiteren Verlauf wird auf die Überführung der Schichtkörpergeometrien in das hydrogeologische Modellgitter sowie die Parametrisierung der hydrogeologischen Modelleinheiten eingegangen.

Kapitel 7: Unter diesem Kapitel werden die Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung anhand von hydraulischen Druckhöhen und Bahnlinien vergleichend dargestellt. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf einer Untersuchung der Beziehungen zwischen den erreichten Ergebnissen der hydrogeologischen Modellierung und den Strukturen, die mittels verschiedener modelltechnischer Ansätze in den geologischen 3D-Modellen erfasst wurden.

Kapitel 8: In diesem schließenden Kapitel werden die unterschiedlichen methodischen Konzepte, die im Zuge der Arbeit betrachtet wurden, kurz zusammengefasst sowie ihre Vor- und Nachteile im Hinblick auf die modelltechnische Erfassung von oberflächennahen, komplexen Lagerungsverhältnissen herausgestellt. Weiter sind die Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung in Verbindung mit ihren Beziehungen zu den Strukturen aus den verschiedenen geologischen 3D-Modellen zusammenfassend beschrieben.

1.4 Hintergrund zum Modellstandort Bitterfeld-Süd

Der ausgewählte Modellstandort Bitterfeld-Süd (vgl. Abb. 1.2) war aufgrund seiner überregional bedeutsamen bergbau- und industriehistorischen Entwicklung sowie den damit verbundenen großräumigen Kontaminationen bereits Gegenstand zahlreicher Forschungsaktivitäten. Im Zusammenhang mit dem Forschungsstandort Bitterfeld sei unter anderem auf die Arbeiten von KRAPP & RUSKE (1992), THIEKEN (2001), WEIß et al. (2004a, b, 2002, 2001), SOMMERWERK (2003), WYCISK et al. (2005b, 2004a, b, 2003a, b) und HEIDRICH et al. (2004) verwiesen.

Der Großraum Bitterfeld, mit den Städten Bitterfeld und Wolfen in seinem zentralen Teil, war Bestandteil des „Mitteldeutschen Chemiedreiecks“ der ehemaligen DDR. Hierzu zählten unter anderem die Standorte Bitterfeld/Wolfen, Leuna/Schkopau und Böhlen/Espenhain. Sowohl die Entwicklung der überwiegend chemischen Industrie als auch die extensiven bergbaulichen

Tätigkeiten haben die Region über Jahrzehnte hinweg entscheidend geprägt und nachhaltig verändert.

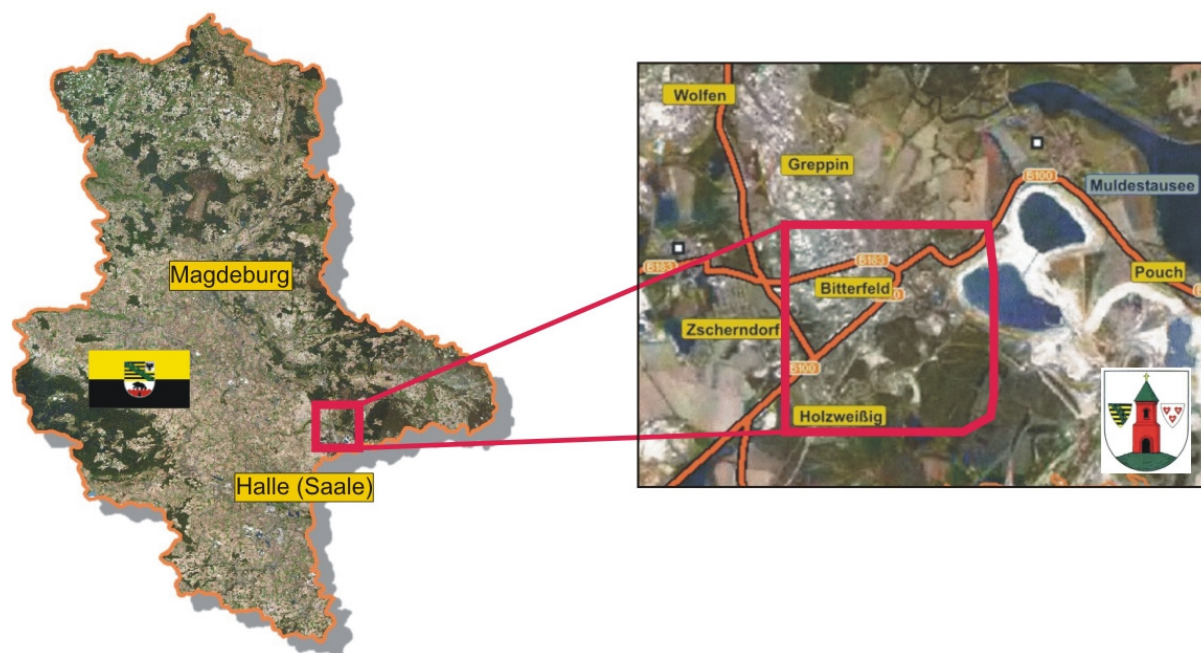


Abb. 1.2: Die Lage des Modellraumes Bitterfeld-Süd innerhalb Sachsen-Anhalts und der näheren Umgebung (Quelle der Satellitenaufnahmen: TravelTainment AG Aachen, 2001).

Die ausgeprägte bergbauliche und industrielle Nutzung führten zu einer erheblichen Belastungssituation für die Umwelt. Hiervon sind sämtliche Umweltkompartimente, wie Grundwasser, Oberflächenwasser, Boden und Luft, in zum Teil hohem Ausmaß betroffen. So wird beispielsweise nach WEIB et al. (2001) die regionale Dimension der Kontaminationen im Grundwasser auf eine Fläche von etwa 25 km² und ein Volumen von ca. 200 Mio. m³ geschätzt.

Die besondere Situation im Großraum Bitterfeld führte dazu, dass das Gebiet in ein Verbundforschungsvorhaben des Bundesministeriums für Bildung und Forschung mit der Bezeichnung SAFIRA (Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen) eingebunden wurde. Das SAFIRA-Projekt wurde unter Leitung des Umweltforschungszentrums Leipzig-Halle GmbH mit Beteiligung der Universitäten Tübingen, Stuttgart, Dresden, Leipzig, Halle und Berlin durchgeführt (WEIB & TEUTSCH, 1999).

2. Geologischer Rahmen

2.1 Regionalgeologische Einordnung und Prätertiär

Der prätertiäre Untergrund Mitteldeutschlands wird aus Bruchschollen des Grundgebirges gebildet. Ihre Heraushebung begann gegen Ende des Turon und setzte sich im Coniac und Santon fort (WALTER, 1992).

Der Großraum Bitterfeld kann regionalgeologisch der Halle-Wittenberger Scholle zugeordnet werden (vgl. Abb. 2.1). Die Schollenstruktur wird im NE durch den NW-SE streichenden Wittenberger Abbruch von der Altmark-Fläming-Senke getrennt. Die westliche und nordwestliche Abgrenzung wird durch den Zechsteinausstrich des Subherzynen Beckens markiert. Im SW wird die Struktur durch die NW-SE streichende Hallesche Störung von der Mansfelder und Nietlebener Mulde als Teile der Merseburger Scholle und damit vom nordöstlichsten Teil der Thüringischen Senke getrennt (KNOTH et al., 1998). Im SE schließt sich an die Halle-Wittenberger Scholle die Nordwestsächsische Hochscholle an. KNOTH & SCHWAB (1972) beschreiben zudem eine Zweiteilung der Halle-Wittenberger Scholle. Demnach wird sie durch die herzynisch streichende Köthen-Bitterfelder Störung in die nordöstliche Wittenberger Teilscholle und die in Richtung W verkippte, südwestliche Hallesche Teilscholle untergliedert. Nach neueren Untersuchungen ist das trennende Element hier jedoch vermutlich die Köthen-Delitzscher Störung (vgl. Abb. 2.1).

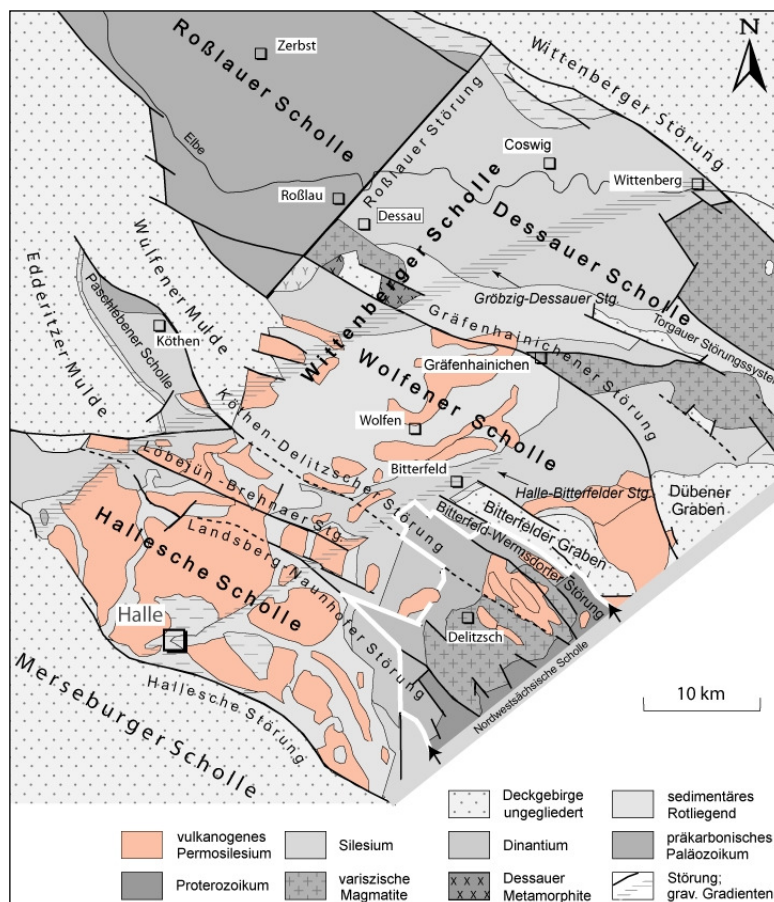


Abb. 2.1: Strukturbau der Halle-Wittenberger Scholle (nach MARTIKLOS et al., 2001; BEUTLER, 2001; RAPPSILBER, 2003; EHLING, 2008; Quelle: FRANKE, 2009).

Die maßgebliche Heraushebung des prätertiären Schollenmosaiks erfolgte nach KNOTH et al. (1998) während der Kreidezeit im Zuge der Saxonischen Tektogenese vor etwa 80 bis 100 Mio. Jahren. Jedoch setzten die tektonischen Bewegungen bereits im unteren Perm ein, wo sie von vulkanischen Aktivitäten begleitet wurden. Die tektonischen Vorgänge kamen gegen Ende des Mesozoikums weitestgehend zum Erliegen. Die Mosaikstruktur der Halle-Wittenberger Scholle wird im Wesentlichen durch Störungen parallel der herzynischen (NW-SE) und erzgebirgischen (NE-SW) Richtung geprägt.

Bezogen auf die tektonischen Großeinheiten des Variszischen Grundgebirges ist die Halle-Wittenberger Scholle im Übergang zwischen Saxothuringikum im SE und Rhenoherynikum im NW lokalisiert. Diese Zone wird als Mitteldeutsche Kristallinschwelle bezeichnet. Die hier relativ weit verbreiteten Gesteine des permokarbonen Übergangsstockwerkes wurden im Bereich der Saale-Senke, einer intramontanen, riftogenen Senkungsstruktur, welche im Untergrund vom Thüringer Wald bis nach Wittenberg nachweisbar ist, abgelagert (KNOTH et al., 1998).

Die permokarbonischen Ablagerungen des Übergangsstockwerkes sind im Bereich der Halle-Wittenberger Scholle weit verbreitet und erreichen im nördlichen Saale-Becken in der Region um Halle Mächtigkeiten von über 2000 m (RAPPSILBER, 2003). In diese mächtige Molassefolge sind über 1000 m mächtige Rotliegend-Vulkanite eingeschaltet (ALTERMANN & RUSKE, 1997). Das Gebiet der Halle-Wittenberger Scholle war während der Saxonischen Tektogenese ein weiträumiges Abtragungsgebiet, so dass mesozoische Ablagerungen aus Trias, Jura und Kreide nahezu vollständig fehlen. Allein in kleinräumigen und tektonisch begünstigten Vorkommen sind Ablagerungen der Trias mit Buntsandstein und Muschelkalk reliktsch erhalten. So wurden beispielsweise im Bitterfelder Graben neben Zechsteinsedimenten auch Ablagerungen des Buntsandsteins vor der Abtragung bewahrt.

Von Abtragungs- und Verwitterungsprozessen wurden zum Teil auch die paläozoischen Gesteine betroffen. Die Verwitterung der feldspatreichen Glieder zu einer kaolinreichen Deckschicht setzte bereits während der Kreide ein und wurde im frühen Tertiär unter warm-humiden Klimaverhältnissen intensiviert (KNOTH et al., 1998). Das Prätertiär ist nach KRAPP & RUSKE (1992) im Großraum Bitterfeld bis auf wenige Ausnahmen im Muldetal, wo es teilweise zutage tritt, ab einer Teufe von 80 bis 100 m anzutreffen.

2.2 Känozoikum

2.2.1 Tertiär

Ausgehend von einer regressiven Periode am Ende der Kreidezeit kam es im Paläogen erneut zu einer schrittweisen Ausdehnung des Meeresraumes. Dabei erfolgten die Transgressionen ausgehend von der Nordsee, dem Atlantik und der Tethys (FAUPL, 1997). Die tertiären Ablagerungen der Halle-Wittenberger Scholle reichen stratigraphisch vom Eozän bis in das tiefere Miozän (KNOTH et al., 1998). Sie sind im Wesentlichen durch die südliche Randlage des Gebietes zu einem Meer, welches den Großteil der Norddeutschen Senke einnahm, geprägt. Dabei kommen ab dem Eozän als Ausdruck mehrfacher Trans- und Regressionsphasen innerhalb

der ehemaligen Halle-Helmstedter Meeresbucht wechselnd marine und terrestrische Sedimente in enger Verzahnung zur Ablagerung, wobei die Bildung von Braunkohlen als Ergebnis eines Wechselspiels zwischen Klima, Meeresspiegelschwankungen, Tektonik und Subrosion verstanden werden kann (BLUMENSTENGEL et al., 1996).

Das Zusammenwirken von älteren, reaktivierten Strukturen und großtektonisch bedingten, epirogenetischen Bewegungen der Kruste in Verbindung mit der Alpidischen Orogenese führten zu einem Wechsel von Trans- und Regressionen innerhalb des Nordwesteuropäischen Tertiärbeckens. Im Bereich der Halle-Wittenberger Scholle kam es dabei zur Ablagerung einer Wechselfolge von fluviatilen Sanden und Kiesen, limnischen bis marinen Schluffen, marinen Sanden und Tonen sowie zur Bildungen subtropischer Moore und Sümpfe, welche unter überwiegend transgressiven Verhältnissen entstanden sind. Die tertiären Moor- und Sumpflandschaften bildeten die Basis für die Entwicklung der Braunkohlenflöze in der Region, welche durch eine unbeständige Verbreitung gekennzeichnet sind (WALTER, 1992; EISSMANN, 1994a).

Die Mächtigkeit der tertiären Ablagerungen variiert meist zwischen 75 und 100 m und kann über Subrosionssenken des ausgelaugten Zechsteins Werte von bis zu 150 m erreichen. Die Ablagerungszyklen setzen meist mit Kiesen und Sanden ein. Zum Hangenden werden sie zunehmend feinkörniger und gehen schließlich in die Tonfraktion über. Oftmals werden die Zyklen mit ausgedehnten Braunkohleflözen abgeschlossen, deren Mächtigkeit über ausgelaugten Bereichen des Zechsteins ebenfalls stark anwachsen kann (ALTERMANN & RUSKE, 1997).

Den untersten Flözhorizont bildet das obereozäne Flöz Bruckdorf. Nach einem Meeresspiegelanstieg und einhergehender Moorbildung wurde es in den Senken der prätertiären Landoberfläche über der Lochau-Folge B, welche auch als Bruckdorf-Basis-Schichten bezeichnet wird, abgelagert (BLUMENSTENGEL et al., 1996; KNOTH et al., 1998). Im Hangenden folgen die wechselhaft ausgebildeten, sandig bis tonigen und teilweise kohlehaltigen obereozänen bis unteroligozänen Schichten der Lochau-Folge C. Sie erreichen Mächtigkeiten von 15 bis 20 m und werden diskordant von unteroligozänen Sanden der Zörbig-Schichten überlagert, welche bereits der Rupel-Folge zugeordnet werden. Die Sande der Zörbig-Schichten werden vom Flöz Gröbers in einen unteren und oberen Teil gegliedert. Nach KRAPP & RUSKE (1992) ist der Flözkomplex Gröbers mit stark schwankenden Mächtigkeiten zwischen 1 und 8 m über weite Bereiche des Landkreises Bitterfeld verbreitet.

Infolge eines weiteren Meeresvorstoßes aus Richtung NW kam im ausgehenden Unteroligozän der 10 bis 20 m mächtige (KRAPP & RUSKE, 1992), marine Rupelton (Septarienton) zur Ablagerung. Er bildet den Abschluss der Rupel-Folge und ist im Großraum Bitterfeld weit verbreitet.

Der Beginn des Oberoligozäns wird durch einen weiteren Meeresspiegelanstieg (weltweite Chatt-Transgression) und damit verbundenen, lokal auftretenden, kiesigen Transgressionsablagerungen markiert. Im Hangenden folgen nördlich der Linie Zörbig – Bitterfeld – Düben

– Torgau die unter marinen Bedingungen abgelagerten, glaukonit- und glimmerführenden Schluffe der Unteren Cottbus-Folge (KNOTH & SCHWAB, 1972). Der feinsandig bis tonige Glaukonitschluff ist im Gebiet um Bitterfeld zwischen 2 und 5 m mächtig (WYCISK et al., 2002). Der Unteren Cottbus-Folge werden ebenfalls die im Hangenden abgelagerten (flach-) marinen und feinkörnigen Glaukonitsande zugeordnet.

Im weiteren Verlauf kamen die Sedimente der Oberen Cottbus-Folge mit Unterem Glimmersand, dem bernsteinführenden Breitenfelder Horizont und Oberem Glimmersand zur Ablagerung. Lithologisch werden die Glimmersande aus schluffigen, glimmerführenden Fein- bis Mittelsanden gebildet. Der Breitenfelder Horizont besteht im Wesentlichen aus einer Folge geringmächtiger kohligter Schluffe und Tone, die mit eingeschalteten Mittel- bis Grobsanden durchsetzt ist. Er teilt bisweilen die Bitterfelder Glimmersande in eine obere und untere Folge.

Breitenfelder Horizont und Oberer Glimmersand wurden bisher in das Untermiozän gestellt (BLUMENSTENGEL et al., 1996). HARTMANN (2005) hebt jedoch hervor, dass diese Schichtsequenz nach neueren Untersuchungen an Pollen, Sporen und Phytoplankton eher dem Oberoligozän zuzuordnen ist.

Während die Glaukonitschluffe und -sande der Unteren Cottbus-Folge im Zusammenhang mit der ausgedehnten Transgression zu Beginn des Oberoligozäns stehen, werden die Ablagerungen der Bitterfelder Glimmersande (Obere Cottbus-Folge) dem regressiven Teil des Sedimentationszyklus zugeordnet (HARTMANN, 2005). Die Bitterfelder Glimmersande weisen im Raum Bitterfeld Mächtigkeiten zwischen 20 und 30 m auf (KRAPP & RUSKE, 1992).

Im Hangenden der Bitterfelder Glimmersande folgt im Raum Bitterfeld-Gräfenhainichen und nördlich der Elbe bei Coswig der Bitterfelder Flözkomplex (KNOTH & SCHWAB, 1972). Die Abfolge spiegelt eine Phase lang anhaltender Moorbildungen, die zeitweise infolge von Meeresspiegelschwankungen durch weiträumige Einschaltungen von tonigen bis sandigen Zwischenmitteln unterbrochen wurden, wider. Ausgehend vom Liegendeschluff wird der Flözkomplex aus drei Flözbänken, der Bitterfelder Unterbank, der Bitterfelder Oberbank 1 und der Bitterfelder Oberbank 2, aufgebaut, welche durch sandige und tonig-schluffige Zwischenmittel getrennt sind (HARTMANN, 2005). Die untermiozänen Braunkohleflöze erreichen bei einer annähernd gleich bleibenden Ausbildung Mächtigkeiten von bis zu 10 m (FABRITIUS, 2002; WOLLMANN, 2004). In Senken kann ihre Mächtigkeit jedoch auf über 15 m anwachsen (WYCISK et al., 2002).

Den Abschluss der tertiären Ablagerungen bildet im Gebiet der Halle-Wittenberger Scholle die Bitterfelder Decktonfolge (KNOTH et al., 1998). Dabei handelt es sich um eine zum Teil mehr als 10 m mächtige Sequenz aus schluffigen Tonen, Schluffen, Sanden sowie zwei Flözhorizonten – dem Decktonflöz im Hangenden der ebenfalls untermiozänen Roitzscher Fluss-sandzone im unteren Teil und dem Flözhorizont Brandis im oberen Bereich der Abfolge. Pliozäne Ablagerungen sind bisher nicht bekannt.

2.2.2 Quartär

Das Quartär Mitteldeutschlands wird generell in Pleistozän und Holozän gegliedert. Einen umfassenden Überblick zu den quartären Ablagerungen Mitteldeutschlands liefern unter anderem die Arbeiten von EISSMANN (1994b, 1995), EISSMANN & LITT (1994) und KNOTH (1995).

Das Pleistozän ist durch mehrere Kalt- und Warmphasen charakterisiert. Unterschieden werden hierbei die Kaltzeiten des Elster-, Saale- und Weichsel-Glazials, während denen das Inlandeis von Norden her bis in den Nord- und Mitteldeutschen Raum vorstieß. Die zwischen den Glazialen eingeschalteten Warmzeiten sind durch die Interglaziale Holstein und Eem repräsentiert (EISSMANN, 1994b).

Die ältesten quartären Ablagerungen Sachsen-Anhalts werden durch fluviatile Sande und Kiese gebildet (KNOTH, 1995). Sie lassen sich in mindestens vier Terrassen gliedern, sind frei von nordischen Geschieben und präglazialen Ursprungs. Die Flussschotter sind Ausdruck einer bereits im höheren Tertiär einsetzenden Abkühlung des Klimas, welche sich im eingehenden Quartär weiter verstärkte.

Das Elster-Glazial ist durch einen zweimaligen Vorstoß des Inlandeises geprägt. Belege hierfür sind die Bildungen der beiden Grundmoränen der Elster-I- und Elster-II-Kaltzeit. Weiter sind glazilimnische Sande und Schluffe sowie glazifluviatile Kiese und Sande und lokal Bändertone anzutreffen, welche die Grundmoränen überlagern. Die Grundmoränen sind in der Regel 10 bis 20 m mächtig. Bekannt sind ebenfalls Bildungen rinnenförmiger und zum Teil mit Grundmoränenmaterial verfüllter Strukturen, die stellenweise in das unterlagernde Tertiär (Braunkohlen und Bitterfelder Glimmersande) eingeschnitten sind. In Exarationsgebieten, Subrosionssenken und alten Talfüllungen können die elsterzeitlichen Grundmoränen Mächtigkeiten von über 70 m erreichen. In subglaziär-hydromechanisch entstandenen Rinnen erreichen elsterzeitliche Ablagerungen sogar Mächtigkeiten von 200 bis 300 m (KNOTH, 1995).

Aus dem folgenden Holstein-Interglazial sind nur isolierte Vorkommen limnischer Ablagerungen, wie Schluffe, Feinsande, Mudden, Diatomeenerden und Torfe bekannt. Aufgrund von frühsaalezeitlichen Umlagerungsprozessen sind diese warmzeitlichen Bildungen im mitteldeutschen Raum nur noch reliktsch erhalten und fehlen im Großraum um Bitterfeld völlig.

Im Zeitraum zwischen der ausgehenden Holstein-Warmzeit und dem Höhepunkt des ersten saalezeitlichen Eisvorstoßes kam es zu ausgeprägten Schotterakkumulationen der Saale, Elster, Mulde und anderer Fließgewässer. Aus diesem Grund wird dieser Abschnitt des Saale-Glazials auch als „Hauptterrassenzeit“ bezeichnet. Im Gebiet zwischen Saale und Mulde nimmt der Hauptterrassenkomplex über 40 %, zwischen Saale und Elbe über 30 % der Tieflandsbereiche ein. Die in mehreren Phasen abgelagerten Hauptterrassenschotter bilden die basale Abfolge des Saale-Komplexes. Während der saalezeitlichen Aufschotterung wurden stellenweise die elsterzeitlichen Ablagerungen einschließlich tertiärer Bildungen aufgearbeitet und umgelagert. Im Liegenden der Terrassenschotter sind Sande und Kiese mit reichlich nordischem Geschiebmaterial des elsterzeitlichen Akkumulationsprozesses verbreitet (EISSMANN, 1997).

Der saalezeitliche Eisvorstoß des Drenthe-Stadiums beendete die Schotterakkumulation der Flüsse und bedingte die Ablagerung von bis zu drei, 5 bis 10 m mächtigen Grundmoränen (EISSMANN, 1995; KNOTH, 1995; KNOTH et al., 1998), die ein Beleg für größere Oszillationen der Eisrandlage sind. Im jüngeren Abschnitt der Saale-Kaltzeit war der mitteldeutsche Raum überwiegend Periglazialgebiet. Es kam zu periglazialen Umlagerungen und frostgesteuerten Prozessen. Der Eisvorstoß des Warthe-Stadiums erreichte das Bearbeitungsgebiet nicht mehr.

Als typische Bildungen des Eem-Interglazials sind Torfe, Mudden, limnische Sande und (Bekken-) Tone sowie lokal fossile Böden erhalten.

Zu Beginn der Weichsel-Kaltzeit setzte nach KNOTH (1995) in den Tälern eine Tiefenerosion ein, durch welche eemwarmzeitliche und ältere Ablagerungen erodiert und ausgeräumt wurden. Es folgte die Aufschüttung der bis zu 15 m mächtigen Niederterrassen. Die zuvor ausgeräumten fluviatilen Rinnen wurden nun mit Kiesen und Sanden sowie erodiertem Material der Liegendschichten verfüllt. So sind für die im Großraum Bitterfeld verlaufenden Rinnenstrukturen Füllungen typisch, die unter anderem fein verteilte Kohlepartikel tertiären Ursprungs enthalten (FABRITIUS, 2002; WOLLMANN, 2004). Während der mehrphasigen Akkumulation kam es in den Niederterrassen zur Einschaltung schluffiger Zwischenlagen. Weiter sind periglaziale Überprägungen, mit Kryoturbationen und Eiskeilpseudomorphosen, als charakteristisches Merkmal bekannt (KNOTH, 1995). Auch äolische Ablagerungen sind im Gebiet von Sachsen-Anhalt weit verbreitet. So verweisen KRAPP & RUSKE (1992) auf Löss- und Sandlöss-Ablagerungen, welche weite Gebiete außerhalb der Flussniederungen einnehmen.

Zum Ende der Weichsel-Kaltzeit sowie im eingehenden Holozän setzte mit dem Abtauen des Toteises und dem Auftauen der Permafrostböden in den Flussniederungen eine erosive Phase ein. Die im Atlantikum abgelagerten Flusskiese und Talsande bilden die holozäne Terrasse, die 6 bis 8 m, maximal 12 m mächtig wird.

Mit einer Mächtigkeit von 0,5 bis 2 m bilden die Auenlehme die jüngsten Ablagerungen (KNOTH, 1995). Im Gegensatz zur kontinuierlichen Aufarbeitung und Umlagerung der weichselzeitlichen Niederterrassenschotter erfolgte die Sedimentation der Auenlehme episodisch bzw. periodisch in Verbindung mit Hochwasserereignissen (HINZE et al., 1989). Ihre Ablagerung begann nach HILLER et al. (1991) im Atlantikum bis Subboreal. Lokal begrenzt treten auch Ablagerungen ehemaliger Altwasserarme und Flachmoore sowie Torfe und Mudden, die sich überwiegend in durchflusslosen Senken bildeten, auf (EISSMANN, 1994b).

Im Großraum Bitterfeld sind die jüngsten Ablagerungen massiv durch anthropogene Beeinflussung und Umlagerung geprägt. Bedingt durch den extensiven Abbau von Braunkohle im Tagebaubetrieb sowie die bautechnischen Maßnahmen im Laufe der Entwicklung von Industrie- und Siedlungsgebieten wurden die Lagerungsverhältnisse der oberflächennahen Schichten tiefgreifend gestört. Die rezenten Umlagerungsprozesse führten zur Bildung von „neuen“, äußerst heterogen zusammengesetzten Schichten oder Geokörpern mit zum Teil erheblichen Mächtigkeiten, die sowohl das Landschaftsbild als auch die hydraulischen Verhältnisse im Untergrund entscheidend prägen.

2.3 Modelltechnische Umsetzung und Hydrostratigraphie

Die in den einzelnen geologischen Modellen realisierte Schichtenfolge besteht aus 22 stratigraphischen Einheiten, die mit Hilfe von 24 hierarchisch gegliederten Modellschichten abgebildet werden (vgl. Tab. 2.1). Einen detaillierten Überblick zur lithologischen Beschaffenheit der modellierten Schichtenfolge liefert Anhang 1.

Die Modellbasis wird durch die Oberkante des unteroligozänen Rupeltons gebildet. Der Grundwassergeringleiter ist großflächig im Raum Bitterfeld-Wolfen verbreitet. Obwohl der Rupelton teilweise durch das Auftreten sandiger Zwischenschichten geprägt ist, bildet er mit k_f -Werten zwischen 10^{-9} und 10^{-11} m/s (KRAPP & RUSKE, 1992; WYCISK et al., 2003b) den bedeutendsten Grundwassergeringleiter der Region. WYCISK et al. (2002) geben für den Rupelton sogar k_f -Werte $< 10^{-12}$ m/s an.

Die stratigraphisch nächst höhere Modellschicht wird durch den oberoligozänen Glaukonitschluff der Unteren Cottbus-Folge gebildet. Auch er stellt mit k_f -Werten von 10^{-9} bis 10^{-11} m/s (WYCISK et al., 2002) einen Grundwassergeringleiter dar. Er bildet die basale stratigraphische bzw. lithologische Einheit der geologischen Modelle und ist flächendeckend über das gesamte Modellgebiet verbreitet. Der Glaukonitschluff wird vom ebenfalls zur Unteren Cottbus-Folge zählenden Glaukonitsand überlagert.

Im weiteren Verlauf der modelltechnisch realisierten Schichtenfolge schließen sich die oberoligozänen Ablagerungen der Oberen Cottbus-Folge, mit Unterem Bitterfelder Glimmersand, Breitenfelder Horizont und Oberem Bitterfelder Glimmersand, an. Nach WYCISK et al. (2002) bilden Glaukonitsand und Unterer Bitterfelder Glimmersand eine hydrogeologische Einheit. Es werden k_f -Werte von 10^{-6} bis 10^{-5} m/s aufgeführt. In vertikaler Richtung betragen die Durchlässigkeiten um 10^{-8} m/s. Unterer und Oberer Glimmersand werden im Modellgebiet stellenweise durch den Breitenfelder Horizont getrennt. Dieser stellt in der Region mit Durchlässigkeiten von 10^{-8} m/s einen weiteren Grundwassergeringleiter dar. Die horizontalen hydraulischen Durchlässigkeiten des Oberen Bitterfelder Glimmersandes betragen nach WYCISK et al. (2002) 10^{-5} bis 10^{-4} m/s, während für die vertikale Richtung k_f -Werte von $1 \cdot 10^{-6}$ m/s angegeben werden.

Die fein- bis mittelsandigen Bitterfelder Glimmersande bilden zusammen mit dem Glaukonitschluff einen tertiären Grundwasserleiter von regionaler Bedeutung. Nach KRAPP & RUSKE (1992) liegen die k_f -Werte dieser Abfolge zwischen 10^{-5} und $5 \cdot 10^{-4}$ m/s.

Die Glimmersande werden vom untermiozänen Flözkomplex Bitterfeld überlagert. Die aus mehreren Flözhorizonten bestehende Abfolge wird hydraulisch als grundwasserhemmend bis -geringleitend eingestuft. Die hydraulischen Durchlässigkeiten bewegen sich zwischen $2 \cdot 10^{-7}$ bis $5 \cdot 10^{-5}$ m/s (RUSKE et al., 1997; WEIß et al., 2001).

Den Abschluss der tertiären Schichtenfolge bildet in den Modellen der Bitterfelder Decktonkomplex. Er stellte ursprünglich zusammen mit dem Flözkomplex Bitterfeld einen ausgedehnten Grundwassergeringleiter dar. Im Zuge der Auskohlung und der damit verbundenen exten-

siven Massenumlagerung wurde der Decktonkomplex in weiten Teilen des Modellgebietes ausgeräumt und ist nur noch lokal im S und E des Modellraumes erhalten.

Die quartären Ablagerungen setzen im Modellgebiet mit der saalezeitlichen Hauptterrasse der Mulde ein, welche von saalezeitlichen Grundmoränenablagerungen sowie glazifluviatilen Kiesen und Sanden überlagert wird. Die Terrassenschotter zeigen k_f -Werte um 10^{-3} m/s (KRAPP & RUSKE, 1992) und sind damit ausgesprochen gut grundwasserleitend. Die Grundmoränenablagerungen werden im Gegensatz zu den überlagernden glazifluviatilen Kiesen und Sanden als Grundwassergeringleiter eingestuft.

Die weichselzeitliche Abfolge ist im Modellraum durch zahlreiche Ablagerungen vertreten. Ausgehend von einer weichselzeitlichen Rinnenstruktur folgen im Hangenden die Niederterrassensedimente von Mulde und Strengbach sowie abschließend äolische Ablagerungen des ehemaligen Periglazialgebietes, bestehend aus Löss und Sandlöss.

Nach WYCISK et al. (2002) gleicht die Füllung der NW-SE streichenden Rinnenstruktur der Geröllführung der auflagernden Niederterrasse der Mulde. Für die Rinne werden in diesem Zusammenhang k_f -Werte von 10^{-3} m/s angegeben. Da die Rinne in Braunkohle und Glimmersande eingetieft ist, wirkt sie als lokales Drainageelement zwischen quartärem und tertiärem Grundwasserstockwerk. Auch die Niederterrasse der Mulde weist mit k_f -Werten von 10^{-4} bis 10^{-3} m/s (RUSKE et al., 1997; WYCISK et al., 2002) hohe Durchlässigkeiten auf. Beide Modelleinheiten werden daher als gut grundwasserleitend eingestuft.

Die Niederterrasse der Mulde wird durch das Auftreten einer geringmächtigen interstadialen Folge aus Schluff, Sand, Ton und Torf, die zudem periglazial überprägt worden ist, in einen oberen und unteren Teil gegliedert. Der trennende Periglazialhorizont bildet mit k_f -Werten von 10^{-9} bis 10^{-7} m/s einen lokalen Grundwassergeringleiter. Stellenweise ist in den unteren Teil der Niederterrasse ein weiterer Periglazialhorizont eingeschaltet, welcher ebenfalls als grundwasserhemmende Schicht wirkt. Dies hat zur Folge, dass die stratigraphische Einheit der unteren Niederterrasse modelltechnisch mit Hilfe von zwei Schichtgliedern realisiert werden musste.

Über den Terrassenschottern der Mulde folgen die weichselzeitlichen Strengbachschotter. Sie werden ebenfalls dem oberen Teil der Niederterrasse zugeordnet. Die Strengbachschotter stellen, wie auch die weichselzeitlichen Terrassenschotter der Mulde, mit k_f -Werten von 10^{-5} bis 10^{-4} m/s (WEIß et al., 2001) einen guten Grundwasserleiter dar. Auch sie werden lokal durch einen eingeschalteten Schluffhorizont in einen oberen und unteren Teil getrennt. Somit war auch die Einheit der Strengbachschotter durch zwei Modellschichten darzustellen. Für den eingeschalteten (oberen) Schluffhorizont werden Durchlässigkeiten von $3 \cdot 10^{-7}$ bis $4 \cdot 10^{-6}$ m/s ausgewiesen (WEIß et al., 2001; WYCISK et al., 2003).

Im Modellgebiet endet die pleistozäne Abfolge mit äolischen Ablagerungen, die durch Löss und Sandlöss repräsentiert sind. Im weiteren Verlauf setzt sich die Schichtenfolge mit den Ablagerungen der holozänen Terrassenschotter der Mulde sowie dem überlagernden Auenlehm fort.

Die holozänen Muldeschotter sind relativ homogen ausgebildet und es herrschen Durchlässigkeiten von 10^{-4} bis 10^{-3} m/s vor (WYCISK et al., 2002). Sie bilden zusammen mit den weichselzeitlichen Niederterrassen, und im großräumigen Maßstab gemeinsam mit den saale- und elsterzeitlichen Kiesen und Sanden, einen regional bedeutsamen quartären Grundwasserleiter. Die gut durchlässigen Schichten stehen großräumig miteinander in Verbindung, so dass sie als einheitliches quartäres Grundwasserstockwerk aufgefasst werden können (KRAPP & RUSKE, 1992).

Die modellierte Schichtenfolge endet mit den rezenten und anthropogen verursachten Schichtgliedern der Auffülle und Bergbaukippen. Besonders die Braunkohlekippen haben durch ihre weite Verbreitung, hohe Mächtigkeit und heterogene Zusammensetzung einen erheblichen Einfluss auf das hydrogeologische Regime der Region. Nach WYCISK et al. (2002) bestehen die Kippen westlich von Bitterfeld überwiegend aus Abraum des Decktons und weisen k_f -Werte von 10^{-8} bis 10^{-7} m/s auf. Sie wirken damit als Grundwasserhemmer. Östlich und südöstlich von Bitterfeld zeichnen sich die Kippenkörper durch einen höheren Sandanteil und damit verbunden durch eine bessere hydraulische Leitfähigkeit aus.

Für die im Modellgebiet verhältnismäßig weit verbreitete Auffülle werden von EISERMANN (2005) durchschnittliche Durchlässigkeiten von $5 \cdot 10^{-6}$ m/s angegeben.

Die nachfolgende Tabelle 2.1 soll einen Überblick zur Stratigraphie des Modellraumes und ihrer modelltechnischen Umsetzung liefern. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die hydrostratigraphische Gliederung aufgrund der altlastenrelevanten Fragestellungen im Großraum Bitterfeld hier in der maximalen geologischen lokalen Auflösung umgesetzt worden ist und sich bewusst nicht an der mittlerweile in Norddeutschland üblichen Gliederung von REUTTER (2005) orientiert.

Tab. 2.1: Stratigraphisches Normalprofil des Modellraumes Bitterfeld-Süd und modelltechnische Umsetzung.

| Stratigraphie | | geologisches Normalprofil Großraum Bitterfeld | | Umsetzung der Schichtglieder in den geologischen Strukturmodellen | | | |
|--------------------------------|---|--|---|--|---|--|---|
| | | erarbeitet: DR. RUSKE, 29.01.2001 (nachträglich angepasst) | | Schicht- kürzel | Schichtbeschreibung | | |
| Quartär | Holozän | Kippen, Braunkohletagebau Auffülle, allgemein Industriedeponiegut Auenlehm / -ton Flusskiese und fluviatile Talsande | | Abk A - Lf Qhg | Braunkohlekippen, Bergbaukippen Auffülle - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - Auenlehm Holozän-Terrasse der Mulde | | |
| | | Pleistozän | Weichsel - Komplex | Sandlöss Geschiebedecksand Niederterrasse oberer Teil: - Strengbachschotter - Muldeterrasse Periglazialhorizont Niederterrasse unterer Teil: - Muldeterrasse Fuhneue fluviatile Rinne | Sl - Ntos1 Pi Ntos2 Ntom Pg1 Ntum1 Pg2 Ntum2 - Ntur | Sandlöss und Löss - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (1) Schluffhorizont Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (2) Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde Periglazialhorizont 1 Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (1) Periglazialhorizont 2 Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (2) - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - fluviatile Rinne | |
| | Eem | | | Torfe, Tone, Mudden | - | - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - | |
| | Saale - Komplex Saale - I - Kaltzeit | | | glazifluviatile Sande und Kiese - Nachschüttsande Grundmoräne glazifluviatile Sande und Kiese - Vorschüttsande Hauptterrasse der Mulde / Elster | Qsgs Qsgm - Qsht | glazifluviatile Kiese und Sande Grundmoräne der Saale-Kaltzeit - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - Hauptterrasse der Mulde | |
| | | | Holist. | - | - | - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - | |
| | | | Elster - Komplex Elster I Kaltzeit Elster II Kaltzeit | glazilimnische Bildungen Grundmoräne | - - | - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - - <i>im Modellgebiet nicht vorhanden</i> - | |
| | Neogen | | | Miozän | Untermiozän Bitterfelder Decktonkomplex | Bitterfelder Deckton | Dt |
| | | Bitterfelder Flözkomplex | Bitterfelder Flöze | | Brk | Flözkomplex Bitterfeld | |
| | Tertiär | Paläogen | Oligozän | Oberoligozän Cottbus - Folge Obere | Oberer Bitterfelder Glimmersand Breitenfelder Horizont Unterer Bitterfelder Glimmersand | Gls0 Bth Glsu | Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil Breitenfelder Horizont Bitterfelder Glimmersand, unterer Teil |
| | | | | | Untere | Glaukonitsand Glaukonitschluff | Gks Gku |
| Unteroligozän Rupel - Folge | | | Rupelton | - | Modellbasis | | |

3. Geologische 3D-Modellierung – Modellierungskonzepte und Methoden

Dieses Kapitel setzt sich mit den Konzepten zur geologischen 3D-Modellierung, zunächst im Allgemeinen, im weiteren Verlauf in Verbindung mit den verwendeten Modellierwerkzeugen am konkreten Fall, auseinander. Nach einem Überblick zu den begrifflichen Grundlagen sowie zum aktuellen Stand der Forschung, werden zunächst die Repräsentationsformen des geologischen Untergrundes behandelt. Diese bilden die Grundlage einer jeden geologischen Modellierung und sind deshalb für das Verständnis der betrachteten methodischen Ansätze wichtig. Zudem sind die Repräsentationsformen teilweise für die Vor- und Nachteile verantwortlich, welche den verschiedenen Ansätzen zugeschrieben werden können. Im weiteren Verlauf werden die methodischen Konzepte zur geologischen 3D-Modellierung dargestellt und anschließend im Hinblick auf die betrachteten Modellierwerkzeuge näher beschrieben.

3.1 Einführung

3.1.1 Begriffliche Grundlagen

Der Begriff **Modell** ist sowohl im allgemeinen Sprachgebrauch als auch in fast allen Wissenschaftsdisziplinen weit verbreitet. Er leitet sich vom lateinischen Wort *modulus* (Maß, Maßstab) ab und wird in vielen verschiedenen Zusammenhängen mit recht unterschiedlicher Bedeutung verwendet (KASTENS & KLEINE BÜNING, 2005).

Nach STACHOWIAK (1973) liegt der Hauptansatz der **Modellierung**, also der Modellbildung, in einer originalähnlichen, aber nicht originalgetreuen Abbildung. Das resultierende Modell hebt dabei bestimmte Eigenschaften des Modellobjektes hervor und vernachlässigt wiederum andere und ist deshalb absichtlich nicht originalgetreu (KASTENS & KLEINE BÜNING, 2005). Somit ist ein Modell immer eine Vereinfachung des Originals und bildet Phänomene der Realität zweckorientiert ab (BUCHHOLZ, 2001).

Dies gilt ebenfalls für die **geologische 3D-Modellierung**. Der Bearbeiter entscheidet in Abhängigkeit von den Modellierungszielen, welche Attribute des Modellobjektes bzw. Modellraumes in die Modellierung einfließen sowie an welcher Stelle und in welchem Umfang Vereinfachungen vorzunehmen sind. Ziel ist in jedem Falle die zweckorientierte Bereitstellung von 3D-Informationen über den geologischen Untergrund.

ELFERS et al. (2004) fassen diese Aspekte unter dem Begriff **3D-Geologie** zusammen und definieren diesen als Modellierung und Dokumentation des geologischen Wissens über den Untergrund. Dabei werden auf der Grundlage von Stratigraphie, Lithologie und Genese Homogenbereiche abgegrenzt und als Geokörper modelliert. **Geokörper** selbst sind als dreidimensionale Abbilder des geologischen Untergrundes definiert. Sie beschreiben begrenzte Volumina, denen gleiche Eigenschaften zugeordnet werden (Homogenbereiche). Sie sind allseitig durch Flächen begrenzt (z. B. Top, Basis, Störungsflächen) und bilden in ihrer Gesamtheit das **geologische Basismodell**.

MALLET (2002) fasst unter dem Begriff **Geomodellierung** alle mathematischen Methoden, mit denen die Topologie, die Geometrie und die physikalischen Eigenschaften geologischer

Objekte einheitlich modelliert werden können, zusammen. Hierbei werden sämtliche Daten berücksichtigt, die mit diesen Objekten in Beziehung stehen.

Die Modellerstellung selbst erfolgt im Fall der geologischen 3D-Modellierung meist mit hochspezialisierten **Modellierwerkzeugen**. Hierunter sind rechnerbasierte Programme oder Programmpakete zu verstehen, in welchen die Verfahren zur Modellierung von geologischen Objekten mit dreidimensionalem Raumbezug implementiert sind. Neben den eigentlichen Verfahren zur Modellierung bieten zahlreiche Modellierwerkzeuge ebenfalls Möglichkeiten zur Datenanalyse und Datenaufbereitung, zur Visualisierung, Darstellung und Analyse der Modellergebnisse sowie die Möglichkeit, Daten und Ergebnisse für ihre Verwendung in anderen Werkzeugen (z. B. für die numerische Grundwassermodellierung) aufzubereiten.

Der Begriff der **Geo-Objekte** wurde im Zusammenhang mit der geologischen 3D-Modellierung bereits von RAPER (1989) eingeführt. Er unterscheidet dabei zwei unterschiedliche Arten von Geo-Objekten:

- Geo-Objekte, die eine diskrete räumliche Identität besitzen, wie einzelne Gesteinseinheiten oder Störungsflächen (*sampling-limited geo-objects*), und
- Geo-Objekte, deren räumliche Ausdehnung und Gestalt von einem vorgegebenen Schwellen- bzw. Grenzwert definiert wird (*definition-limited geo-objects*), wie zum Beispiel Schadstofffahnen, Erzgehalte oder sedimentäre Faziesräume.

Wenn im Folgenden von Geo-Objekten die Rede ist, bezieht sich dieser Begriff ausschließlich auf modelltechnisch erfassbare, geologische Erscheinungen mit Raumbezug. Im engeren Sinn sind hier geologische Schicht- bzw. Grenzflächen sowie Volumenkörper gemeint.

Als **Raster** oder **Grids** (Gitter) werden hier Flächen und Volumina verstanden, die über zwei- bzw. dreidimensionale, in der Regel zusammenhängende Zellen definiert sind. Raster- oder Grid-Zellen beschreiben somit in ihrer Gesamtheit im Fall von Flächen ein zweidimensionales, im Zusammenhang mit Volumina ein dreidimensionales Gitternetz. Raster oder Grids sind in den meisten Fällen strukturiert. Das heißt, Geometrie und Größe der einzelnen Zellen sind entweder konstant oder aber ihre Veränderung folgt einer festen Regel und kann so beispielsweise mittels eines mathematischen Ausdrucks beschrieben werden. Dagegen kann die Geometrie von unstrukturierten Grids nicht mit Regeln definiert werden. Größe und Form der einzelnen Zellen können stark variieren. Die Vernetzung der Zellen bzw. Stützpunkte zu einem zusammenhängenden Gitternetz kann nur mit Hilfe von zusätzlichen Topologieinformationen erfolgen.

3.1.2 Stand der Forschung

Im Zusammenhang mit geologischen Fragestellungen sind 3D-Modelle seit Langem etabliert. So nutzt die Ölindustrie bereits seit den 30er Jahren des 20. Jahrhunderts geologische 3D-Modelle. Dagegen ist die Erstellung von 3D-Modellen der oberflächennahen Gesteinsfolgen, und im Besonderen glazigener Bildungen, relativ neu. Die Herausforderung besteht hierbei oft

in der Erfassung und der Wiedergabe von komplexen geologischen Verhältnissen, wie sie von glazialen Ablagerungen und Erosionsprozessen herrühren (BERG & KEEFER, 2004).

Auf dem Gebiet der geologischen 3D-Modellierung existiert eine Reihe hochentwickelter Softwarelösungen, die auf unterschiedlichen methodischen und modelltechnischen Ansätzen basieren. Obwohl der Ursprung der meisten Anwendungen in den Bereichen der Rohstoffindustrie zu suchen ist, werden digitale geologische 3D-Modelle heute auch zunehmend auf dem Gebiet der angewandten Geowissenschaften genutzt (CULSHAW, 2005; WYCISK et al., 2005a; SOBISCH & BOMBIEN, 2003; ROSENBAUM, 2003).

RUSSELL et al. (2005) weisen auf das Phänomen hin, dass sich bezüglich der geologischen 3D-Modellierung in den Anwendungsgebieten der Rohstoffindustrie zwar ein umfangreiches Wissen entwickelt hat, dagegen aber im Hinblick auf die Modellierung oberflächennaher quartärer Schichtenfolgen und vergleichbarer Ablagerungen umfassende Erfahrungen und Kenntnisse fehlen (vgl. auch BERG & THORLEIFSON, 2001).

Nach BERG & KEEFER (2005) lassen sich jedoch die Techniken der 3D-Modellierung, wie sie in der Rohstoffindustrie zur Anwendung kommen, grundsätzlich auf die Modellierung von oberflächennahen Schichtenfolgen übertragen. Allerdings erfordert die meist deutlich stärker ausgeprägte horizontale und vertikale Heterogenität dieser Abfolgen ein weitaus höheres Maß an Detaildarstellung und Genauigkeit.

RUSSELL et al. (2005) sowie BERG & KEEFER (2004) stellen die Bedeutung konsistenter, detaillierter geologischer Modelle für die Grundwassermodellierung heraus. Als problematisch sehen BERG et al. (2007) in diesem Zusammenhang jedoch die Tatsache, dass in zahlreichen hydrogeologischen Modellen die komplexe geologische Situation und damit ihr Verständnis nicht ausreichend repräsentiert ist.

Dabei sind in der jüngeren Vergangenheit Entwicklungen bzw. Anpassungen einzelner Softwarelösungen zu beobachten, die das Ziel verfolgen, den Fragestellungen und Anforderungen aus den Bereichen der Hydrogeologie, Umweltgeologie, Umweltchemie, Ingenieurgeologie und Geotechnik Rechnung zu tragen. So berichtet TURNER (2006) über einen Trend, dass ursprünglich für die Rohstoffindustrie entwickelte Modellierwerkzeuge zunehmend auch wertvolle Methoden und Mittel für die Behandlung von Aspekten der angewandten Geowissenschaften bereitstellen.

Eine dreidimensionale Modellierung und Charakterisierung des geologischen Untergrundes ist nach TURNER (2003a) auf einen der folgenden drei Schwerpunkte ausgerichtet:

- Modellierung bzw. Darstellung der Geometrie von Geo-Objekten,
- Darstellung der räumlichen Heterogenität mittels Simulationen,
- Vor- und Aufbereitung von Daten in Verbindung mit ihrer Verwendung in numerischen Modellen.

Im Besonderen macht TURNER (2003b, 2006) die folgenden Eigenschaften von Geo-Objekten dafür verantwortlich, weshalb für ihre Erfassung, Modellierung und Visualisierung spezialisierte Softwarelösungen benötigt werden:

- komplexe Geometrie und topologische Beziehungen,
- Skalen-Abhängigkeit und hierarchische Beziehungen,
- undeutliche bzw. nur schwer definierbare Grenzen in Verbindung mit einer komplexen räumlichen Variabilität und
- Heterogenität und Anisotropie innerhalb der Geo-Objekte selbst.

Die ausgesprochene Spezialisierung der verschiedenen Modellierwerkzeuge führte zu einer Entwicklung unterschiedlicher methodischer und modelltechnischer Ansätze. In diesem Zusammenhang beschreiben WEBB & DAVIS (1998) die Problematik, in Abhängigkeit einer formulierten Zielstellung (z. B. geologisches Strukturmodell, hydrogeologisches Modell) ein geeignetes Modellierungskonzept bzw. Modellierwerkzeug auszuwählen. Weiter stellen sie die Schwierigkeiten heraus, die mit der Übertragung der natürlichen heterogenen Verhältnisse in die Modellebene verbunden sind.

ROSENBAUM (2003) sieht diese Problematik ebenfalls, zusammen mit der Erfassung von Unsicherheiten, welche mit der räumlichen Interpretation von geologischen Daten und Eigenschaften einhergehen, als eine der wesentlichen Einschränkungen für eine verbreitete Nutzung von geologischen Untergrundmodellen.

Zudem benennt ROSENBAUM (2003) sieben wichtige Aspekte, welche die entscheidenden wissenschaftlichen Fragen bei der Charakterisierung des geologischen Untergrundes zusammenfassen und die in den nächsten Jahren Gegenstand wissenschaftlicher Forschung sein werden. Diese Schwerpunkte werden von EVANS (2003) näher diskutiert und ebenfalls von CULSHAW (2005) aufgegriffen:

- Die Entwicklung von Möglichkeiten, mit denen die extreme Komplexität des geologischen Untergrundes digital erfasst und mit Hilfe der begrenzten Ressourcen der Rechentechneik repräsentiert werden kann.
- Das Erreichen einer verbesserten Umsetzung von wissensbasierten Vorstellungen in die digitale Umgebung (Erfassung und Wiedergabe) sowie die darauf basierende Manipulation geologischer Informationen.
- Die Entwicklung von Möglichkeiten, mit denen die Unterschiede zwischen der digitalen Repräsentation und dem realen Phänomen charakterisierbar, modellierbar, zusammenfassbar und zu visualisieren sind (Erfassung und Darstellung von Unsicherheiten).
- Entwicklung von Konzepten, mit deren Hilfe auf die zunehmende Menge an zusammengetragenen und archivierten Daten sowie auf den steigenden Umfang des Daten-

inhalts reagiert werden kann und die Anforderungen komplexer Analysen zu erfüllen sind.

- Das Erstellen von Simulationen geologischer Phänomene, welche sich wie ihr natürliches (reales) Gegenstück verhalten.
- Die Rolle des Geowissenschaftlers als Informationslieferant. Sie stellt in Verbindung mit der Erstellung und der Verwendung von Modellen erhöhte Anforderungen an eine Zweckorientierung.
- Eine klare Formulierung von Sinn und Zweck der Modellierung durch den Anwender. Dies ermöglicht die Erarbeitung einer Anforderungsbeschreibung, welche sicherstellen soll, dass das Modell sowohl im Hinblick auf die formulierte Zielstellung als auch für weitere Anwendungen geeignet ist.

RUSSELL et al. (2005) weisen auf die Anwendung unterschiedlicher Philosophien bei der Modellerstellung hin. Probleme ergeben sich hierbei oft aus der Anforderung, möglichst realitätsnahe Modelle zu entwickeln, auch wenn adäquate Daten nicht in ausreichendem Maße vorhanden sind.

WYCISK et al. (2008, 2009) beschreiben unter anderem die Auswirkungen der Verwendung verschiedener methodischer Ansätze auf die Ergebnisse der geologischen 3D-Modellierung. Weiter wird in diesem Zusammenhang die Bedeutung für die Nutzung von geologischen 3D-Modellen in weiterführenden Anwendungen, wie zum Beispiel der numerischen Grundwassermodellierung oder bei der Entwicklung von Sanierungsstrategien, diskutiert. In diese Publikationen sind Zwischenergebnisse der vorliegenden Arbeit eingeflossen.

SAKSA et al. (2003) beschäftigen sich mit der Analyse von Unsicherheiten bei der Modellierung geologischer Strukturen. Sie unterteilen diesbezüglich die wesentlichen Ursachen, in denen Unsicherheiten ihren Ursprung haben, in zwei Gruppen:

- Unsicherheiten, verbunden mit der Datenaufnahme (Fehler in den Daten, Einschränkungen und Einflüsse bei der Probennahme, unterschiedliche Skalierung) und
- konzeptionell bedingte Unsicherheiten (verbunden mit strukturbezogenen Geometrien und Eigenschaften sowie multivalenten Lösungen von Geometrie und Parametrisierung).

EVANS (2003) betrachtet die Unsicherheiten auf einer allgemeineren Ebene der geowissenschaftlichen Modellierung und sieht ihre Ursachen ebenfalls in den Daten und deren Messung sowie im verwendeten Modellierprozess begründet.

Darüber hinaus nutzen neben Geowissenschaftlern zunehmend auch Anwender mit weniger detaillierten geologischen Kenntnissen die auf dem Markt verfügbaren Programme für die Erstellung geologischer Untergrundmodelle (GAU, 2005). Dies kann unter Umständen zu fehlerhaften Modellen und Interpretationen führen. Insbesondere auf solchen Modellen basieren-

de Aussagen sind kritisch zu sehen, da mögliche Fehler von den Anwendern oft nicht als solche erkannt werden.

Entsprechend den zahlreichen, oben aufgeführten Aspekten und Problemstellungen soll die vorliegende Arbeit unter anderem einen Beitrag zur Bewertung von Modellierungskonzepten im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit bei der Modellierung von komplexen, oberflächennahen geologischen Strukturen liefern und somit helfen, konzeptionelle Fehler zu vermeiden und Unsicherheiten zu verringern. Denn die Gültigkeit bzw. Richtigkeit der erstellten Modelle hängt neben der Qualität der zugrunde liegenden Daten in hohem Maße auch vom verwendeten Modellierungskonzept bzw. Modellierprozess ab.

3.2 Repräsentationsformen des geologischen Untergrundes

Im Zuge der Entwicklung der geologischen 3D-Modellierung haben sich durch die unterschiedlichen Anforderungen verschiedener geowissenschaftlicher Arbeitsgebiete mehrere grundlegend verschiedene Arten der räumlichen Repräsentation der Geometrie von Geokörpern entwickelt. Im Wesentlichen lassen sich hierbei Drahtmodelle, (Schicht-) Flächenmodelle und Volumenmodelle unterscheiden (REINSDORFF, 2003).

3.2.1 Drahtmodelle

Draht- oder Kantenmodelle stellen die einfachste Form dar, um Geokörper im 3D-Raum zu beschreiben. Sie sind ein Sonderfall der so genannten Randrepräsentation (vgl. unten), mit Kanten, die als Begrenzungselemente fungieren (BREUNIG, 2005). Bei Drahtmodellen werden Flächen oder Körper mittels Punkten (Knoten/*Vertices*) und Polylinien (Linienzüge) repräsentiert. Nach REINSDORFF (2003) sind Drahtmodelle in zahlreichen Systemen integriert. Sie dienen in diesem Fall, eingebettet in einer graphischen Benutzeroberfläche, zur Dateneingabe und Manipulation von Geo-Objekten. Ein Nachteil von Drahtmodellen ist jedoch ihre unzureichende topologische Information. Diese reicht in der Regel nicht aus, um die Gestalt von Flächen oder Körpern eindeutig zu beschreiben und lässt somit oft mehrere Interpretationen zu. So zeigt Abbildung 3.1 deutlich, dass das dargestellte Drahtmodell verschiedene Varianten für die Interpretation eines Volumenkörpers zulässt.

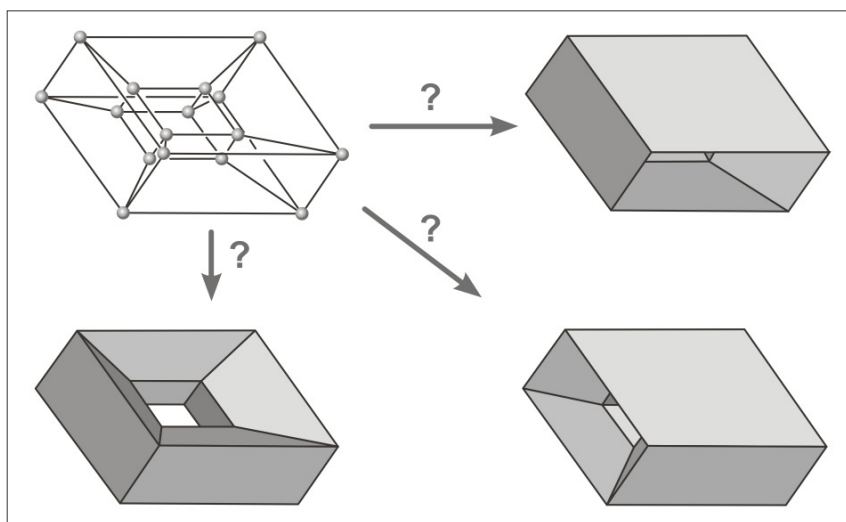


Abb. 3.1: Ein Beispiel für die Mehrdeutigkeit eines einfachen Drahtmodells, welches ausschließlich über die Verbindungen von Knotenpunkten definiert ist. Dieses Modell lässt die Interpretation von mehreren Volumenkörpern zu (verändert nach MALLET, 2002).

3.2.2 Flächenmodelle

Bei der Flächenmodellierung unterscheidet REINSDORFF (2003) vektor- und rasterbasierte Methoden. Zu den vektorbasierten Flächenmodellen zählen zum Beispiel TINs (*Triangular Irregular Networks*). Hierbei spannen benachbarte Punkte finite Dreiecksflächen auf, die wiederum zu einem irregulären Dreiecksnetz verknüpft sind. Im Gegensatz dazu wird bei Raster- oder Gridmodellen die Fläche mittels Quadraten oder Rechtecken gleicher Größe diskretisiert.

Im Vergleich zu Raster- oder Gridmodellen können TINs bei der Konstruktion geologischer Flächen in Abhängigkeit des genutzten Interpolationsverfahrens genauere Ergebnisse liefern. So lassen sich in TINs in der Regel neben den ursprünglichen Knotenpunkten (*Vertices*) zusätzliche Stützpunkte platzieren, die deckungsgleich mit der Lage der Basisdaten (z. B. Position von Bohrungen oder Ausbisslinien) sind. Somit kann die Geometrie eines TINs exakt an die entsprechende Datengrundlage angepasst werden. Im Vergleich dazu ist in einem Flächenmodell, welches auf einem Raster oder Grid basiert, die Position der Knotenpunkte gemäß einer horizontalen Auflösung genau definiert und kann somit nicht an die Lage der Basisdaten angepasst werden (vgl. Abb. 3.2). Dabei kann eine Erhöhung der horizontalen Auflösung des Gitters dazu beitragen, den Abstand zwischen Stützpunkten und Eingangsdaten zu verringern, was zu einer Verbesserung der Interpolationsergebnisse führen kann. Jedoch resultiert bereits eine Verdopplung der horizontalen Auflösung in einer Vervierfachung der Stützpunkte. Somit stellt die Wahl der horizontalen Auflösung eines Rasters in der Regel fast immer einen Kompromiss zwischen gewünschter Genauigkeit und Handhabbarkeit der resultierenden Datenmenge dar.

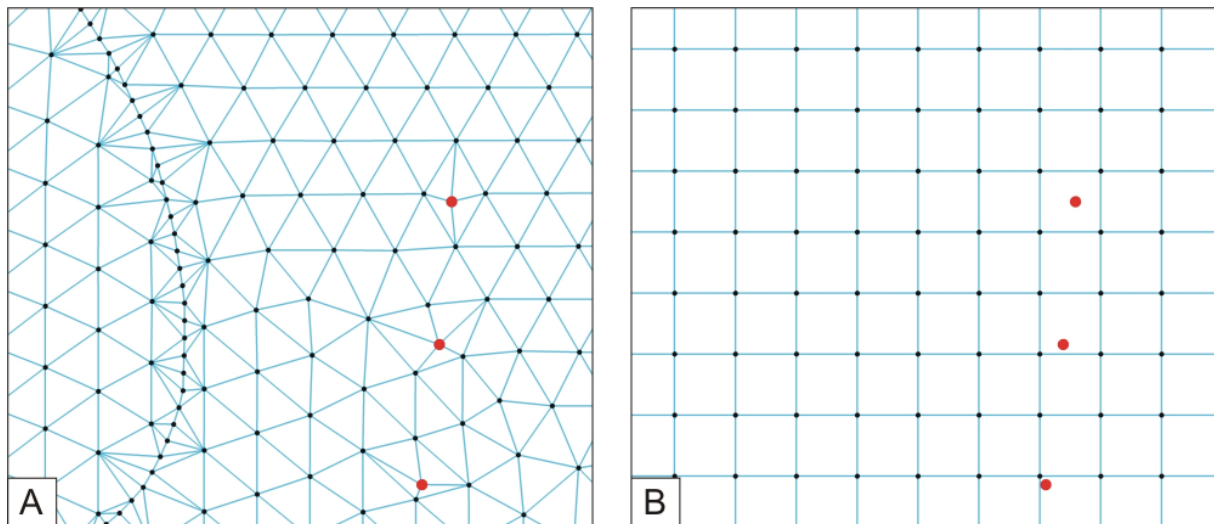


Abb. 3.2: Flexibilität eines TINs im Vergleich zu einem regelmäßigen Raster. A zeigt einen Ausschnitt eines an die Bohrlokalitäten (rot) und die oberflächige Verbreitung geologischer Einheiten angepassten TINs. Unter B ist die Situation dargestellt, wie sie sich unter Verwendung eines regelmäßigen Grids bzw. Rasters ergibt.

Ein häufiges Problem bei der Flächendarstellung über Raster oder Grids ist, dass zahlreiche Systeme eine echte 3D-Fähigkeit vermissen lassen. Das entsprechende Flächenmodell bedingt in diesen Fällen, dass zu jeder XY-Koordinate ausschließlich eine Z-Koordinate existieren

darf. Demzufolge ist in diesem Zusammenhang eher von 2,5D-Modellen als von echten 3D-Modellen zu sprechen.

Eine weitere Form von Flächenmodellen, welche allerdings weniger häufig bei der Modellierung des geologischen Untergrundes zur Anwendung kommt, stellen die so genannten NURBS (*Non-Uniform Rational B-Splines*) dar (Abb. 3.3). NURBS zeichnen sich dadurch aus, dass die Darstellung der Geometrieinformation über stückweise funktional definierte Geometrieelemente erfolgt. Die Gestalt einer NURBS-Fläche wird durch ein Netz von Kontrollpunkten oder -kurven gesteuert. Solche Kontrollelemente können zum Beispiel von konstruierten Profilschnitten, seismischen Interpretationen oder Bohrinformationen stammen. Eine Wichtung der einzelnen Kontrollelemente steuert dabei, wie stark jedes dieser Elemente auf die resultierende Gestalt der Fläche wirkt. Für die Modellierung komplexer Flächengeometrien kann die Gesamtfläche in kleinere, einfachere Elemente zerlegt werden. Stetigkeitsbedingungen stellen hierbei sicher, dass die einzelnen Flächenelemente kontinuierlich und lückenlos aneinander grenzen. Beispiele für die Verwendung von NURBS bei der geologischen 3D-Modellierung geben unter anderem FISHER & WALES (1992), SPRAGUE & DE KEMP (2005), ZHONG et al. (2007) und TONINI et al. (2009).

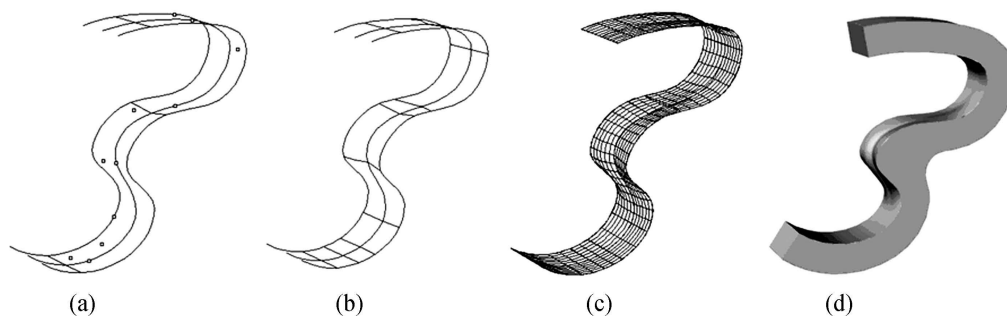


Abb. 3.3: Geometrische Modellierung einer Faltenstruktur unter Verwendung von NURBS. (a) Datengrundlage (Kontrollelemente); (b) zusätzliche Profil- bzw. Kurvensegmente (Kontrollelemente); (c) NURBS-Fläche; (d) Volumenmodell, erstellt aus NURBS-Flächen (aus ZHONG et al., 2007).

Neben den oben aufgeführten Darstellungsformen von Flächenmodellen existieren besonders im Bereich der Raster bzw. Grids weitere Formen und sogar Übergänge zwischen einigen Typen. So beschreiben CAUMON et al. (2005) unstrukturierte Grids, die es im Vergleich zu strukturierten Grids ermöglichen, die Heterogenität des geologischen Untergrundes genauer abzubilden. Die entsprechenden Grids lassen sich in ihrer Geometrie so anpassen, dass Bereiche mit hoher räumlicher Variabilität ausreichend und effizient erfasst werden können, während homogene Bereiche durch einfachere Gridelemente und eine geringere horizontale Auflösung abgebildet werden. Bei strukturierten Grids ist die Basisgeometrie durch die Regelmäßigkeit vorgegeben. Sie benötigen somit keinerlei flächeninterne topologische Informationen.

Dagegen muss in unstrukturierten Grids die Topologie explizit definiert werden. Das heißt, es muss ein Datensatz existieren, der festlegt, mit welchen weiteren Stützpunkten jeder einzelne Knotenpunkt vernetzt wird, um ein (Flächen-) Element aufzuspannen. Dies hat zur Folge,

dass bei einem unregelmäßigen Grid der Speicherbedarf deutlich größer ist als bei einem regelmäßigen, strukturierten Grid mit vergleichbarer Auflösung. Einen schematischen Überblick zur Klassifizierung von Grid-Typen gibt Abbildung 3.4.

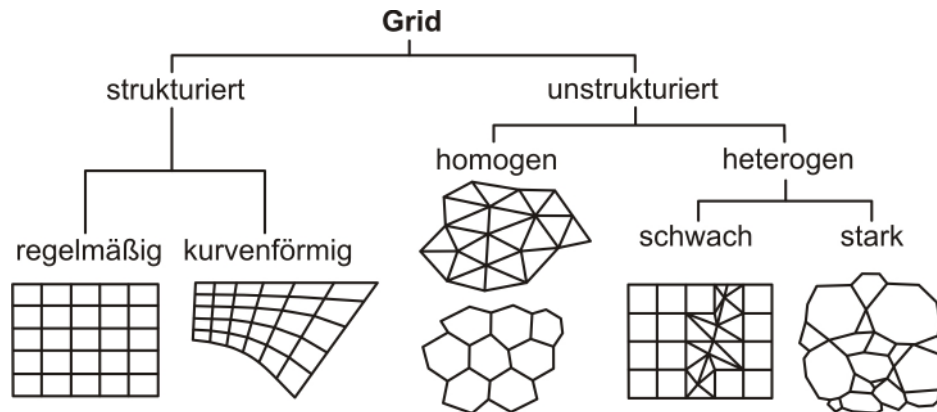


Abb. 3.4: Klassifizierung der verschiedenen Grid-Typen (verändert nach CAUMON et al., 2005).

3.2.3 Volumenmodelle

Im Hinblick auf die Darstellung von geologischen Volumenkörpern im 3D-Raum lassen sich ebenfalls verschiedene (Daten-) Modelle unterscheiden. Im Folgenden werden die wichtigsten vektorbasierten, zerlegenden, analytischen und hybriden Repräsentationen näher betrachtet.

Vektorbasierte Repräsentation:

Zu den vektorbasierten Repräsentationen zählt die so genannte Randdarstellung, welche in der Literatur oft als *Boundary Representation* oder kurz *BRep* bezeichnet wird. Bei dieser Form der Volumendarstellung wird ein Körper über seine äußeren Flächen, Kanten und Stützpunkte beschrieben. Das Drahtmodell ist somit ein Sonderfall dieser Repräsentation. Eine entsprechende Topologieinformation stellt sicher, dass die Darstellung konsistent, das heißt ohne Lücken und Überlappungen, erfolgt. Als Nachteile dieser Art der Repräsentation werden das Fehlen von topologischen Beziehungen und Informationen bezüglich des Volumeninhalts sowie Schwierigkeiten beim Ausführen von Mengenoperationen angesehen.

Nach CAUMON et al. (2004) bietet die Randdarstellung jedoch ausreichend Flexibilität, um auch komplexe geologische Situationen abbilden zu können.

Zerlegende Repräsentation:

Bei der zerlegenden Repräsentation wird der Raum in eine Menge primitiver Geometrieelemente zerlegt. Hierbei können irreguläre Zellzerlegung (*Cell-Decomposition*) und Enumerationsverfahren (*Spatial Occupancy Enumeration*) unterschieden werden. Bei der irregulären Zellzerlegung werden Volumenkörper aus Zellen unterschiedlicher Geometrie (z. B. Würfel, Quader, Tetraeder, Prismen) und Größe aufgebaut, weshalb die entsprechenden Netze im eng-

lischen Sprachgebrauch oft als *Unstructured Meshes* bezeichnet werden (vgl. TURNER, 2006). Enumerationsverfahren zerlegen dagegen den Raum in Zellen identischer Geometrie (Würfel bzw. Voxel). Die entsprechenden 3D-Gitter werden demzufolge als *Structured Meshes* bezeichnet. Die Geometrielemente sind dabei in einem festen, regulären Raumgitter organisiert und durch einen eindeutigen Code adressiert. Beiden Repräsentationen gemein ist die Eigenschaft, dass die beteiligten Geometrielemente oder Zellen adjazent und verbunden sind, das heißt, sie schneiden und überlappen sich nicht.

Die irreguläre Zellzerlegung bietet die Möglichkeit, die Gestalt eines Geokörpers durch geeignete Wahl von Zellgeometrien genau abzubilden (Abb. 3.5). Allerdings steigt die Komplexität geometrischer Algorithmen mit zunehmender Variabilität der primitiven Zellen. Dagegen lassen sich mit herkömmlichen Enumerationsverfahren Volumenkörper nur annähernd korrekt abbilden, da das Auflösungsvermögen eines 3D-Gitters, welches aus gleich großen Zellen besteht, begrenzt ist.

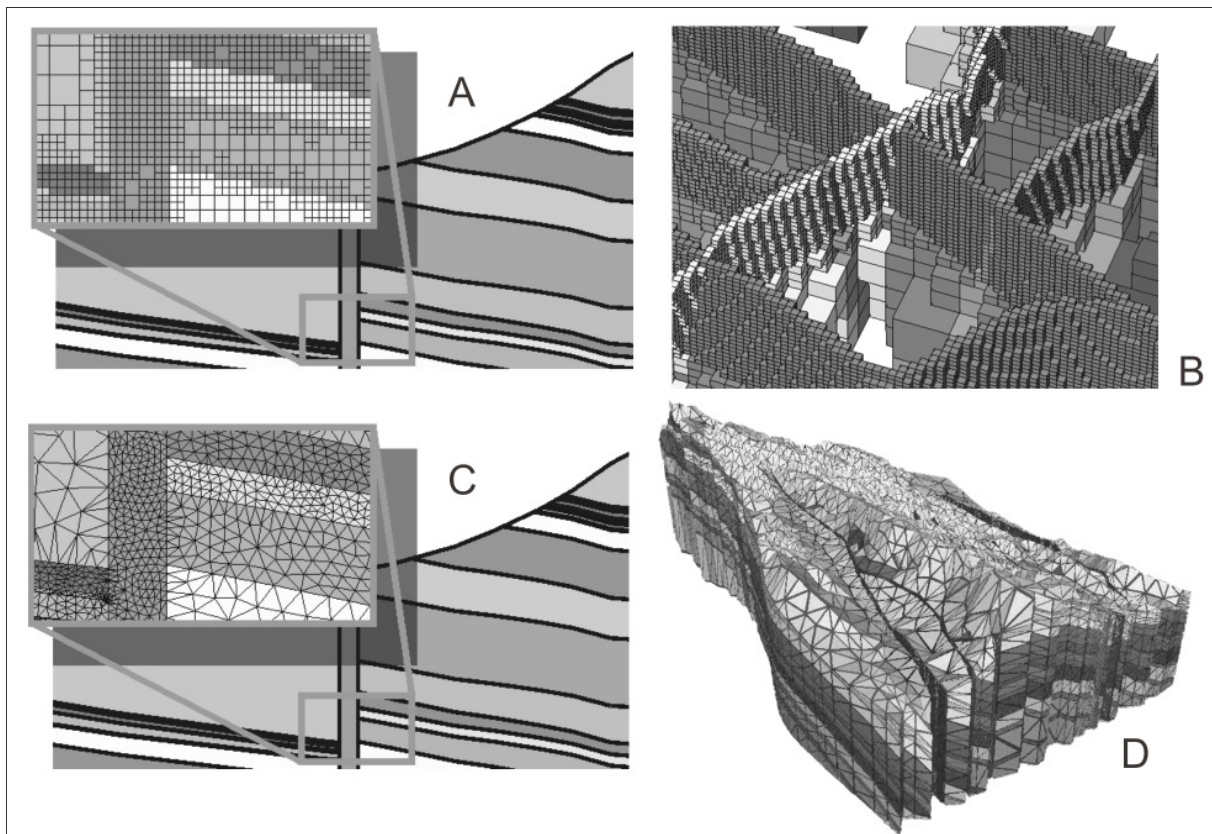


Abb. 3.5: *Octree*-Modell und irreguläre Zellzerlegung. Mit Enumerationsverfahren können Geokörper nur annähernd korrekt abgebildet werden (A & B). Die irreguläre Zellzerlegung ermöglicht dagegen eine genauere Approximation von Volumenkörpern (C & D). A - beispielhafte Schnittdarstellung auf Basis eines *Octree*-Modells; B - *Octree*-Modell von steil einfallenden Störungselementen; C - beispielhafte Schnittdarstellung auf Basis der irregulären Zellzerlegung; D - Volumenmodell, aufgebaut aus irregulären Elementarzellen. Quelle der Teilabbildungen: GABLE, C., Los Alamos National Laboratory (LANL).

Eine Erweiterung des Enumerationsverfahrens stellen die so genannten *Bintrees* und *Octrees* dar. Während beim *Bintree*-Verfahren ausgewählte Zellen des 3D-Gitters hierarchisch in zwei

gleich große Zellen unterteilt werden, werden bei der Anwendung des *Octree*-Verfahrens die Zellen rekursiv in acht Oktanten geteilt, welche sich wiederum zerlegen lassen (Abb. 3.5 und 3.6). Aus diesem Grund besitzen *Octree*-Strukturen stets kubische Elementarzellen. *Bintree*-Strukturen können sowohl aus Quadern als auch aus Würfeln aufgebaut sein. Mit Hilfe beider Verfahren ist es möglich, Bereiche hoher Variabilität mit einer adäquaten Diskretisierung abzubilden, während Homogenbereiche mit einer geringeren Auflösung dargestellt werden können. DUNSTAN & MILL (1989) benennen diese Form der Repräsentation als *variables Blockmodell* und beschreiben dessen Anwendung und Vorteile im Hinblick auf die Modellierung geologischer 3D-Körper.

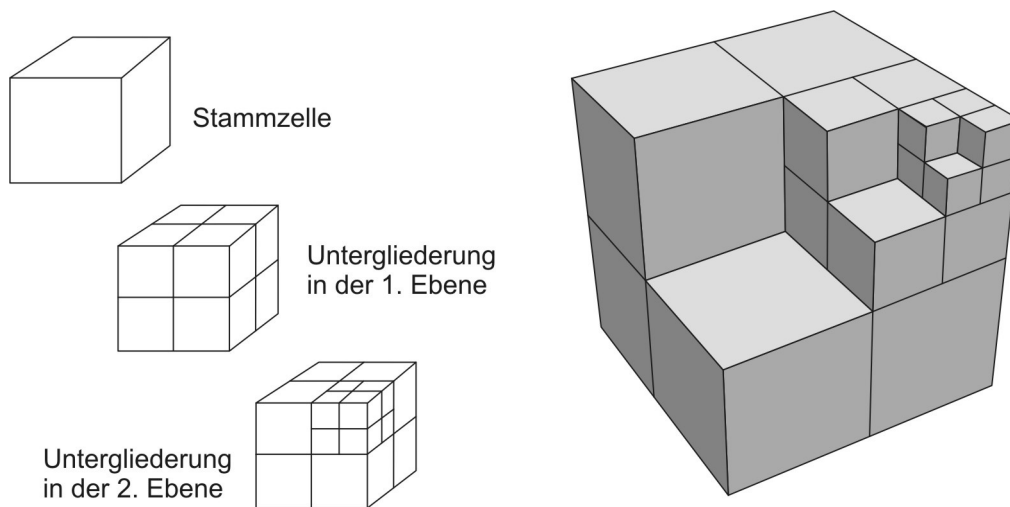


Abb. 3.6: Das Prinzip des *Octree*-Verfahrens schematisch dargestellt. Die Untergliederung des 3D-Gitters erfolgt auf einer hierarchischen Ebene rekursiv und kann den Erfordernissen der abzubildenden Situation angepasst werden.

Erweiterte *Octree*-Modelle bieten heutzutage eine Möglichkeit, auch mit Enumerationsverfahren Geokörper genau abzubilden. BURNET (1992) und TURNER (2006) beschreiben in diesem Zusammenhang deformierbare, flexible Voxel bzw. *Octrees*, welche auch als *Polytrees* oder *Extended Octrees* bezeichnet werden. Durch die Einführung von zusätzlichen (Stütz-) Punkten (*Face Nodes* für Flächen, *Edge Nodes* für Kanten und *Vertex Nodes* für Punktinformationen (vgl. BURNET, 1992)) können diese in ihrer Gestalt der Geometrie von Geokörpern angepasst werden.

Wie bei Flächenmodellen, so existieren auch bei den Volumenmodellen kurvenförmige (*curvilinear*) 3D-Gitter und Netze. Hierbei werden Volumina durch Zellen variabler Höhe repräsentiert. Bei geologischen Anwendungen entspricht diese meist der (scheinbaren) Mächtigkeit der modellierten Geokörper. Variable Höhe heißt in diesem Fall nicht, dass ausschließlich die Höhe der Zellen an die Mächtigkeitsverteilung eines Schichtkörpers angepasst wird, sondern auch die Neigung ihrer Top- und Basisflächen (vgl. Abb. 3.7). In der Regel erfolgt die Volumenbildung durch eine einfache vertikale Vernetzung der Ober- und Unterkante eines Geokörpers. Als Bedingung gilt hierbei, dass die entsprechenden Grenzflächen eine identische

Geometrie besitzen. Das heißt, ihre Stützpunkte müssen in der XY-Ebene deckungsgleich sein und beide Flächen werden durch eine identische Anzahl von Stützpunkten repräsentiert. Oft besteht auch die Möglichkeit, in vertikaler Richtung eine zusätzliche Diskretisierung der Zellen vorzunehmen. Diese Form der Volumenrepräsentation ist im geologischen Anwendungsbereich weit verbreitet und in den meisten Modellierwerkzeugen implementiert. Sie bildet oft auch die Grundlage für weiterführende numerische Berechnungen auf der Basis der Finite-Differenzen- oder Finite-Elemente-Methode (z. B. Modellierung der Grundwasserströmung, Transportmodellierung). Allerdings ist diese Art der Repräsentation vornehmlich für die Darstellung von lagenförmig ausgebildeten Geokörpern (z. B. Sedimente) geeignet.

Wie auch bei der Repräsentation von Flächen durch Raster und Grids, fehlt in vielen Modellierwerkzeugen, welche diese Form der Volumengenerierung unterstützen, eine echte 3D-Fähigkeit. Dies ist besonders im Zusammenhang mit der Darstellung komplexer Strukturen problematisch, deren Geometrie durch Flächen beschrieben wird, die zu einer definierten XY-Koordinate mehrere Z-Koordinaten besitzen können (überkippte Falten, Diapirstrukturen, Intrusivkörper, steil einfallende Störungsflächen).

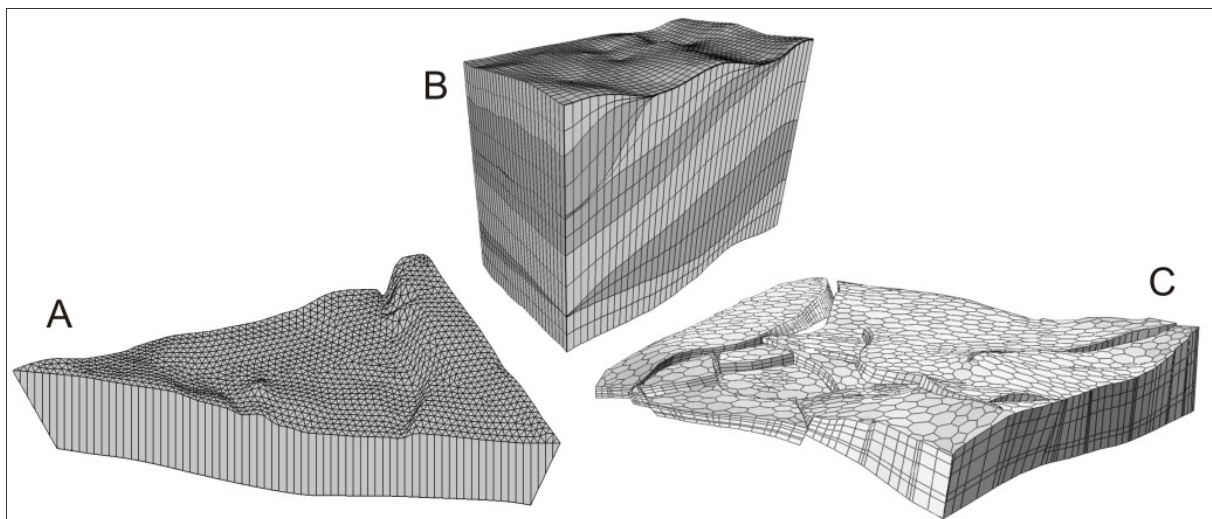


Abb. 3.7: Beispiele für 3D-Gitter mit unterschiedlichen Basisgeometrien (A - TIN, unstrukturiert; B - regelmäßiges Raster; C - polygonales, unstrukturiertes Grid), die jeweils an die Gestalt der abzubildenden Schicht- bzw. Volumenkörper angepasst wurden. C wurde nach MALLETT (2002) und ROYER (2004) modifiziert.

Analytische Repräsentationen:

Zu den analytischen Repräsentationen zählt BREUNIG (2005) solche, mit denen anhand von Funktionen und Parametern aus Freiformflächen bestehende Geometrien beschrieben werden können. Nach dieser Definition zählen die unter den Flächenmodellen beschriebenen NURBS ebenfalls zu dieser Art der Darstellung. Auch die Randrepräsentation (*Boundary Representation*) kann eine analytische Repräsentation sein, wenn die Begrenzungselemente nicht durch Vektoren definiert sind, sondern durch analytische Funktionen oder Interpolations- und Approximationsverfahren beschrieben werden.

Bei der so genannten *Sweep*-Repräsentation werden Körper durch Translation, Rotation oder Trajektion einer 2D-Geometrie erstellt (SIDES, 1997; BREUNIG, 2005). Zudem ist auch eine Kombination von mehreren *Sweeps* möglich, so dass auch komplexere Körper dargestellt werden können. Allerdings sind die Möglichkeiten hinsichtlich der Anwendung einer *Sweep*-Repräsentation bei der geologischen 3D-Modellierung recht eingeschränkt, da die Heterogenität der meisten Geokörper eine Anwendung dieser Form der Volumendarstellung ausschließt. Interessant kann diese Art der Repräsentation allerdings bei der Darstellung von untertägigen Infrastrukturen (Tunnel, Kanalisation) oder auch Grubengebäuden und Abbaustrecken sein (Abb. 3.8).

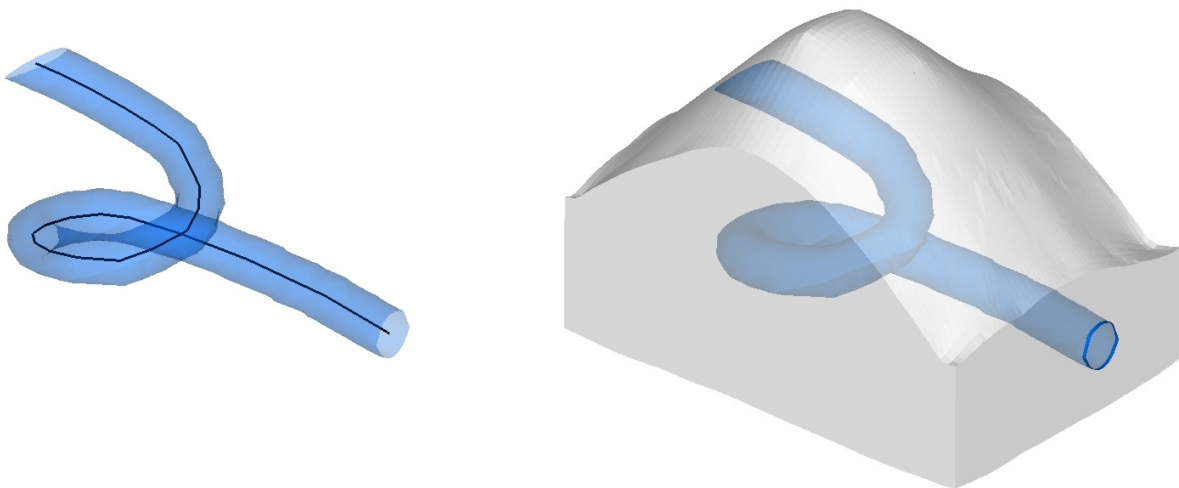


Abb. 3.8: Das Prinzip der *Sweep*-Repräsentation am Beispiel eines Tunnels. Die Tunnelgeometrie lässt sich zum Beispiel durch Trajektion einer Kreisfläche entlang einer dreidimensionalen Kurve erstellen.

Eine weitere analytische Repräsentationsform stellt die Parametrisierte Repräsentation (*Primitive Instancing*) dar. Hierbei werden die Geometrien von vorgegebenen Objekten (Primitive) durch eine feste Anzahl von Parametern beschrieben (BREUNIG, 2005). Die Möglichkeiten der Modellierung hängen dabei in der Regel von einer vorgegebenen Auswahl von Primitiven ab, deren Gestalt von der Wahl der Parameter bestimmt wird. Exemplarisch sei auf das Beispiel eines Quaders (Objekt bzw. Primitivum) verwiesen, dessen Gestalt durch die Parameter Breite, Länge und Höhe definiert ist. Durch Kombination und Zusammenlegung mehrerer parametrisierter Primitive können auch umfangreichere Objekte dargestellt werden. Bei der geologischen 3D-Modellierung ist diese Form der Repräsentation allerdings kaum anwendbar, da sich komplexe und heterogene Geometrien nicht ausreichend genau mit Hilfe parametrisierter Primitive abbilden lassen.

Beim CSG-Prinzip (*Constructive Solid Geometry*) werden Volumenmodelle aus einfachen Volumenkörpern (z. B. Quader, Kegel, Zylinder, Torus) durch logische Mengen-Operationen (Vereinigung, Subtraktion, Verschneidung) hierarchisch strukturiert erstellt. Als weitere Operationen sind auch Translation, Rotation und Skalierung erlaubt (BREUNIG, 2005). Jedoch spielen die Verfahren der *Constructive Solid Geometry* für geologische Anwendungen nur eine untergeordnete Rolle, da die hier untersuchten geometrischen Körper im Allgemeinen

sehr unregelmäßig geformt sind (THOMSEN et al., 2005). Wie im Fall der *Sweep*-Repräsentation ist diese Art der Volumendarstellung vielmehr für die Erfassung von künstlich angelegten Strukturen oder Geokörpern geeignet.

3.2.4 Hybride Modelle

In der jüngeren Vergangenheit sind auch Forschungsaktivitäten und Entwicklungen zu beobachten, die eine Kombination von (unterschiedlichen) Volumen- und Flächenmodellen verfolgen. Ziel dieser Verknüpfung ist es, die Vorteile von verschiedenen räumlichen Datenmodellen zu nutzen bzw. die Auswirkung ihrer spezifischen Schwächen zu mindern. So soll zum Beispiel eine exakte Abbildung geometrischer Objekte gewährleistet, die Menge der zu verwaltenden Daten verringert und eine effizientere Anwendung Boole'scher Algorithmen unterstützt werden. ZHONG et al. (2007) beschreiben ein hybrides Datenmodell zur Darstellung von Volumenmodellen, welches die Strukturen von drei unterschiedlichen Flächenmodellen (NURBS, TINs und *Boundary Representation*) nutzt. WU (2004) verweist auf weitere gemischte Datenmodelle, die im Zusammenhang mit der Modellierung von Geo-Objekten verwendet werden. Er unterscheidet grundsätzlich vier Arten von kombinierten bzw. hybriden Datenmodellen, die je nach Anforderung an das zu modellierende Objekt zum Einsatz kommen: TIN-CSG, TIN-Octree, Drahtmodell-Blockmodell und Octree-TEN (*Tetrahedral Network*). Auch handelt es sich bei der Repräsentation über deformierbare, flexible Voxel bzw. *Octrees* (vgl. oben) prinzipiell um eine hybride Form der Darstellung, da hier *Octree*- und Randdarstellung (*BRep*) gewissermaßen kombiniert werden.

3.3 Methodische Konzepte und Verfahren bei der geologischen 3D-Modellierung

Die Erstellung digitaler geologischer 3D-Modelle kann unter Verwendung verschiedener methodischer Ansätze realisiert werden. Die Kernfunktion aller Konzepte zur geologischen 3D-Modellierung besteht jedoch in der Modellierung von Geokörpern als Bestandteile eines geologischen Basismodells (ELFERS et al., 2004).

Als methodische Ansätze oder Konzepte werden hier die grundlegenden Strukturen und Methodiken verstanden, welche in Modellierwerkzeugen implementiert sind und dem Zweck der Modellerstellung dienen.

GOSSEL (2008) untergliedert methodische Konzepte anhand ihrer zeitlichen Abhängigkeit generell in statische und dynamische Konzepte. Dabei dienen statische Konzepte zur Erstellung und Abbildung von weitgehend zeitinvarianten und damit raumorientierten Modellen. Dynamische Konzepte sind dagegen stark auf zeitabhängige Modellierungsziele, wie zum Beispiel die Erfassung und Abbildung des Transports von Stoffen in Atmosphäre, Boden und Grundwasser, ausgerichtet. Während rein statische Konzepte ausschließlich von räumlichen Aspekten geprägt sind, muss bei dynamischen Konzepten neben der zeitlichen oft auch eine räumliche Komponente einbezogen werden.

Da geologische 3D-Modelle in den meisten Fällen eine von der Zeit unabhängige räumliche Situation repräsentieren bzw. für einen betrachteten Zeitabschnitt fixe geologische Verhältnis-

se wiedergeben, lassen sich die entsprechenden Methoden zur Modellerstellung den statischen Konzepten nach GOSSEL (2008) zuordnen. Allerdings muss darauf verwiesen werden, dass es bei der geologischen 3D-Modellierung auch Übergänge zwischen statischen und dynamischen Konzepten geben kann. Gedacht sei hier zum Beispiel an die Rekonstruktion verfalteter Strukturen (vgl. DE DONATIS et al., 2009; ZANCHI et al., 2009) oder aber auch an die Simulation des Abbaus einer Lagerstätte, wo Veränderungen im 3D-Modell über die Zeit durchaus eine Rolle spielen können. Die vorliegende Arbeit befasst sich jedoch ausschließlich mit der Erstellung statischer geologischer 3D-Modelle, weshalb im Folgenden dynamische Konzepte nicht weiter betrachtet werden.

Auf dem Gebiet der (statischen) geologischen 3D-Modellierung können, in Abhängigkeit der in den verschiedenen Modellierwerkzeugen implementierten Möglichkeiten für den Anwender, in den Modellierprozess einzugreifen, **halbautomatische** und weitestgehend **automatisierte Verfahren** unterschieden werden (Abb. 3.9).

In den meisten Fällen werden dabei die geologischen Volumenkörper nicht direkt modelliert, sondern mit Hilfe geologischer Grenzflächen definiert. Das heißt, die eigentliche Modellierung zielt auf eine Anpassung der geometrischen Eigenschaften von Flächen ab. In Abhängigkeit der vom Modellierwerkzeug unterstützten, flächeninternen Topologiebeziehungen können im Zuge der Regionalisierung entweder 2,5D- oder echte 3D-Flächen erstellt werden. Lediglich die so genannte *Voxel-Modellierung* (JESSELL, 2001; CATTANI, 2004) lässt in gewissem Umfang eine direkte Volumenmodellierung zu.

Die im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit verwendeten Modellierwerkzeuge verfolgen allesamt den Weg der Modellbildung über geologische Schicht- bzw. Grenzflächen. Dabei unterstützt einzig GOCAD die Handhabung von echten 3D-Flächen. GSI3D, MVS, RockWorks und GMS beschränken sich auf die Erstellung von 2,5D-Flächen. Das heißt, hier kann jeder XY-Koordinate einer Fläche nur ein Z-Wert zugeordnet werden. Diese Eigenschaft kann besonders bei der Modellierung von Strukturen mit steil einfallenden oder überkippten Grenzflächen zu Problemen führen. Die Volumenbildung erfolgt dann entweder über die unter Kapitel 3.2.3 beschriebene *Randdarstellung (Boundary Representation)* oder eine mehr oder weniger komplexe, dreidimensionale Vernetzung der modellierten Grenzflächen zu einem 3D-Gitter.

Wenn im Folgenden Verfahren als interpretativ bezeichnet werden, so bezieht sich dies explizit auf den Prozess der Modellerstellung. Das heißt, diese Verfahren werden durch Informationen gestützt, die durch interaktive Interpretationsarbeit während der Modellierung generiert werden. Dabei wird nicht berücksichtigt, dass bereits die der Modellierung zugrunde liegenden Basisdaten selbst interpretierte Informationen darstellen können (stratifizierte Bohrungen, interpretierte seismische Daten, u.s.w.).

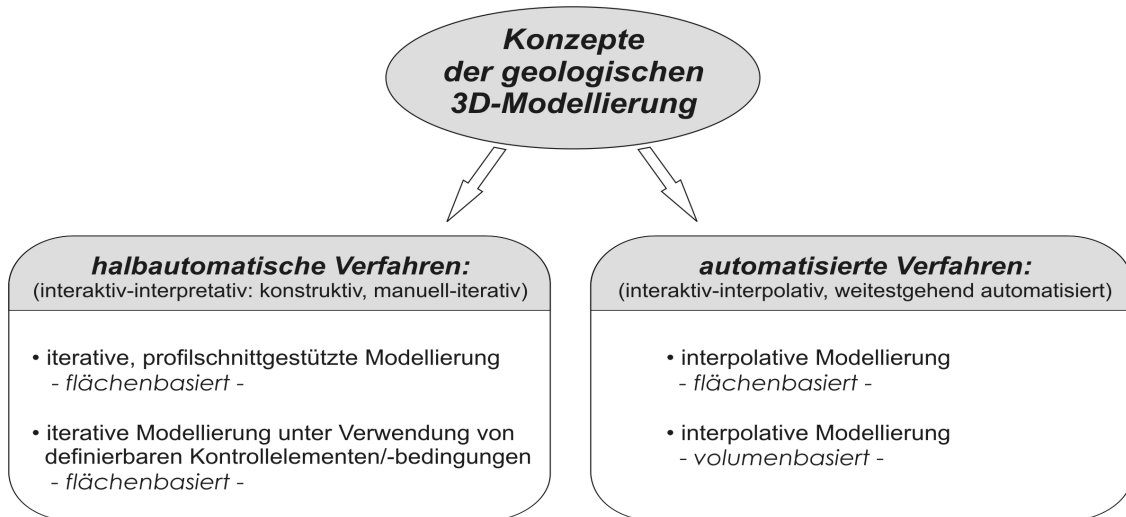


Abb. 3.9: Verfahren und methodische Ansätze bei der geologischen 3D-Modellierung.

3.3.1 Halbautomatische Verfahren

Halbautomatische Verfahren besitzen in der Regel einen interaktiven, interpretativen Charakter. Neben der eigentlichen Datenbasis („harte“ Daten) können vom Modellierer zusätzliche, deskriptive Informationen generiert oder auch Kontrollelemente und -bedingungen formuliert und interaktiv in den Modellierprozess eingebunden werden. Diese „weichen“ Daten haben somit ihren Ursprung in interaktiven Interpretationsarbeiten. Hierdurch können die Ergebnisse einer Modellierung entscheidend beeinflusst und den Vorstellungen des Modellierers angepasst werden. Beispielsweise liefern virtuell erstellte und in die Modellierung eingebundene Profilschnitte derartige, auf Interpretationen basierende Informationen. In Abhängigkeit vom Kenntnisstand des Bearbeiters stellt dies eine Möglichkeit dar, um geologischen Sachverstand und damit Expertenwissen in den Modellierprozess zu integrieren.

Da halbautomatische Verfahren auf eine durch den Modellierer unterstützte, schrittweise Modellerstellung ausgerichtet sind und zudem in verschiedenen Stadien der Modellierung ein hohes Maß an Interaktion zwischen Modellierer und Modellierwerkzeug bieten und bisweilen auch voraussetzen, können ihnen auch die Attribute konstruktiv und manuell-iterativ zugesprochen werden.

Allerdings ist es bei Anwendung dieser Verfahren oftmals der Fall, dass während der Modellerstellung „harten“ und „weichen“ Daten die gleiche Bedeutung beigemessen wird und somit im Zuge der Regionalisierung zwischen ihnen keine Differenzierung erfolgt. Dies hat in der Regel zur Folge, dass die entsprechenden Modellergebnisse unter alleiniger Berücksichtigung der ursprünglichen Datenbasis nur schwer reproduzier- und nachvollziehbar sind.

Bei den halbautomatischen Verfahren können, wie in Abbildung 3.9 dargestellt, im Wesentlichen zwei methodische Ansätze unterschieden werden:

- iterative, profilschnittgestützte Modellierung und
- iterative Modellierung über definierbare Kontrollelemente und -bedingungen.

In beiden Fällen erfolgt die Erstellung geologischer Volumenkörper über die Definition und geometrische Modellierung geologischer (Grenz-) Flächen. Eine gängige Vorgehensweise ist dabei die Generierung von Schichtunterkanten innerhalb der horizontalen Verbreitung der entsprechenden Schichtglieder, die im Anschluss für die Volumenbildung genutzt werden.

Bei der iterativen, profilschnittgestützten Modellierung werden zusätzliche, interpretative Informationen („weiche“ Daten) durch die Erstellung vernetzter Profilschnittserien generiert. Diese Informationen gehen dann zusammen mit der ursprünglichen Datenbasis („harte“ Daten) in den Modellierprozess ein. Die Kreuzungspunkte zwischen einzelnen Profilschnitten sowie zwischen Profilschnitten und Bohrungen dienen dabei der Plausibilitätsprüfung und zur Sicherstellung der Konsistenz der in die Modellierung einfließenden „harten“ und „weichen“ Daten.

Bei der iterativen Modellierung unter Verwendung definierter Kontrollelemente und Bedingungen werden zusätzliche Informationen durch die Auswahl, Definition und Wichtung von auf die Flächengeometrie wirkenden Elementen und Bedingungen geschaffen. Die Modellierung kann somit ebenfalls entsprechend den Vorstellungen und Interpretationen des Modellierers gesteuert werden und wird damit ebenfalls den halbautomatischen Verfahren zugeordnet.

Unter beiden vorgestellten halbautomatischen Ansätzen ist eine Aktualisierung bereits bestehender Modelle und damit die Einbindung aktueller Daten oftmals komplex und zeitaufwändig. Dies gilt besonders für Modelle, die auf Basis eines profilschnittgestützten Ansatzes erstellt wurden, da hier die Aktualisierung bereits in der Phase der Profilschnitterstellung und damit in einem sehr frühen Stadium der Modellierung erfolgen muss.

3.3.2 Automatisierte Verfahren

Automatisierte Verfahren lassen sich dagegen eher als interaktiv-interpolativ bezeichnen. Die Modellierung erfolgt hier direkt auf Grundlage der „harten“ Datenbasis, ohne dass der Modellierer die Möglichkeit hat, interaktive Interpretationsarbeit zu leisten. Hierdurch ist es in den meisten Fällen schwierig, geologisches Hintergrund- oder Expertenwissen in den Prozess der Modellerstellung zu integrieren. Die Ergebnisse einer Modellierung werden so nahezu ausschließlich von der Datenbasis und dem zur Regionalisierung verwendeten Interpolationsverfahren bestimmt.

Damit hat die Auswahl geeigneter Interpolationsverfahren und -parameter einen prädominanten Einfluss auf die Geometrie der resultierenden Flächen und Körper. Oftmals besteht zusätzlich die Möglichkeit, bereits interpolierte Flächen und erstellte Körper durch die Anwendung einfacher mathematischer Operationen, wie Addition, Subtraktion oder diverse Filterfunktionen, weiter zu verändern und einander anzupassen.

Ein entscheidender Vorteil automatisierter Verfahren ist, dass in den meisten Fällen die Modellergebnisse nachvollziehbar sind und zudem einfach reproduziert werden können. Die Aktualisierung von Modellen ist gegenüber Modellen, die mit halbautomatischen Verfahren erstellt worden sind, vergleichsweise einfach durchführbar. Neben der ergänzten Datenbasis

sind unter Umständen die Interpolationsparameter neu zu definieren, um einer aktualisierten Datengrundlage gerecht zu werden.

Auch bei automatisierten Verfahren können zwei unterschiedliche methodische Ansätze differenziert werden (vgl. Abb. 3.9):

- flächenbasierte, interpolative Modellierung und
- volumenbasierte, interpolative Modellierung.

Wie bei den halbautomatischen Verfahren, so ist auch die flächenbasierte, interpolative Modellierung auf die geometrische Modellierung von definierten geologischen Flächen ausgerichtet. Ziel ist es, mit Hilfe geeigneter Verfahren der Regionalisierung die Geometrie einer Fläche so anzupassen, dass sie sowohl die Basisdaten repräsentiert als auch zusammen mit weiteren Flächen ein plausibles und konsistentes Abbild der geologischen Situation darstellt.

Obwohl auch unter diesem Ansatz in der Regel Schichtunterkanten modelliert werden, existiert im Vergleich zu den halbautomatischen Verfahren oft ein entscheidender Unterschied bezüglich der Definition von geologischen Grenzflächen: Wie auch TURNER (2006) darstellt, ist in den meisten Modellierwerkzeugen die Bedingung implementiert, dass von vornherein alle (Schicht-) Flächen und damit die entsprechenden Volumenkörper über das gesamte Modellgebiet verbreitet sein müssen. Die horizontale Verbreitung der resultierenden Schichtkörper ist in diesem Fall an die Mächtigkeitsverteilung, das heißt, den vertikalen Abstand zwischen zwei unmittelbar aufeinander folgenden Schichtflächen gebunden. Damit ist jeder Schichtkörper über die gesamte horizontale Ausdehnung des Modellgebietes definiert. Die Mächtigkeiten betragen jedoch außerhalb der eigentlichen Verbreitung 0 m.

Unter der volumenbasierten, interpolativen Modellierung wird hier die Erstellung von Voxel- oder Block-Modellen verstanden. Nach JESSELL (2001) ist die Voxel-Modellierung eine Alternative zu flächenbasierten Ansätzen. Obwohl ein volumenbasierter Ansatz im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit nicht untersucht wurde, soll er jedoch der Vollständigkeit halber kurz vorgestellt werden.

Bei der Voxel-Modellierung wird der Modellraum zunächst mit Hilfe eines regulären 3D-Gitters in regelmäßige 3D-Zellen unterteilt. Im Vergleich zu flächenbasierten Ansätzen ergibt sich hierdurch ein deutlich größerer Bedarf an Speicherplatz, da bei unregelmäßig begrenzten Modellgebieten neben dem eigentlichen Modellraum oftmals auch leerer Raum verwaltet werden muss. Mit Hilfe spezieller Interpolationsverfahren, wie Indikator-Kriging (vgl. DEUTSCH & JOURNAL, 1998), können den einzelnen Elementen des 3D-Gitters (Voxel, Zellen) kategorisierte bzw. diskrete Variablen, wie zum Beispiel eine Material- oder Stratigraphie-ID, zugewiesen werden. Der so geschätzte Wert gilt dann für die gesamte Zelle, wodurch ein weiteres Problem dieses Ansatzes deutlich wird: Homogenbereiche bzw. deren Grenzflächen können stets nur approximiert dargestellt werden; ihre Geometrie wird durch die Menge aller Zellen mit einer bestimmten Eigenschaft definiert. Die Auflösung einer Repräsentation ist dabei direkt von der Auflösung des 3D-Gitters abhängig. Wie unter Kapitel 3.2.3 beschrieben,

ist es jedoch möglich, diesem Problem in gewissem Umfang durch die Anwendung von *Bintree*- und *Octree*-Verfahren zu begegnen. Hierbei werden die Zellen jener Bereiche, die durch eine hohe räumliche Variabilität charakterisiert sind, rekursiv in zwei bzw. acht gleichgroße Segmente unterteilt, wodurch die Auflösung des Gitters partiell erhöht wird.

Voxel-Modelle werden häufig für die Modellierung von (Gesteins-) Parametern genutzt, welche kontinuierlich über den Raum variieren. Weiter dienen Block- oder Voxel-Modelle oftmals als Grundlage für stochastische Simulationen in zahlreichen Bereichen der angewandten Geowissenschaften.

Die Regionalisierung erfolgt sowohl bei halbautomatischen als auch bei automatisierten Verfahren mit Hilfe von Interpolationsverfahren. Dabei entscheidet das genutzte Modellierwerkzeug, welche Interpolationsverfahren zur Verfügung stehen. Neben dem verwendeten Modellierungskonzept haben die eingesetzten Interpolationsverfahren einen entscheidenden Einfluss auf die resultierende Geometrie von Schichtflächen und Volumenkörpern.

Bei der Interpolation lassen sich *deterministische* und (*geo-*) *statistische* Verfahren unterscheiden.

Bei *deterministischen* Verfahren besteht ein direkter funktionaler Zusammenhang zwischen Eingangsdaten und Ergebnis der Interpolation. Sie liefern an einem abzuschätzenden Punkt stets einen eindeutigen und gleichen Wert. Deterministische Interpolationsverfahren zeichnen sich durch eine relativ einfache Berechnung der zu schätzenden Werte aus, jedoch lassen sie keine Aussage über die Qualität der Ergebnisse zu. Verbreitete deterministische Interpolationsverfahren sind zum Beispiel Dreiecksvermaschung (Triangulation), Nearest Neighbour, Inverse Distance Weighted (IDW) und Splines.

Dagegen machen sich (*geo-*) *statistische* Interpolationsverfahren den Grundsatz der induktiven Statistik zunutze: Von einer Stichprobe (Datenbasis) wird auf die Eigenschaften einer Grundgesamtheit geschlossen. In diesem Zusammenhang wird ein Satz von Beobachtungspunkten (Daten) als zufällige Realisierung aus einer unendlichen Menge möglicher Realisierungen betrachtet und damit die Theorie der Zufallsvariablen verfolgt. Der stochastische Prozess selbst gliedert sich in eine deterministische (strukturelle) und eine zufällige Komponente. Der eigentlichen Interpolation geht eine statistische Analyse der Beobachtungspunkte voraus, auf deren Grundlage eine Verteilungsfunktion ermittelt wird. Diese Verteilungsfunktion geht dann in die Berechnung von Schätzwerten ein. In Abhängigkeit der Gestalt der gewählten Verteilungsfunktion können die Werte an einem abzuschätzenden Punkt variieren. Im Vergleich zu rein deterministischen Verfahren zeichnen sich (*geo-*) *statistische* Interpolationsverfahren durch eine aufwändigere Berechnung aus. Jedoch ermöglichen sie durch die Ermittlung eines Fehlerterms eine Aussage über die Qualität der Schätzung.

Auf dem Gebiet der Geowissenschaften werden statistische Verfahren zur Charakterisierung und Schätzung räumlich korrelierter Daten unter dem Begriff Geostatistik zusammengefasst. Hierzu zählen neben den verschiedenen Kriging-Verfahren, wie beispielsweise Simple Kriging, Ordinary Kriging, Indicator Kriging und Universal Kriging, auch die Methoden der

stochastischen Simulation (BLÖSCHL, 2006). Die Analyse des räumlichen Verhaltens und des Zusammenhangs der Daten erfolgt bei allen geostatistischen Verfahren mittels Variogrammetrie, wobei sich in der Regel auch Richtungsabhängigkeiten und damit Anisotropie-Effekte erkennen und berücksichtigen lassen. Ein Maß für die Güte einer Kriging-Schätzung liefert die während der Interpolation bezüglich des geschätzten Wertes ermittelte Standardabweichung (σ) bzw. Varianz (σ^2). Nach SCHLÜTER (1996) können beide aus den für die Schätzung eines Wertes genutzten Wichtungsfaktoren und Semivarianzen sowie einem so genannten Lagrange-Multiplikator, der in Beziehung zum Schätzwertfehler steht und ebenfalls während der Schätzung ermittelt wird, errechnet werden.

Einen umfassenden Überblick zu geostatistischen Methoden und ihrer praktischen Anwendung liefern unter anderem DEUTSCH & JOURNAL (1998), AKIN & SIEMES (1988), CRESSIE (1993), JOURNAL & HUIJBREGTS (1993), CHILÈS & DELFINER (1999) und DAVIS (1986).

3.4 Methodische Ansätze der betrachteten Modellierwerkzeuge im Detail

In Verbindung mit der vorliegenden Arbeit wurden die Ergebnisse von fünf verschiedenen Werkzeugen zur geologischen 3D-Modellierung in die vergleichenden Untersuchungen einbezogen. Dies sind im Einzelnen GeoObject/GSI3D, MVS, RockWorks, GMS und GOCAD. Dabei entstammen die Modelle, die unter GeoObject/GSI3D und MVS entwickelt wurden, bereits früheren Arbeiten von FABRITIUS (2002) bzw. HUBERT (2005), während die Modelle unter RockWorks, GMS und GOCAD im Zuge der vorliegenden Arbeit erstellt wurden.

In sämtlichen Modellierwerkzeugen wurde zunächst die Modellierung geologischer und lithostratigraphisch begründeter Grenzflächen fokussiert, welche dann im weiteren Verlauf der 3D-Modellierung für die Erstellung geologischer Volumenkörper verwendet wurden. Allerdings unterscheidet sich bereits die Art und Weise, wie unter den einzelnen, in den Programmen implementierten Ansätzen eine Modellierung plausibler, konsistenter und für die Volumenbildung geeigneter Schichtflächen durchführbar ist, deutlich. Nach einer kurzen Vorstellung der genutzten Softwarepakete sollen aus diesem Grund im Folgenden die unter Kapitel 3.3 eingeführten methodischen Ansätze, welche in den verwendeten Modellierwerkzeugen zur Anwendung kommen, näher betrachtet sowie ihre wichtigsten Vor- und Nachteile herausgestellt werden. Die Darstellungen beziehen sich dabei ausschließlich auf Techniken und Methoden, die in den betrachteten Modellierwerkzeugen implementiert sind und erheben deshalb keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Da der volumenbasierte, interpolative Modellierungsansatz im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit nicht zur Anwendung kam, soll hier auf eine detaillierte Betrachtung verzichtet werden.

3.4.1 Betrachtete Modellierwerkzeuge

Im Folgenden werden die im Zuge der vorliegenden Arbeit betrachteten Modellierwerkzeuge kurz vorgestellt. Einen detaillierten, nach dem Schema von ELFERS et al. (2004) strukturierten Überblick mit Eigenschaften, Besonderheiten, Datenmodellen, Auswertungsmöglichkeiten sowie Schnittstellen mit Import- und Exportformaten liefert Anhang 2.

GeoObject2/GSI3D 1.5: Das Referenzmodell wurde von FABRITIUS (2002) mit Hilfe der Modellersoftware GeoObject erstellt. Dabei handelt es sich im Gegensatz zu allen anderen betrachteten Anwendungen nicht um ein eigenständiges Programm, sondern um eine Erweiterung zur ArcView GIS 3.2a. GeoObject nutzt die Benutzeroberfläche von ArcView und stellt bezüglich der Modellerstellung entsprechend erweiterte bzw. zusätzliche Funktionen bereit. GeoObject wurde speziell für die Erstellung dreidimensionaler Modelle von oberflächennahen Schichten entwickelt (SOBISCH, 2000) und wurde später vollständig durch die eigenständige Modellersoftware GSI3D ersetzt. GeoObject nutzte als Vorläufer von GSI3D für die geologische 3D-Modellierung ebenfalls vernetzte Profilschnitte und verfolgte somit mit der konstruktiven, profilschnittgestützten Modellierung einen identischen methodischen Ansatz, wie er heute in GSI3D implementiert ist. Aus diesem Grund wird im Folgenden der Name GSI3D verwendet.

GSI3D wurde während der letzten 17 Jahre von Hans-Georg Sobisch (INSIGHT GmbH) entwickelt. Die initialen Bemühungen fanden in Zusammenarbeit mit dem NLFb (heute LBEG) statt. Seit 2000 wird die Weiterentwicklung vom British Geological Survey (BGS) unterstützt und vorangetrieben (MATHERS & KESSLER, 2008). Im BGS wird GSI3D hauptsächlich für die konstruktive, profilschnittgestützte geologische 3D-Modellierung von oberflächennahen, ungestörten Schichtenfolgen genutzt (CULSHAW, 2005). KESSLER et al. (2005) und KESSLER & MATHERS (2004) geben einen Überblick zur Anwendung von GSI3D bei der systematischen Erstellung von 3D-Modellen beim BGS.

MVS 8.0: Die modular aufgebaute Anwendung MVS (Mining Visualization System) ist das umfangreichste Programmpaket, welches von der Firma C TECH DEVELOPMENT CORP. bereitgestellt wird. Wie sich aus dem Namen ableiten lässt, wurde das Modellierwerkzeug ursprünglich dazu entwickelt, um Fragestellungen aus dem Bergbauwesen zu bearbeiten. Neben der Analyse und Modellierung des geologischen Untergrundes liegen die Stärken dieser Anwendung in der Visualisierung und Animation von raumbezogenen Daten und Modellergebnissen. Auch für die Bearbeitung umwelt- und hydrogeologischer Problemstellungen stehen in MVS umfangreiche Funktionen zur Verfügung. So lässt sich beispielsweise die räumliche Ausdehnung von Schadstofffahnen modellieren und im 3D-Raum auf der Basis von Schwellenwerten darstellen. Im Zusammenhang mit Risikoabschätzungen können unter MVS ermittelte Aussagesicherheiten (z. B. bezüglich der Ausdehnung einer Schadstofffahne oder ihrer internen Konzentrationsverteilung) hilfreiche Aspekte liefern.

Eine Besonderheit von MVS ist der modulare Aufbau. Das heißt, sämtliche Funktionen des Programms sind in Form von Makros in Modulen organisiert. Die einzelnen Module können nach Bedarf vom Anwender in einem Arbeitsbereich platziert und entsprechend den Anforderungen miteinander verbunden bzw. vernetzt werden. Damit kann sich der Anwender mit Hilfe eines graphischen Fließdiagramms einen Workflow erstellen, der exakt auf die aktuelle Fragestellung zugeschnitten ist. Dies hat den entscheidenden Vorteil, dass nur gegenwärtig benötigte Ressourcen mobilisiert werden müssen.

In MVS erfolgt die Modellierung ausschließlich über die direkte Interpolation von Eingangsdaten. Das heißt, hier sind mit den Konzepten der interpolativen Modellierung weitestgehend automatisierte Verfahren implementiert (vgl. Kap. 3.3).

RockWorks 2004: Die Anwendung RockWorks wird von der Firma ROCKWARE INC. vertrieben. Hierbei handelt es sich um ein recht umfangreiches Programmsystem zur Erfassung, Analyse und Visualisierung von geowissenschaftlichen Datenbeständen aus verschiedensten Anwendungsbereichen (Geotechnik, Umweltgeologie und Geochemie, Bergbau- sowie Öl- und Gasindustrie). Ein Merkmal der Software ist ihre datenbankähnliche Struktur. Sämtliche Geodaten (Bohrungen, Lithologie, Stratigraphie, Messwerte aller Art, usw.) werden in Tabellenblättern gehalten und strukturiert. Analysen, Diagrammdarstellungen sowie Visualisierungen von Flächen und Volumina werden stets aus diesen Tabellen heraus über Zwischenmenüs generiert und in separaten 2D- und 3D-Fenstern dargestellt.

Auch unter RockWorks erfolgt die Erstellung geologischer Modelle allein auf Grundlage eines interpolativen und weitestgehend automatisierten Modellierungsansatzes. Möglichkeiten, innerhalb der Anwendung Interpretationsarbeit zu leisten, sind nicht implementiert.

GMS 6.0: Die Entwicklung des Programmsystems GMS (Groundwater Modeling System) erfolgt unter einem Konsortium der U.S. Armee mit dem Department of Defense (DoD), Department of Energy (DOE), Environmental Protection Agency (EPA) sowie Industrie und Wissenschaftlern aus akademischen Forschungseinrichtungen und USGS. Die Realisierung des Systems wurde vom DoD im Zusammenhang mit annähernd 9.000 kontaminierten Standorten, die sich in dessen Verantwortungsbereich befinden, initiiert (HOLLAND & RICHARDS, 1998). Als kommerziell erhältliches Produkt wird GMS aktuell von EMS-I (Environmental Modeling Systems, Inc.) vertrieben.

Neben der Fähigkeit zur geologischen 3D-Modellierung mit vorausgehender Datenanalyse liegen die Stärken von GMS vor allem im Bereich der Simulation von Strömungs- und Transportprozessen. Die geologische Modellierung ist in diesem Zusammenhang einer der initialen Schritte, die für eine erfolgreiche Strömungs- oder Transportmodellierung nötig sind. GMS bildet mit den implementierten Funktionalitäten den vollständigen Workflow, wie er bei der numerischen Grundwassermodellierung zur Anwendung kommt, ab. Die Suite enthält neben Werkzeugen zur Charakterisierung des geologischen Untergrundes sowie Funktionen zum *Pre-* und *Post-Processing* auch die entsprechenden Simulatoren für Finite-Differenzen- und Finite-Elemente-Modelle (MODFLOW 2000, MODPATH, MT3DMS/RT3D, SEAM3D, ART3D, UTCHEM, FEMWATER, PEST, UTEXAS, MODAEM und SEEP2D). Visualisierungen von (Modell-) Ergebnissen sind in 2D und 3D möglich.

Im Hinblick auf die geologische 3D-Modellierung sind in GMS sowohl Ansätze für eine konstruktive, profilschnittgestützte als auch eine interpolative Modellierung implementiert. Auch eine Kombination beider Modellierungsansätze ist dabei prinzipiell möglich. So beschreiben LEMON & JONES (2003) zum Beispiel die Erstellung von 3D-Modellen auf der Basis von konstruierten Profilschnitten in GMS. In Verbindung mit der ausgesprochen heterogenen geologi-

schen Situation im Modellgebiet Bitterfeld-Süd hat sich jedoch gezeigt, dass die Modellerstellung auf Basis eines konstruktiven, profilschnittgestützten Ansatzes nur eingeschränkt nutzbar ist (vgl. Kap. 4.5).

GOCAD 2.1.4: Die Software GOCAD (Geological Objects Computer Aided Design) wird von einem Konsortium entwickelt, welches seinen Ursprung in den späten achtziger Jahren des letzten Jahrhunderts hat. Das 1989 gegründete Konsortium besteht heute aus 120 Universitäten und mehr als 15 Firmen. Ab 1997 wurde GOCAD kommerziell von EARTH DECISION SCIENCES, einer vom Konsortium gegründeten Firma, vertrieben. Inzwischen wird GOCAD von PARADIGM LTD. vermarktet und supported.

Die GOCAD Suite umfasst eine Reihe von Modulen, welche auf die Anforderungen verschiedenster Anwendungsgebiete ausgerichtet sind (Geologische Interpretation, Seismische Interpretation, Reservoir-Modellierung, Bohrplanung, ...).

Die zum Zweck der Modellierung von geologischen Objekten und ihrer Eigenschaften entwickelte Software verfolgt das Grundkonzept der diskreten Modellierung (MALLET, 2002; ROYER, 2004). Das heißt, die Geometrie der Objekte wird im euklidischen Raum durch einen begrenzten Satz von Punkten dreidimensional abgebildet. Dabei besitzt GOCAD als einziges der betrachteten Modellierwerkzeuge eine echte 3D-Fähigkeit. Da Stütz- bzw. Knotenpunkte als Bestandteile der modellierten Geo-Objekte mit dreidimensionalen Topologieinformationen behaftet sind, kann zum Beispiel eine Fläche an einer XY-Koordinate mehrere Z-Koordinaten besitzen. Denn die 3D-Topologie beschreibt die Art und Weise, wie die einzelnen Punkte zu einem mehrdimensionalen Objekt verbunden werden. Diese Eigenschaft bietet insbesondere bei der Modellierung von komplexen geologischen Strukturen, wie überkippten Falten, steilstehenden Störungsflächen, Salzstöcken und Intrusivkörpern, einen entscheidenden Vorteil.

Mit der iterativen Modellierung über definierbare Kontrollelemente und -bedingungen (vgl. Kap. 3.3) verwendet GOCAD ebenfalls einen völlig eigenständigen, ausgesprochen flexiblen und von den weiteren betrachteten Modellierwerkzeugen abweichenden Ansatz zur Modellerstellung.

Die Verwendung von GOCAD als geologisches Modellierwerkzeug ist inzwischen verhältnismäßig weit verbreitet. So nutzt der BGS neben GSI3D, welches hier überwiegend zur Modellierung oberflächennaher, ungestörter Ablagerungen verwendet wird, GOCAD für die 3D-Modellierung der tieferen Festgesteinsbereiche (WYCISK et al., 2009; CULSHAW, 2005; SMITH, 2005; KESSLER, 2006; MERRITT et al., 2007).

Aber auch andere staatliche geologische Dienste nutzen inzwischen GOCAD als Modellierwerkzeug. So verwendet beispielsweise das Sächsische Landesamt für Umwelt und Geologie (LfUG) das Softwarepaket bereits seit mehreren Jahren im Zusammenhang mit der geologischen 3D-Modellierung von Steinkohlebergbaurevieren (STEINBORN et al., 2004; GÖRNE et al., 2006). In Deutschland wird, soweit recherchierbar, GOCAD gegenwärtig in den folgenden staatlichen geologischen Diensten für Modellierungsaufgaben genutzt: Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG, Niedersachsen), Landesamt für Natur und Umwelt

(LANU, Schleswig-Holstein), Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau (LGBR, Baden-Württemberg), Behörde für Stadtentwicklung und Umwelt (BSU, Hamburg) in Kooperation mit dem LANU sowie Bayerisches Landesamt für Umwelt (LFU).

Aber auch auf internationaler Ebene wird GOCAD in zahlreichen aktuellen Forschungs- und Industrieprojekten eingesetzt. In diesem Zusammenhang sei zum Beispiel auf die Arbeiten von FELTRIN et al. (2009), LE CARLIER DE VESLUD et al. (2009), ZANCHI et al. (2009), BISTACCHI et al. (2008), KAUFMANN & MARTIN (2008), ROSS et al. (2007) und KELLER et al. (2005) verwiesen.

3.4.2 Iterative, profilschnittgestützte Modellierung (flächenbasiert) – GSI3D, GMS

Bei der Modellerstellung unter einem konstruktiven, profilschnittgestützten Ansatz wird vom Modellierer unter Verwendung ausgewählter Bohrungen eine Serie von vernetzten Profilschnitten erstellt. Anzahl, Position und Verlauf der Profilschnitte sollten dabei so gewählt werden, dass das Modellgebiet in Abhängigkeit der zu modellierenden geologischen Situation ausreichend dicht und regelmäßig abgedeckt ist. Zudem sollten (zusätzliche) Profilschnitte so orientiert werden, dass sie lineare geologische Strukturen, wie verfüllte Rinnen, möglichst orthogonal schneiden.

Durch die interaktive Konstruktion virtueller Profilschnitte werden die zur Verfügung stehenden Basisdaten vom Bearbeiter gewissermaßen künstlich erweitert. Die durch Messungen und Proben belegten, unveränderlichen „harten“ Daten werden dabei durch interpretierte Daten („weiche“ Daten) ergänzt (vgl. Abb. 3.10). In diesem Zusammenhang spielen das geologische Hintergrundwissen des Modellierers sowie seine Kenntnisse über die geologischen Verhältnisse im Bearbeitungsgebiet eine entscheidende Rolle für die Richtigkeit und Plausibilität der erstellten Profilschnitte.

Während der interaktiven Profilschnitterstellung werden für jeden Profilabschnitt zwischen zwei Bohrungen die geologischen (Schicht-) Grenzen als Linien digitalisiert und entsprechend mit Attributen versehen (Abb. 3.10). Da dieser Prozess einer analogen Erstellung und Interpretation von geologischen Profilschnitten stark ähnelt, dürften zahlreiche Geowissenschaftler mit diesem Prozess vertraut sein. Allerdings besitzt die virtuelle Profilschnittkonstruktion im 3D-Raum gegenüber der analogen Erstellung geologischer Schnitte einen entscheidenden Vorteil: Die Profilschnitte sind lagetreu im virtuellen Raum eingebunden und die Kreuzungspunkte zwischen einzelnen Schnitten lassen eine unmittelbare visuelle Konsistenzprüfung und Validierung zu. Es besteht dadurch die Möglichkeit, schon während der Erstellung der vernetzten Profilschnittserien Interpretations- und Konstruktionsfehler zu erkennen und diese direkt bzw. iterativ zu beseitigen. Zudem können im Verlauf der Interpretation zusätzliche Profilschnitte definiert werden, um Bereiche, die noch nicht ausreichend beschrieben sind, entsprechend mit weiteren Informationen zu belegen. Beim Vorgang der virtuellen Profilschnittkonstruktion handelt es sich somit um eine iterative Interpretationsarbeit, welche die Ergebnisse der geologischen 3D-Modellierung entscheidend beeinflusst. Aus diesem Grund

muss der Bearbeiter sowohl einen umfassenden geologischen Sachverstand als auch ausreichende regionalgeologische Kenntnisse besitzen.

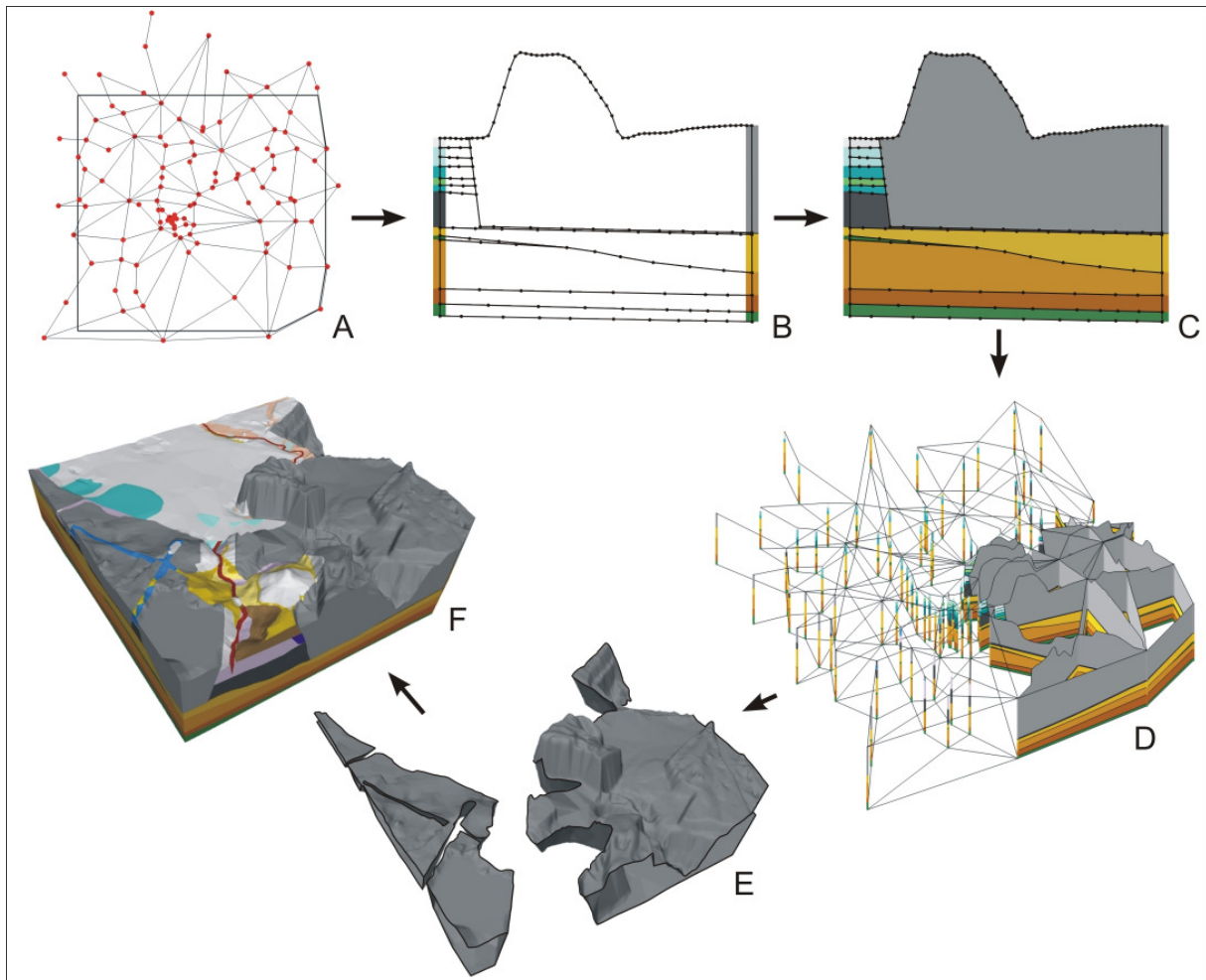


Abb. 3.10: Schematische Darstellung einer geologischen 3D-Modellierung über die Konstruktion vernetzter Profilschnitte. Nach der Definition eines Profilschnittnetzes (A) wird zwischen einzelnen Bohrungen („harte“ Daten) der mögliche Verlauf der Schichtgrenzen digitalisiert („weiche“ Daten) und mit Attributen versehen (B und C). Es erfolgt somit ein iterativer Aufbau eines konsistenten und mit geologischem Hintergrundwissen belegten Profilschnittnetzes (D), welches zur Erstellung geologischer Schichtflächen dient (E). Unter Berücksichtigung einer regionalen Modellhierarchie werden über die vertikale Vernetzung der Schichtflächen schließlich die Volumenkörper des geologischen 3D-Modells generiert (F).

Im Zuge der Modellerstellung werden die digitalisierten (Linien-) Stützpunkte schichtbezogen abgetastet und die so gewonnenen Informationen den Basisdaten angehängt. Durch die Abtastung der konstruierten Schichtgrenzen in sämtlichen virtuell erstellten Profilschnitten erfolgt eine künstliche Erweiterung der Datensätze zur Beschreibung der einzelnen Schichtflächen. Die so verdichteten Ausgangsdaten werden im weiteren Verlauf zur Erstellung bzw. Modellierung geologischer Grenzflächen genutzt. In Abhängigkeit der verwendeten Software erfolgt dies entweder durch eine direkte Vernetzung der Schichtflächendaten zu einem TIN oder durch ihre Interpolation auf eine (Ziel-) Fläche mit bereits vorgegebener Basisgeometrie (regelmäßiges oder unregelmäßiges Raster/Grid, vordefiniertes TIN).

Bei einer direkten Vernetzung zu einem TIN hängt die Gestalt der resultierenden Schichtflächen ausschließlich von der Position und der Dichte der gesetzten Stützpunkte sowie vom für die Triangulation genutzten Verfahren ab. Dagegen wird bei einer Interpolation von Schichtflächendaten auf eine vorgegebene Fläche die resultierende Gestalt entscheidend vom gewählten Interpolationsverfahren, den entsprechend definierten Interpolationsparametern sowie der Basisgeometrie der Zielfläche (Auflösung und Geometrie der Elementarzellen) beeinflusst (vgl. Abb. 3.11).

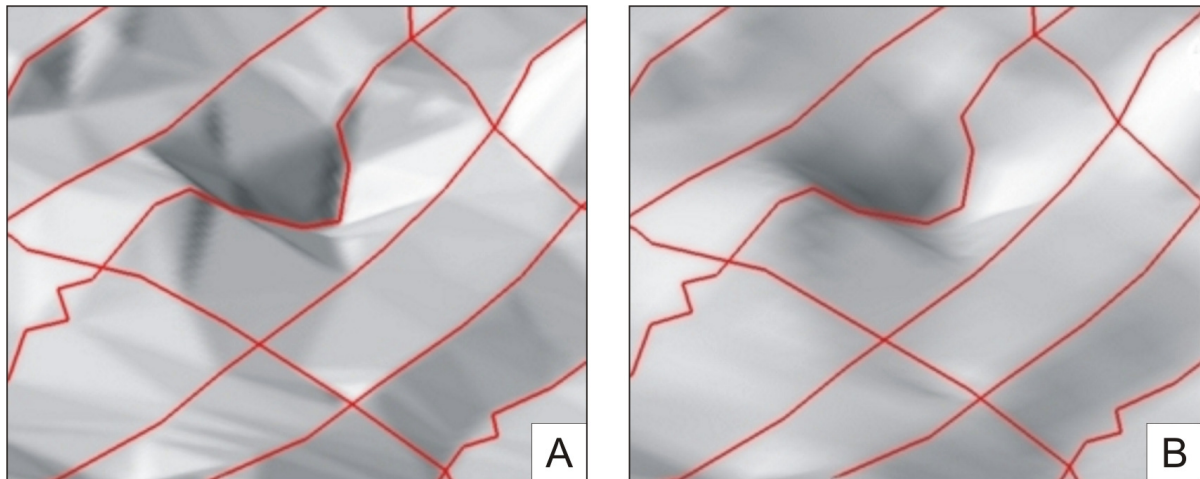


Abb. 3.11: Identischer Ausschnitt einer geologischen Schichtfläche, erstellt auf der Basis von virtuellen Profilschnitten. Die Lage der zugehörigen Profilschnitte ist in rot dargestellt. A - direkte Triangulation zwischen den Datenpunkten der Profilschnitte; B - Interpolation auf eine Fläche mit vorgegebener Basisgeometrie. Deutlich sind die Auswirkungen der verschiedenen Verfahren, die zur Flächenerstellung angewendet wurden, erkennbar.

Weiter könnten die um Profilschnittinformationen erweiterten Schichtflächendaten genutzt werden, um ein bei der Modellierung über NURBS-Flächen (vgl. Kap. 3.2.2) benötigtes Netz von Kontrollpunkten oder -kurven zu erstellen. Voraussetzung ist natürlich, dass dieses Flächenmodell vom genutzten Modellierwerkzeug unterstützt wird, was weder in GSI3D noch in GMS der Fall ist.

Die Erstellung der Volumenkörper erfolgt dann in der Regel durch eine einfache vertikale Vernetzung der erstellten Schichtflächen. Entscheidend hierfür ist die Definition einer für den gesamten Modellraum gültigen regionalen Modellhierarchie. Diese stellt sicher, dass das Volumenmodell unter Berücksichtigung hierarchischer Kriterien aufgebaut wird. Im Falle einer Überlappung von Schichtkörpern oder -flächen werden dabei hierarchisch ältere Strukturelemente von jüngeren Strukturen entweder abgeschnitten (GSI3D) oder an deren Geometrie angepasst (GMS). Die Implementierung einer Modellhierarchie trägt somit in hohem Maße zur Konsistenz des resultierenden Modells bei, da hierdurch sowohl Überschneidungen bzw. Durchdringungen von Flächen und Volumenkörpern als auch Lücken im 3D-Modell vermieden werden.

Neben der Verwendung von Bohrdaten besteht in der Regel auch die Möglichkeit, weitere, die Schichtflächengeometrie beschreibende Informationen in den Modellierprozess einzubin-

den. Hierzu zählen beispielsweise Verbreitungspolygone, welche die horizontale bzw. laterale Ausdehnung einzelner Schichtglieder definieren, oder auch die Nutzung von bereits vorhandenen analogen Profilschnitten sowie Daten aus der Interpretation seismischer Untersuchungen. Auch die Auswertung und Einbindung verschiedener thematischer Karten (geologische Karten, Bergbaukarten, historische Karten) kann zusätzliche und wertvolle Informationen für die Modellerstellung liefern.

Besonders die heterogene Situation oberflächennaher Schichtenfolgen, wie sie häufig in quartären Ablagerungen anzutreffen ist, hat zur Folge, dass die Erstellung geologischer 3D-Modelle allein auf der Grundlage von Bohrinformationen und unter Verwendung von verschiedenen Interpolationsverfahren nicht zu befriedigenden und plausiblen Ergebnissen führt. So zeichnen sich glaziale Ablagerungsräume oft durch räumlich stark variierende lithostratigraphische Verhältnisse, wie zum Beispiel Rinnen- und Linsenstrukturen, durch Erosionsprozesse veränderte Terrassenkörper oder Stauchmoränen, aus, welche in der Regel allein durch Bohrdaten nicht ausreichend erfass- und beschreibbar sind. Auch die Geometrie anthropogener Schichtelemente, wie sie Bergbaukippen oder Deponiekörper darstellen, kann oft nicht mit der vorhandenen Bohrdatendichte angemessen beschrieben werden, so dass ihre Modellierung ohne die Einbindung zusätzlicher Informationen generell problematisch ist.

Durch die zusätzliche Integration von Informationen aus konstruierten Profilschnitten wird eine Möglichkeit bereitgestellt, den menschlichen Verstand und das Expertenwissen des Anwenders in den Prozess der Modellierung einfließen zu lassen. Mit Hilfe der profilschnittgestützten Modellierung können so auch komplexe geologische Lagerungsverhältnisse in die Modellebene überführt werden, auch wenn diese nicht direkt durch Bohrungen vollständig beschrieben sind. Unter diesem Aspekt lassen sich beispielsweise auch Bergbaukippen oder erosiv eingeschnittene Rinnenstrukturen unter entsprechendem Aufwand gut beschreiben und detailgetreu abbilden.

Allerdings sind mit dem vorgestellten Ansatz auch einige entscheidende Nachteile verbunden. Ein erhebliches Problem stellt die Reproduzierbarkeit bzw. Nachvollziehbarkeit der Modellergebnisse dar. Da die geologische Situation zwischen den einzelnen Bohrlokalitäten nicht belegt ist, sind die Ergebnisse der Profilschnittkonstruktion und damit auch jene der 3D-Modellierung stark von den Fähigkeiten, dem Verständnis und der Subjektivität des Bearbeiters abhängig. Zudem muss beachtet werden, dass in der Regel mit zunehmender Tiefe die Dichte von Bohrinformationen abnimmt und in diesem Zusammenhang der interpretative Anteil steigt. So können komplexe Modelle, welche auf Grundlage dieses Modellierungsansatzes und unter Verwendung einer identischen Ausgangsdatenbasis von zwei verschiedenen Bearbeitern erstellt wurden, durchaus deutliche Unterschiede aufweisen. Auch ist die Erstellung eines konsistenten und plausiblen Modells in Abhängigkeit der darzustellenden geologischen Situation oft mit einem sehr hohen manuellen und zeitlichen Aufwand verbunden.

Dennoch ist die Anwendung dieses Ansatzes recht weit verbreitet. So wird die Modellerstellung über Profilschnittserien in vielen Fällen genutzt, in denen es um eine Modellierung oberflächennaher quartärer, tertiärer und anthropogener Ablagerungen geht. Grund hierfür sind die

meist ausgesprochen heterogenen und komplexen Lagerungsverhältnisse, durch welche diese Modellräume geprägt sind und deshalb eine erweiterte Interpretation der Datenbasis erforderlich machen. In diesem Zusammenhang sei zum Beispiel auf die Arbeiten von HINZE et al. (1999), SOBISCH (2000), LELLIOTT et al. (2006), KESSLER et al. (2007), MERRITT et al. (2007) und WYCISK et al. (2002, 2008, 2009) verwiesen.

3.4.3 Iterative Modellierung über definierbare Kontrollelemente und -bedingungen (flächenbasiert) – GOCAD

Unter diesem Modellierungsansatz wird die Erstellung von Geo-Objekten unter Einbeziehung von benutzerdefinierten, geometrischen Kontrollelementen und -bedingungen, die im Folgenden gemäß der Benennung in GOCAD als *Constraints* bezeichnet werden, verstanden.

In Abhängigkeit der Zielstellung wird hierbei in den meisten Fällen ebenfalls zunächst die Erstellung von geologischen Grenzflächen verfolgt, welche dann für die Generierung von Volumenkörpern genutzt werden können.

Ziel dieses Modellierungsansatzes ist es, alle verfügbaren Daten, die es ermöglichen, den geologischen Untergrund zu beschreiben, in den Modellierprozess einzubinden. Die verschiedenen Basisdaten werden entsprechend ihrer Art und Relevanz als *Constraints* mit unterschiedlicher Bedeutung und Wirkung definiert. Nach MALLET (2002) können die einzelnen *Constraints* gewichtet werden, wodurch es möglich ist, ihren relativen Einfluss auf die Geometrie der resultierenden Fläche zu beeinflussen.

GALERA et al. (2003) untergliedern den Prozess zur Modellierung einer geologischen (Schicht-) Fläche in drei wesentliche Schritte:

1. Erstellung bzw. Definition einer initialen (Basis-) Fläche,
2. Definition von *Constraints* aus den vorhandenen Daten, welche die Geometrie und die Gestalt der resultierenden Fläche beeinflussen und
3. Anpassung der Fläche an die Kontrollelemente unter Verwendung eines Interpolationsverfahrens und damit Neuberechnung der Raumlage der Stützpunkte der (Basis-) Fläche.

Bei der Basisfläche handelt es sich in der Regel um eine homogen triangulierte Fläche mit einer benutzerdefinierten Diskretisierung. Ist die laterale Ausdehnung einer geologischen Einheit bekannt, kann ein entsprechender Polygonzug dazu dienen, die Gestalt und die Auflösung der Basisfläche zu definieren.

Vor der Interpolation wird die Fläche mit *Constraints* belegt. Dabei können die verschiedenen *Constraints* entweder aus den Basisdaten oder aus bereits existierenden (Geo-) Objekten definiert werden, oder sie können selbst Bestandteil der zu interpolierenden Fläche sein. Dabei beeinflussen *Constraints*, welche aus der Datengrundlage oder vorhandenen Objekten definiert werden, die Interpolation dahingehend, dass die Geometrie der resultierenden Fläche und damit die räumliche Lage ihrer Knotenpunkte an die Kontrollelemente angepasst wird (Abb.

3.12 A und C). Sie werden deshalb auch als Kontrollpunkte (*Control Points*) bezeichnet. Dagegen können *Constraints*, die selbst Bestandteil der Fläche sind, dazu dienen, die Raumlage ausgewählter Knotenpunkte für die Interpolation zu fixieren. Gemäß ihrer Zugehörigkeit zur entsprechenden Fläche werden diese *Constraints* als Kontrollknoten (*Control Nodes*) bezeichnet. Zusätzlich besteht die Möglichkeit, für Kontrollknoten eine eingeschränkte Beweglichkeit zu definieren. So kann während der Interpolation eine Bewegung entlang einer vorgegebenen Richtung (X, Y oder Z) oder einer Ebene (XY, YZ oder XZ) zugelassen werden (BERLIOUX, 2001).

Neben den beschriebenen *Constraints* existiert eine Reihe weiterer Kontrollelemente, mit denen die Interpolation und damit die Geometrie der resultierenden Fläche entscheidend beeinflusst werden kann. Zu nennen sind hier zum Beispiel *Constraints* zur Vorgabe einer benutzerdefinierten Mächtigkeit oder eines zulässigen Mächtigkeitsbereiches (Abb. 3.12 B). Andere *Constraints* können sich direkt auf die Kanten der betreffenden Fläche beziehen, wenn diese beispielsweise im Zuge der Interpolation auf andere Objekte (Flächen) projiziert oder extrapoliert werden sollen. Zudem können die einzelnen *Constraints* mit Richtungen (vektorielle *Constraints*) belegt werden, wodurch sich eine weitere Steuerungsmöglichkeit für die anschließende Interpolation ergibt (Abb. 3.12 A).

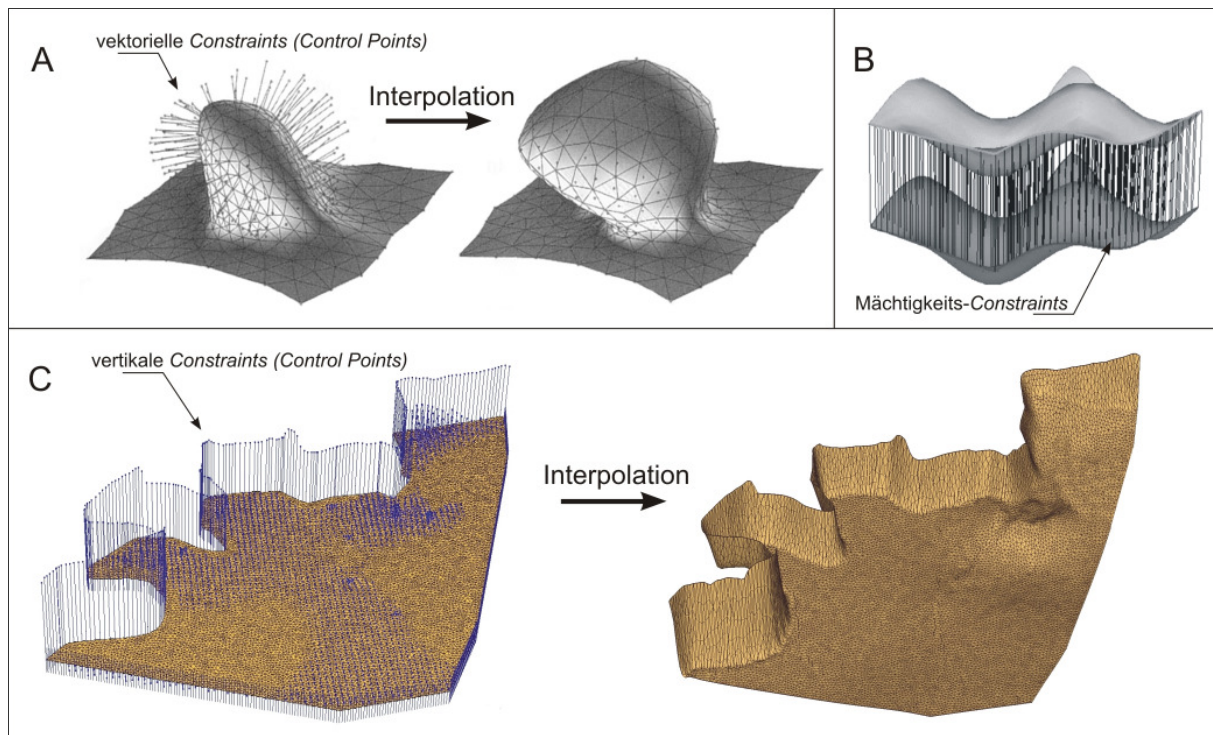


Abb. 3.12: Die Auswirkung ausgewählter *Constraints* auf die Interpolation von geologischen Flächen. A zeigt die Wirkung richtungsabhängiger *Constraints* auf das Interpolationsergebnis (verändert nach MALLETT, 2002). In B wurde die untere Fläche mit Hilfe eines Mächtigkeits-*Constraints* in Relation zur oberen Fläche interpoliert (verändert nach GALERA et al., 2003). C zeigt ein Beispiel einer Flächeninterpolation auf der Grundlage vertikal orientierter Kontrollelemente, welche iterativ aus Bohrdaten und einem Verbreitungspolygon gewonnen wurden.

Entscheidend für die ausgesprochen hohe Flexibilität dieses Ansatzes ist die variable Definierbarkeit von Kontrollelementen direkt am 3D-Objekt. Hierbei besteht auch die Möglichkeit, Flächen in einzelne Regionen (Flächensegmente) zu unterteilen, die wiederum separat mit verschiedenen *Constraints* besetzt werden können. Durch die umfassenden Möglichkeiten zur Vorgabe von Kontrollelementen und -bedingungen können nahezu alle Daten, die der Beschreibung des geologischen Untergrundes dienen, für die Modellierung genutzt werden. Neben der Verwendung von Bohrinformationen ist es somit auch möglich, beispielsweise Daten zur lateralen Verbreitung von geologischen Einheiten, strukturgeologische Messungen oder Informationen aus der Interpretation von Profilschnitten und geophysikalischen Untersuchungen in den Modellierprozess einzubinden.

In Bereichen, in denen die Datengrundlage nicht ausreichend dicht oder genau ist, kann sie durch Interpretationsarbeit und mit Hilfe der daraus resultierenden *Constraints* ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, menschliches (Hintergrund-) Wissen sowie begründete Schlussfolgerungen in die Modellierung geologischer Flächen einfließen zu lassen (KAUFMANN & MARTIN, 2008).

Bei der Interpolation einer Fläche werden alle aktiven *Constraints* gemäß ihrer Art, Wichtung und Richtung berücksichtigt. Auf diese Weise ist zumindest die Möglichkeit gegeben, „harte“ und „weiche“ Daten in gewissem Umfang zu differenzieren und damit ihren Einfluss auf die Interpolationsergebnisse zu steuern. Die Erstellung der Volumenkörper erfolgt dann unter Einbeziehung der modellierten Grenzflächen sowie unter Berücksichtigung hierarchischer Beziehungen.

Bei der Modellierung komplexer Geokörper ist es oft nötig, die entsprechenden Flächen iterativ zu modellieren. Hierbei erfolgt die Modellierung einer Fläche schrittweise durch eine mehrfache Interpolation, wobei zwischen den Interpolationsschritten eine Anpassung oder Erweiterung der *Constraints* erfolgt. In diesem Zusammenhang kann man hier auch von einer iterativ-interpolativen Modellierung sprechen. Durch die umfassenden Möglichkeiten zur Einflussnahme des Modellierers auf die Gestalt der resultierenden Flächen, lässt sich dieser Modellierungsansatz den halbautomatischen Verfahren zuordnen.

Der dargestellte Ansatz ist in der Modelliersoftware GOCAD implementiert. Aufgrund der hohen Flexibilität dieses Modellierungskonzeptes sowie der vielseitigen Möglichkeiten für den Anwender, in den Modellierprozess einzugreifen und die Interpolation zu steuern, ist die Anwendung von GOCAD recht weit verbreitet. So nutzen zahlreiche große Mineralöl- und Bergbauunternehmen GOCAD für die dreidimensionale Strukturaufklärung und -modellierung sowie die Modellierung von Eigenschaften und Parametern.

3.4.4 Interpolative Modellierung (flächenbasiert) – MVS, GMS, RockWorks

Die interpolative, flächenbasierte Modellierung unterscheidet sich deutlich von den beiden zuvor dargestellten methodischen Ansätzen. Der wohl bedeutendste Unterschied liegt darin begründet, dass während dem eigentlichen Modellierprozess keine zusätzlichen Informationen generiert und für die Modellbildung genutzt werden können. Das heißt, die Modellerstellung

basiert generell auf der bereitgestellten Datenbasis. Dies bedeutet jedoch nicht, dass in den Modellierprozess keinerlei Hintergrundinformationen und Expertenwissen oder auch Informationen aus Interpretationsarbeiten einfließen können. Sind diese Informationen bereits in der Datenbasis enthalten, stehen sie prinzipiell für die Modellierung zur Verfügung. Allerdings wird in diesem Fall ebenfalls, wie auch unter dem konstruktiven, profilschnittgestützten Ansatz, „harten“ und „weichen“ Daten die gleiche Bedeutung beigemessen.

Im Vergleich zu den Ansätzen der halbautomatischen Verfahren fehlt hier jedoch die Möglichkeit, Interpretationen und zusätzliche Informationen, die sich ggf. im Verlauf der Modellierung erschließen würden, als ergänzende Daten in den Modellierprozess aufzunehmen. Auch kann die laterale Ausdehnung von Schichtgliedern in Abhängigkeit der Datengrundlage oft nicht ohne weiteres fixiert werden, so dass sie maßgeblich vom gewählten Interpolationsverfahren beeinflusst wird. Aus diesen Faktoren ergeben sich deutliche Einschränkungen im Hinblick auf die Beeinflussung der Modellergebnisse durch den Anwender. Es kann somit unter Umständen schwierig sein, für eine komplexe geologische Situation ein Modell zu entwickeln, welches den Vorstellungen des Modellierers entspricht und damit plausibel ist. Zudem lässt eine nahezu vollständig automatisierte Modellerstellung während der eigentlichen Modellierung keine Konsistenz- und Plausibilitätsprüfung zu, so dass eventuelle Fehler in der Datenbasis, wenn überhaupt, erst in den Modellergebnissen zum Ausdruck kommen.

Die grundlegende Vorgehensweise der automatisierten, interpolativen Modellerstellung über Schichtflächen ist in Abbildung 3.13 vereinfacht zusammengefasst. Die Modellergebnisse werden dabei im Wesentlichen von folgenden Faktoren beeinflusst:

- Art und Umfang der Datenbasis,
- Geometrie und Auflösung der Basis- bzw. Zielfläche,
- Wahl der Interpolationsmethode und der entsprechenden Interpolationsparameter,
- regionale Modellhierarchie (wenn vorhanden bzw. definierbar) und
- Möglichkeiten zur weiteren Manipulation der Interpolationsergebnisse (mathematische Operationen, wie zum Beispiel Addition, Subtraktion, Verschneidungen oder Filterfunktionen).

Art und Umfang der Datenbasis bestimmen unter diesem Ansatz, ob die zu modellierende geologische Situation ausreichend repräsentiert ist. Dabei steht die Komplexität bzw. Heterogenität des Modellraumes im direkten Zusammenhang mit der benötigten Datendichte.

Die Geometrie und die Auflösung einer Basisfläche haben in Verbindung mit dem gewählten Interpolationsverfahren erheblichen Einfluss darauf, wie die Datengrundlage durch die resultierenden Flächen repräsentiert wird. Unter Berücksichtigung, dass in den meisten Fällen die Datenbasis möglichst genau durch die interpolierten Flächen wiedergegeben werden soll, ist in der Regel ein TIN gegenüber einem Raster/Grid als Basisfläche vorzuziehen. Denn wie unter Kapitel 3.2.2 bereits dargestellt, lassen TINs eine variable Diskretisierung zu und ihre

Geometrie kann durch die Einbindung zusätzlicher Stützpunkte leicht an die Datenbasis angepasst werden.

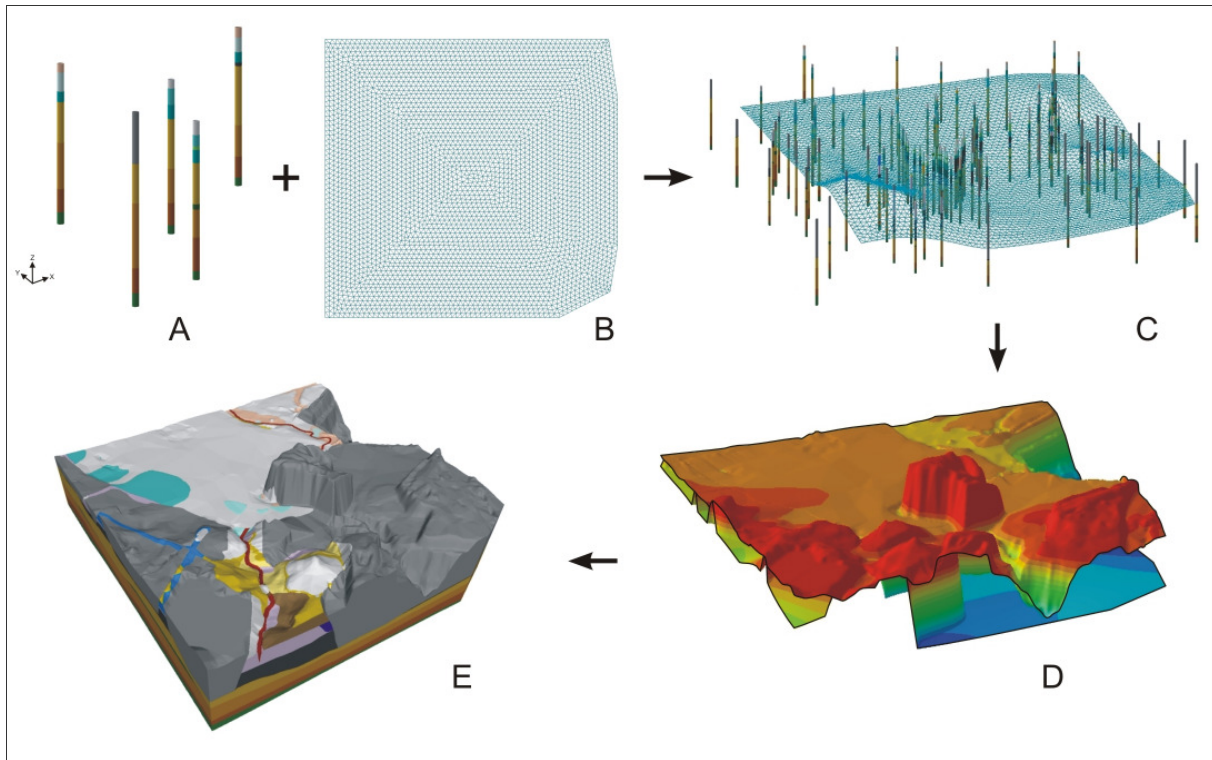


Abb. 3.13: Vereinfachte Darstellung des Prozessablaufes einer interpolativen geologischen 3D-Modellierung. Auf Grundlage der Eingangsdaten (A) sowie einer definierten Basisfläche (B) werden zunächst unter Verwendung von Interpolationsverfahren die einzelnen Schichtgrenzen erstellt (C). Nach der Anpassung an eine regionale Modellhierarchie (D) wird dann auf Basis der Grenzflächen ein Volumenmodell generiert (E).

Eine regionale Modellhierarchie bedingt, dass geologische Grenzflächen nach der eigentlichen Interpolation und im Fall gegenseitiger Durchdringung entsprechend der definierten Hierarchie an Flächen einer höheren Hierarchieebene angepasst werden und stellt damit die Konsistenz des Modells sicher. Bei der Modellierung lithostratigraphischer Schichtenfolgen verringern sich die Hierarchieebenen in der Regel von jung nach alt. Das heißt, für den Fall, dass sich nach der Interpolation zwei geologische Grenzflächen durchdringen, wird die „ältere“ der beiden Flächen zugunsten der „jüngeren“ und damit hierarchisch höher eingestuft Fläche angepasst. Allerdings unterstützen nicht alle Modellierwerkzeuge, die diesen Modellierungsansatz verfolgen, die Vorgabe einer regionalen Modellhierarchie, so dass in diesen Fällen betroffene Flächen oder Körper unter Anwendung verschiedener mathematischer Operationen manuell angepasst werden müssen.

Wie TURNER (2006) beschreibt, besitzen zahlreiche Programmsysteme zur geologischen 3D-Modellierung die Eigenschaft, dass sämtliche Flächen über das gesamte Modellgebiet verbreitet sein müssen. Diese Aussage trifft für alle Modellierwerkzeuge zu, die im Zuge der vorliegenden Arbeit für eine flächenbasierte, interpolative Modellierung genutzt wurden (MVS, GMS und RockWorks). Somit sind die resultierenden Volumenkörper ebenfalls, wenn auch

stellenweise mit einer Mächtigkeit von 0 m, über das gesamte Modellgebiet verbreitet. Oftmals lässt sich ihre Darstellung jedoch an die scheinbare (vertikale) Mächtigkeit koppeln, so dass nur jene Bereiche repräsentiert werden, die eine scheinbare Mächtigkeit über einem benutzerdefinierten Wert (z. B. > 0 m) besitzen.

Bei der Modellierung von komplexen und räumlich stark variierenden geologischen Situationen kann das Konzept der Modellierung durchgängiger Schichtflächen in Verbindung mit einer regionalen Modellhierarchie durchaus problematisch sein. So ist beispielsweise im Zusammenhang mit der Modellierung von Kippen- oder Erosionsstrukturen das Phänomen zu beobachten, dass lateral angrenzende und hierarchisch tiefer eingestufte Schichtglieder nicht von derartigen Strukturen „abgeschnitten“ sondern bis zu einem gewissen Grad nach unten verschleppt werden. Dies liegt darin begründet, dass hier die Stützpunkte der interpolierten Flächen nie genau mit der Grenzfläche von einschneidenden Strukturen deckungsgleich sind. Bei ihrer Anpassung gemäß der Modellhierarchie bekommen somit Stützpunkte, die innerhalb dieser Strukturen liegen, das heißt im Falle von Überschneidungen, den Z-Wert des Stützpunktes der Unterkante der einschneidenden Struktur zugewiesen. Hierbei handelt es sich um eine einfache vertikale Translation bzw. Projektion. In Abbildung 3.14 ist das Problem schematisch dargestellt. Generell kann eine Erhöhung der horizontalen Auflösung zu einer Verringerung dieses Phänomens beitragen.

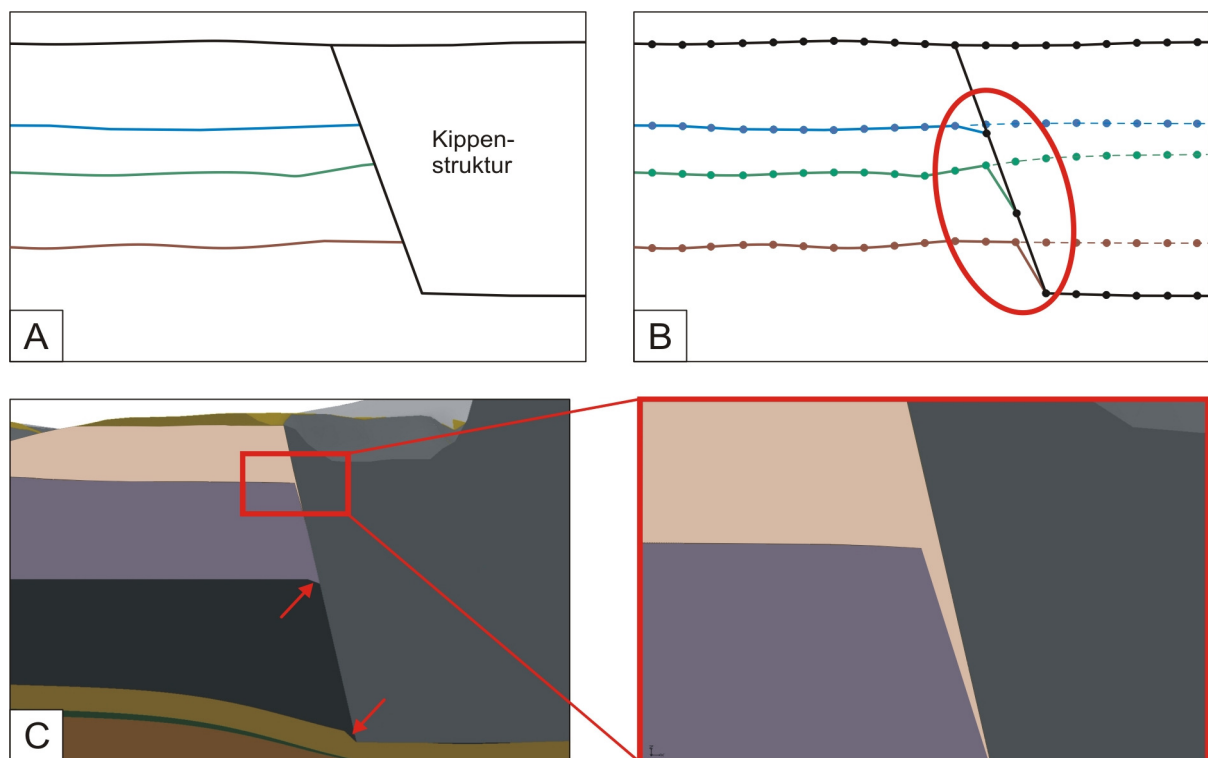


Abb. 3.14: A - schematische Schnittdarstellung einer Kippenstruktur. In B sind die Ergebnisse der Modellierung dieser Struktur dargestellt. Die Punkte repräsentieren die Stützpunkte der interpolierten Grenzflächen, welche hier einen äquidistanten horizontalen Abstand besitzen. Die gestrichelten Linien zeigen den potentiellen Verlauf der interpolierten Schichtgrenzen vor ihrer Anpassung entsprechend der Modellhierarchie. Die durchgängigen Linien sind bereits gemäß der Modellhierarchie korrigiert. Die Verschleppung resultiert aus der Anpassung ihrer Z-Werte an hierarchisch höher eingestufte Flächen. C zeigt ein Beispiel aus einem realen Modell.

Einige Modellierwerkzeuge setzen zudem voraus, dass sämtliche Schichtgrenzen in allen Bohrungen entsprechend der hierarchischen Reihenfolge gelistet sein müssen. Ist eine Schicht in einer realen Bohrung nicht vorhanden, so bekommt sie in der zugehörigen Modell-Bohrung den Z-Wert der überlagernden Schichtgrenze zugewiesen. Dieser Wert wird bei der Interpolation wie ein gewöhnlicher Datenpunkt behandelt. Bei komplexen geologischen Verhältnissen kann dies durchaus zu fehlerhaften und unplausiblen Ergebnissen führen (Abb. 3.15).

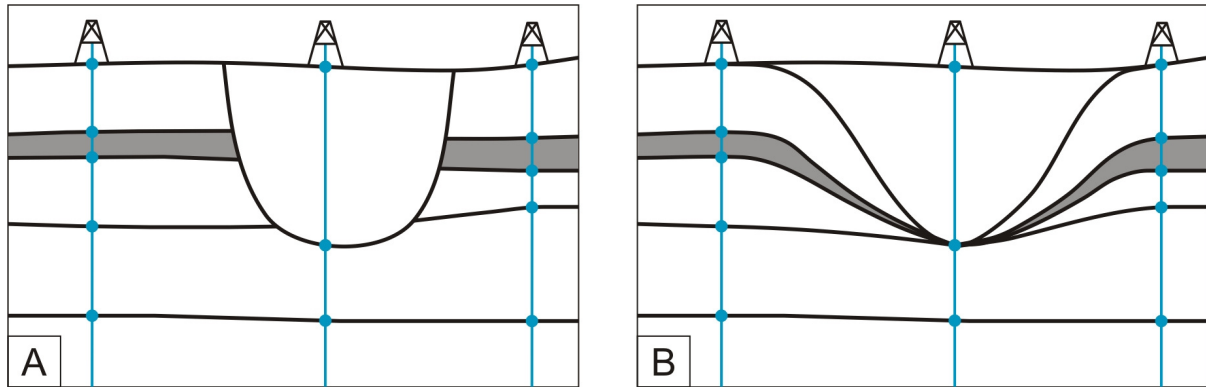


Abb. 3.15: Schematische Darstellung des Verlaufes von geologischen Grenzflächen in der Umgebung von Erosionsstrukturen. Unter A ist der Flächenverlauf dargestellt, wie er realen Verhältnissen nahe kommt. B zeigt die Ergebnisse einer Modellierung, wenn neben einer regionalen Modellhierarchie die Bedingung gilt, dass alle Schichtglieder in sämtlichen Modell-Bohrungen repräsentiert sein müssen (verändert nach HUBERT, 2005).

4. Geologische 3D-Modellierung am Beispiel Bitterfeld-Süd

Aufgrund der hohen Komplexität sowie der umweltgeologischen Relevanz wurde für die vergleichenden Untersuchungen der Modellraum Bitterfeld-Süd gewählt. Das Modellgebiet war bereits im Zusammenhang mit den BMBF-Verbundvorhaben SAFIRA I und SAFIRA II Gegenstand früherer Forschungsarbeiten, weshalb der Kenntnisstand bezüglich der geologischen Verhältnisse ausgesprochen hoch ist.

Als Besonderheit des Modellraumes und zugleich als modelltechnisch problematisch sind neben den räumlich stark variierenden quartären Elementen, wie Rinnen- und Linsenstrukturen, auch die durch anthropogene Einflüsse überprägten bzw. entstandenen Geokörper (Restbraunkohle, Auffülle und Bergbaukippen) herauszustellen (vgl. Abb. 4.1). Jedoch ist gerade das Vorhandensein derart komplexer Strukturen interessant und wichtig für eine Gegenüberstellung verschiedener Techniken und Methoden zur Modellierung. Aus diesem Grund erwies sich der Standort Bitterfeld-Süd für die im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Untersuchungen als besonders geeignet.

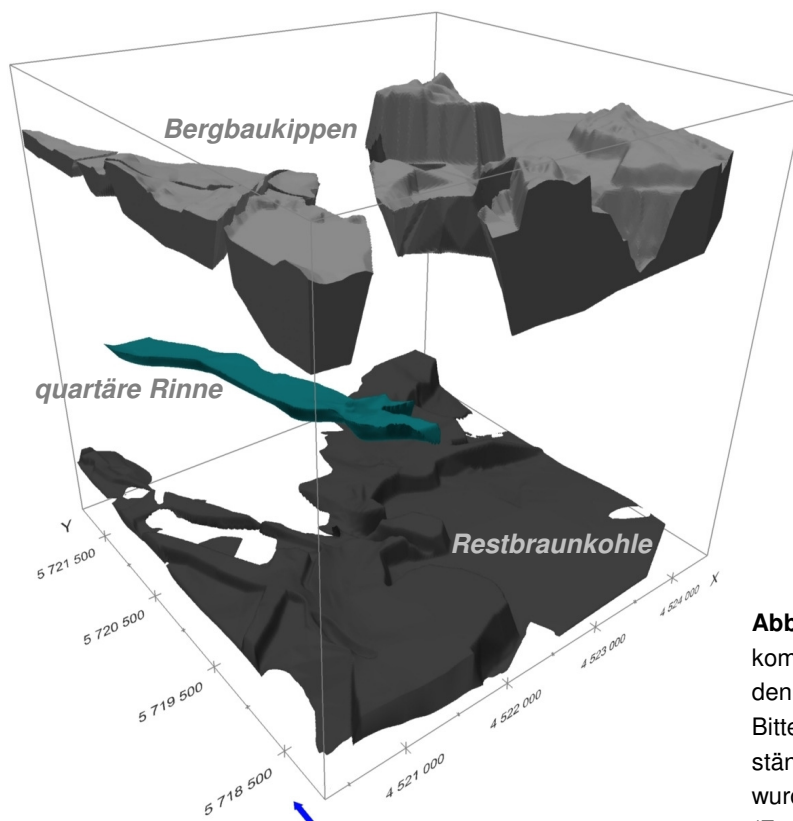


Abb. 4.1: 3D-Darstellung der besonders komplexen und räumlich stark variierenden Schichtglieder des Modellgebietes Bitterfeld-Süd. 15fach überhöht, unvollständige Schichtenfolge. Die Abbildung wurde auf Basis des Referenzmodells (FABRITIUS, 2002) erstellt.

Im folgenden Kapitel wird die Vorgehensweise bei der Erstellung der geologischen 3D-Modelle unter den betrachteten Modellierwerkzeugen dargestellt. In Bezug auf die implementierten methodischen Ansätze soll ihre Anwendung in Verbindung mit der Modellierung eines komplexen, realen Modellstandortes verdeutlicht werden. Zuvor wird ein Überblick zur verwendeten Datenbasis gegeben.

4.1 Datenbasis

Eine wesentliche Voraussetzung für einen Vergleich und eine Bewertung von Methoden, Modellierungskonzepten und vor allem Modellergebnissen ist, dass den jeweiligen Modellierprozessen einheitliche Rahmenbedingungen zugrunde gelegt werden.

Für den Fall der vergleichenden geologischen 3D-Modellierung bedeutet dies, dass für jede Modellerstellung prinzipiell eine identische initiale Datenbasis zur Verfügung stand. Diese Datengrundlage umfasst sämtliche Daten, wie sie bereits von FABRITIUS (2002) und HUBERT (2005) für die Modellierung des geologischen Raummodells Bitterfeld-Süd genutzt wurden. Wie in Kapitel 4.2 beschrieben, wird das von FABRITIUS (2002) erstellte 3D-Modell in der vorliegenden Arbeit als Referenz betrachtet.

Die Bereitstellung der entsprechenden Datenbasis für die Verwendung in verschiedenen Werkzeugen zur geologischen Modellierung soll eine möglichst objektive Vergleichbarkeit von Methoden, Modellierungskonzepten und -ergebnissen sicherstellen. Hierbei muss jedoch herausgestellt werden, dass nicht in jedem geologischen Modellierwerkzeug sämtliche Informationen dieser Datenbasis nutzbar waren. Da die Möglichkeiten zur Integration verschiedener Datentypen zwischen den Modellierwerkzeugen teilweise stark variieren, können Unterschiede zwischen den erreichten Ergebnissen bereits in dieser frühen Stufe des Modellierprozesses ihren Ursprung haben. Das in der initialen Datenbasis vorhandene, relativ breite Spektrum an Datentypen sollte jedoch dazu dienen, das Potential der untersuchten Modellierwerkzeuge, verschiedenste Informationsquellen in den Modellierprozess einfließen zu lassen, zu identifizieren.

4.1.1 Bohrungen

Bohrungen gehören zu den wichtigsten Informationsträgern für die geologische 3D-Modellierung. Sie liefern punktuelle Einblicke in den Untergrund und lassen in Kombination mit weiteren Daten Rückschlüsse auf die geologischen Lagerungsverhältnisse zu.

Der für die geologische 3D-Modellierung verwendete Bohrdatensatz umfasst insgesamt 114 Bohrungen (Abb. 4.2), welche nach dem in Tabelle 2.1 dargestellten Schlüssel stratifiziert sind. Diese Bohrungen wurden ebenfalls bei der Erstellung des Referenzmodells (FABRITIUS, 2002) in Verbindung mit der Konstruktion des Profilschnittnetzes genutzt. Bereits im Vorfeld der Modellierung wurden dabei von FABRITIUS (2002) alle Bohrungen, die in ihrer Teufe die Modellbasis nicht erreichten, künstlich und unter Berücksichtigung genetischer Aspekte bis zu dieser verlängert. Grundlage hierfür war ein ebenfalls von FABRITIUS (2002) erstelltes Modell der Schichtoberkante des oligozänen Rupeltons, welches dann für die Schichtkorrelation verwendet wurde. Der Rupelton bildet in der Region um Bitterfeld einen weit verbreiteten Grundwassergeringleiter. Seine Oberkante wurde deshalb als Modellbasis definiert.

Für die vergleichende geologische 3D-Modellierung unter verschiedenen Modellierwerkzeugen wurden die Bohrinformationen aus dem Referenzmodell ausgelesen. Das heißt, an jeder Bohrlokalisierung, die in die Erstellung des Referenzmodells eingegangen ist, wurden die Schicht-

bzw. Teufeninformationen aus dem Modell abgegriffen und anschließend wieder zu Bohrungen transformiert. Auf diese Weise wurden gewissermaßen künstliche Bohrungen generiert, die sowohl bezüglich ihrer Lokalität als auch ihrer Teufenangaben identisch zu jenen Bohrungen sind, wie sie von FABRITIUS (2002) zur Profilschnittvernetzung genutzt wurden. Die entsprechenden Bohrungen durchteufen die modellierte Schichtenfolge vollständig und erreichen somit die Modellbasis (Oberkante Rupelton).

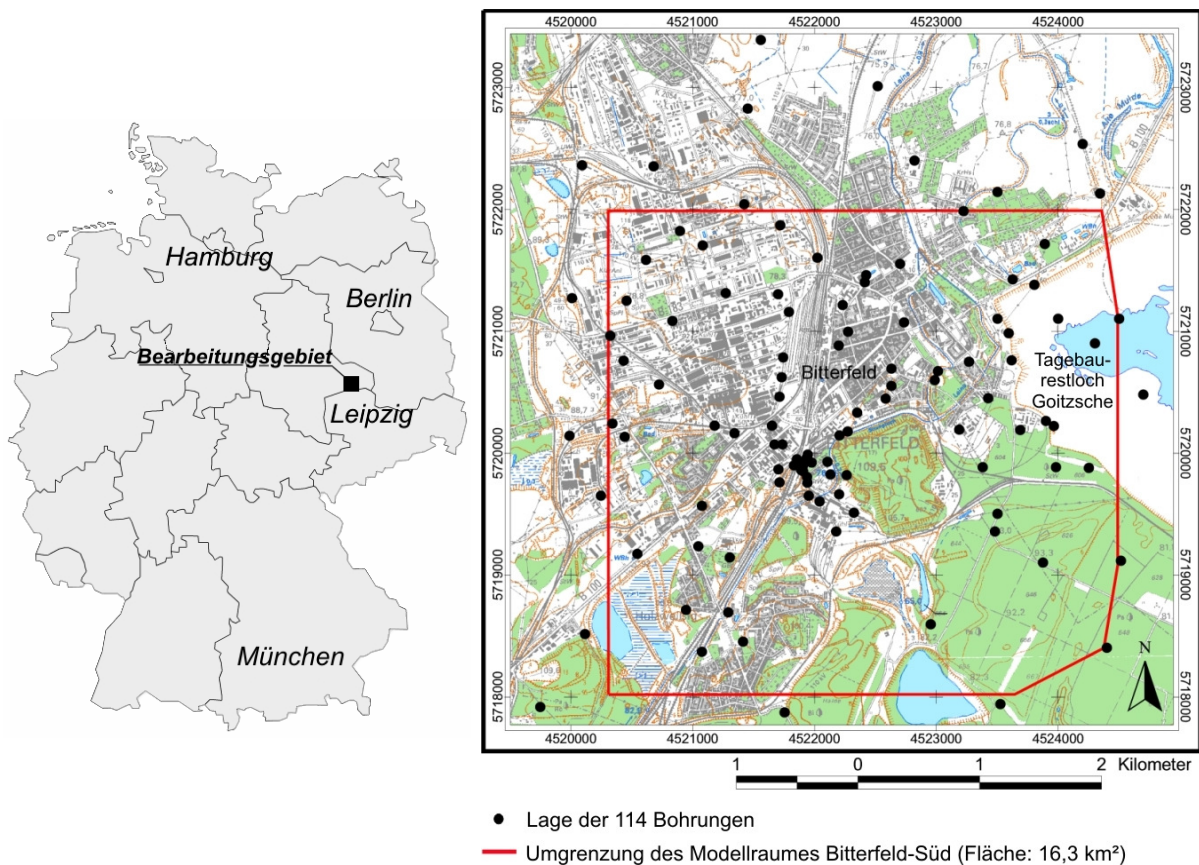


Abb. 4.2: Das Modellgebiet befindet sich im SE des Bundeslandes Sachsen-Anhalt und umfasst eine Fläche von etwa 16 km². Für die vergleichende geologische 3D-Modellierung wurden einheitlich 114 stratifizierte Bohrungen verwendet.

4.1.2 Digitales Geländemodell (DGM)

Das verwendete DGM basiert auf dem amtlichen Höhenmodell des Landesamtes für Landesvermessung und Datenverarbeitung Sachsen-Anhalt (Stand: 1. Quartal 2000). Dieses Höhenmodell bildet die topographische (Gelände-) Information in weiten Bereichen Sachsens-Anhalts in einem Raster von 10 x 10 m ab. Die theoretische Genauigkeit der Höheninformationen wird dabei mit 0,01 m angegeben, während die Lage der entsprechenden Höhendaten in der XY-Ebene vom realen Wert um +/- 0,5 m abweichen kann.

Im ursprünglichen DGM vorhandene Aussparungsflächen, die im Raum Bitterfeld überwiegend auf die ehemalige, intensive Bergbauaktivität zurückzuführen sind, wurden bereits von FABRITIUS (2002) mit Hilfe von Informationen aus topographischen Karten verschiedenen Alters und Maßstabs nachdigitalisiert und geschlossen. Auf diese Weise konnten auch die

Sedimentoberflächen der gefluteten Bereiche der Tagebaurestlöcher Freiheit IV und Holzweißig in das Höhenmodell integriert werden. Für den Bereich des heute gefluteten Tagebaurestlochs Goitzsche existierte bereits ein separates Höhenmodell, welches von FABRITIUS (2002) in das amtliche Höhenmodell eingepflegt wurde. Für das Modellgebiet Bitterfeld-Süd stand somit ein flächendeckendes DGM mit einer Rasterweite von 10 x 10 m zur Verfügung, in dem sämtliche Tagebaurestlöcher bzw. stehenden Gewässer nicht durch ihre Gewässeroberfläche sondern durch die entsprechende Sedimentoberfläche repräsentiert sind.

4.1.3 Thematische Karten

Informationen aus Kartenwerken können für den Prozess einer Modellbildung wertvolle Quellen für Interpretationen darstellen. Insbesondere im Fall der geologischen 3D-Modellierung erlauben bereits vorhandene geologische Karten in Verbindung mit topographischen Angaben Rückschlüsse auf die strukturellen Gegebenheiten im Untergrund und können damit entscheidend zur Entwicklung eines konzeptionellen Modells beitragen. Während des eigentlichen Modellierprozesses stellen die Informationen aus Karten neben den Bohrdaten eine wichtige Quelle für die Beschreibung geologischer Strukturen dar.

Die geologische Karte für den Modellraum Bitterfeld-Süd konnte der Arbeit von FABRITIUS (2002) entnommen werden. Sie repräsentiert die Verbreitung der im Modellgebiet oberflächlich anstehenden stratigraphischen Einheiten, wie sie in Tabelle 2.1 formuliert sind. Die Verbreitungsdarstellung wurde von FABRITIUS (2002) in Vorbereitung auf die geologische 3D-Modellierung aus zahlreichen älteren geologischen und thematischen Karten (z. B. Geologische Karte von Preußen aus den Jahren 1908 und 1913; Karte der Kippenverbreitung im Raum Bitterfeld, 1991; diverse Bodenkarten) erstellt und durch Geländebegehungen abgeglichen. Auch die Arbeit von HEROLD (2003), die sich unter anderem mit der geologischen Kartierung des Raumes Bitterfeld/Wolfen befasst, wurde für die Verifizierung der für die Modellierung genutzten Verbreitungsdarstellung herangezogen. Die auf diese Weise erstellte Karte zur oberflächigen Verbreitung der stratigraphischen Einheiten spiegelt für den Raum Bitterfeld-Süd den aktuellen Kenntnisstand wider. Sie war somit älteren Kartenwerken – die jüngste geologische Karte für den Landkreis Bitterfeld stammt aus dem Jahr 1938 – vorzuziehen, zumal diese in einem Gebiet, welches in der jüngeren Vergangenheit durch intensive Bergbauaktivitäten geprägt worden ist, oft nur eine Momentaufnahme zu einem bestimmten Zeitpunkt darstellen.

4.1.4 Digitale Orthophotos

Bei Orthophotos handelt es sich um geometrisch entzerrte und auf ein orthogonales Koordinatensystem projizierte Luftbilder. Die strenge Orthogonalprojektion ermöglicht dabei eine metrische bzw. geometrische Auswertung der Luftaufnahmen (BILL & FRITSCH, 1997). Mit verschiedenen Korrekturmaßnahmen, die auch als differentielle Entzerrung bezeichnet werden, können die Effekte der projektiven Verzerrung sowie die durch Reliefunterschiede bedingte Abhängigkeit bzw. Variabilität des Maßstabs beseitigt werden (vgl. GRENZDÖRFFER, 1994). Nach CALÖRTSCHER & KERSTEN (1998) lassen sich Orthophotos bezüglich ihrer geometri-

schen Eigenschaften und Genauigkeit mit herkömmlichen Karten vergleichen. Da jedoch der Detailreichtum des Luftbildes erhalten bleibt und keine Generalisierung bzw. Vorinterpretation erfolgt, besitzen Orthophotos meist einen deutlich höheren Informationsgehalt als vergleichbare Kartendarstellungen.

Die im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit verwendeten digitalen Orthophotos vom Raum Bitterfeld (Landesamt für Vermessung und Geoinformation Sachsen-Anhalt, Stand: 2000) sind in das Landeskoordinatensystem eingepasst und entsprechend georeferenziert. Sie liegen einheitlich im Maßstab 1:10.000 vor und bilden dabei eine Fläche von 4 km² (Kantenlänge 2 x 2 km) ab. Die (Pixel-) Auflösung beträgt 40 x 40 cm, weshalb reale Objekte mit einer Größe unter 0,4 m nicht abgebildet werden können.

Im Hinblick auf die Aspekte der geologischen 3D-Modellierung wurden digitale Orthophotos unter anderem zur Überprüfung der Verbreitung einzelner oberflächlich anstehender Schichtglieder, wie Bergbaukippen oder Deponien, sowie zur Abgrenzung von Tagebaurestlöchern genutzt. Aber auch bei der Darstellung und Auswertung von Modellergebnissen können entsprechend überlagerte Orthophotos entscheidend zur Verdeutlichung des topographischen Raumbezuges beitragen.

4.2 GeoObject/GSI3D – Das Referenzmodell

Bereits im Rahmen des Projektverbundes SAFIRA I wurde von FABRITIUS (2002) ein hochauflösendes geologisches 3D-Strukturmodell des Raumes Bitterfeld-Süd auf der Basis eines konstruktiven, profilschnittgestützten Modellierungsansatzes (vgl. Kap. 3.3 und 3.4) erstellt.

Neben Bohrdaten, Karten- und DGM-Informationen stützte sich der Modellierprozess auf umfassendes Expertenwissen regional erfahrener Geologen und iterative Interpretationsarbeiten. Damit stand für die Modellierung eine besonders umfangreiche Daten- und Wissensgrundlage zur Verfügung, wie sie nur in wenigen Fällen vorhanden und vor allem auch verwertbar ist. In Verbindung mit Konsistenz- und Plausibilitätsprüfungen, welche den iterativen Modellierprozess begleitet haben, entstand so ein in sich schlüssiges Modell, welches die geologischen Verhältnisse mit hoher Realitätsnähe widerspiegelt. Aus diesem Grund diente das von FABRITIUS (2002) entwickelte Modell als Referenz- bzw. Vergleichsmodell für sämtliche, im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit erstellten geologischen Modelle. Alle vergleichenden Untersuchungen und Darstellungen wurden in Bezug auf dieses Modell durchgeführt bzw. angefertigt.

Das Referenzmodell umfasst mit einer Ausdehnung von etwa 4 x 4 km eine Fläche von ca. 16 km² und wurde auf Basis von 114 stratifizierten Bohrungen und 28 konstruierten Profilschnitten erstellt (vgl. Abb. 4.3). Der Verlauf der Profilschnitte orientiert sich dabei an den Bohrlokalitäten. Damit stellen die Bohrungen zugleich Kreuzungspunkte der Profilschnitte dar, wodurch die Konsistenz sichergestellt und eine Plausibilitätsprüfung vereinfacht möglich war. Das erstellte Profilschnittnetz besteht aus 8 E-W orientierten Schnitten, 9 N-S verlaufenden Schnitten sowie je 4 in NW-SE- und NE-SW-Richtung orientierten Profilschnitten. Im zentralen Bereich des Modellgebietes wurden zudem 3 Detailschnitte angelegt.

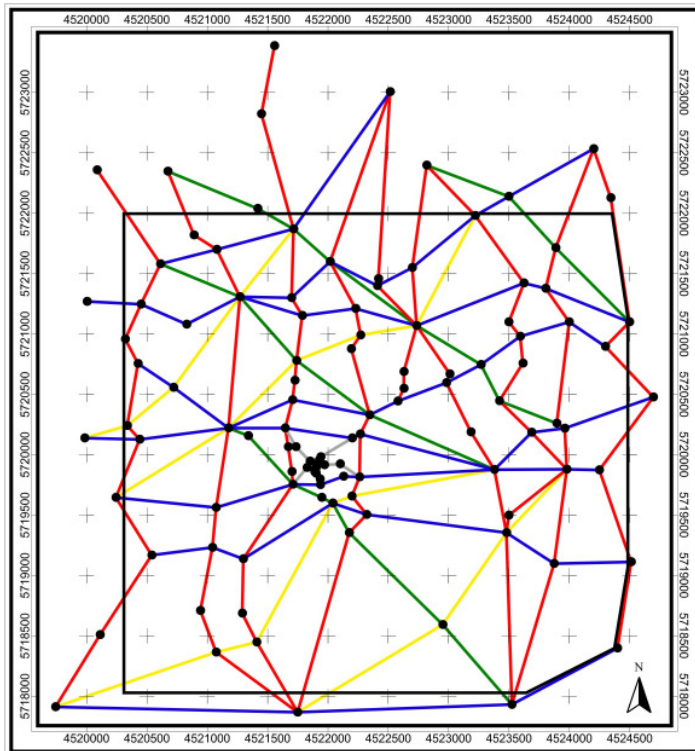


Abb. 4.3: Das Profilschnittnetz, wie es zur Erstellung des Referenzmodells zur Anwendung kam. Die Bohrlokalitäten sind als schwarze Punkte dargestellt. In rot: N-S verlaufende Profilschnitte; blau: E-W orientierte Schnitte; gelb bzw. grün: NE-SW bzw. NW-SE orientierte Profilschnitte. Die Detailschnitte im zentralen Bereich des Modellgebietes sind in grau gehalten.

Die Aspekte der Modellerstellung lassen sich vereinfacht wie folgt zusammenfassen:

- Einladen von DGM und stratifizierten Bohrungen,
- Definition des Profilschnittnetzwerkes,
- Einbindung bzw. Digitalisierung von Polygonzügen, welche die oberflächige und laterale Verbreitung der einzelnen Schichtglieder charakterisieren,
- Konstruktion der Schichtgrenzen entlang der definierten Profilschnitte,
- vertikale Projektion der Verbreitungspolygone auf die gemeinsame Unterkante der Hangendschichten,
- schichtweise Abtastung der konstruierten Profilschnitte und Verbreitungspolygone, damit Erstellung bzw. Erweiterung der schichtflächenbezogenen Datenbasis,
- Vernetzung der Datenpunkte zu Schichtflächen mittels Triangulation,
- ggf. iterative Erweiterung des Profilschnittnetzes, erneute Abtastung und Triangulation, Anpassung und Bereinigung der TINs,
- Übertragung der TINs auf ein Raster mit benutzerdefinierter Diskretisierung,
- Beschneidung und Anpassung der Schichtflächenraster gemäß einer im SFB-Modell (Schichten-Folge-Beschreibung) definierten regionalen Modellhierarchie.

Die Modellierung der Schichtflächen erfolgte dabei von oben nach unten bzw. im Hinblick auf die regionale Modellhierarchie von hoch nach niedrig.

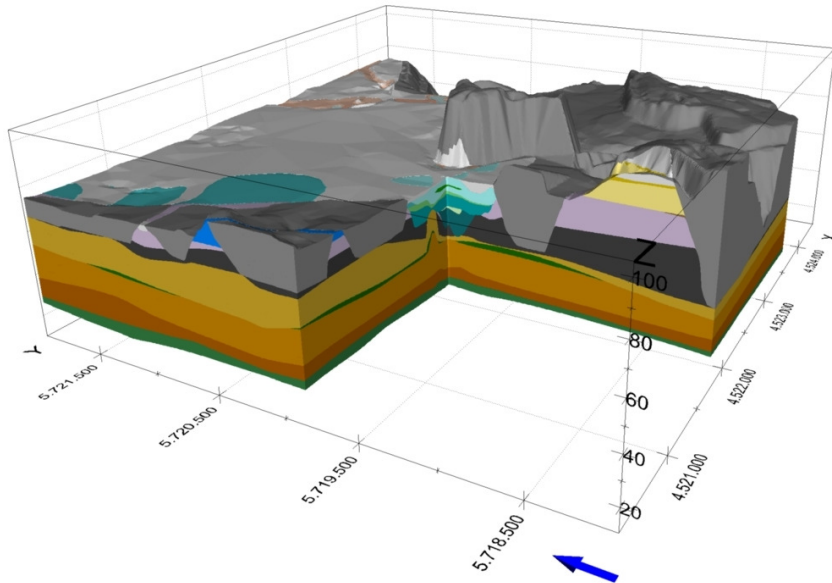


Abb. 4.4: Das Referenzmodell Bitterfeld-Süd, 15fach überhöht. Zum Zweck eines besseren Einblicks wurde ein Teil des Modells ausgeblendet. Deutlich sind die tief in die unterlagernde Schichtenfolge eingreifenden Bergbaukippen sowie die heterogene Situation im Zentrum des Modellgebietes zu erkennen. (Legende: siehe Anhang 3)

Das als Referenz dienende Modell wird aus 22 individuellen lithostratigraphischen Einheiten aufgebaut, welche die quartären und tertiären Ablagerungen des Raumes Bitterfeld-Süd repräsentieren. Eine detaillierte Übersicht zur geologischen Situation und stratigraphischen Umsetzung im Modell liefert Kapitel 2. Die ursprüngliche horizontale Modellauflösung von 10 x 10 m wurde aus Gründen der Handhabbarkeit mittels linearer Interpolation auf 20 x 20 m reduziert. Im Vergleich zur originalen Auflösung zeigten sich in Bezug auf Verbreitung, Geometrie und Volumina der Schichtkörper keine nennenswerten Unterschiede, so dass eine Herabsetzung der Modellauflösung mit dem Ziel einer vereinfachten Datenhandhabung problemlos möglich war.

4.3 MVS

Das Programmsystem MVS unterstützt ausschließlich den interpolativen Modellierungsansatz. Die implementierten Verfahren sind weitestgehend automatisiert.

Für die Modellierung mussten die Bohrdaten entsprechend aufbereitet werden. Denn eine der Voraussetzungen in MVS ist, dass alle entsprechend der regionalen Modellhierarchie definierten Schichtglieder in allen Bohrungen enthalten sein müssen. Der ursprüngliche Bohrdatensatz wurde dahingehend aufbereitet: War eine Schicht in der realen Bohrung nicht vorhanden, bekam sie in der zugehörigen Modell-Bohrung den Z-Wert der überlagernden Schicht zugewiesen.

Eine weitere Besonderheit in MVS ist, dass alle Schichtflächen und damit auch die resultierenden Volumenkörper über das gesamte Modellgebiet verbreitet sein müssen. Diese Eigenschaft führte dazu, dass Schichtkörper mit eingeschalteten Linsenstrukturen durch zwei Modellschichten darzustellen waren. In diesem Zusammenhang war die Modellhierarchie um entsprechende Schichtglieder zu erweitern. In den Bohrungen erfolgte die Trennung der betroffenen Schichtglieder entlang ihrer halbierten Mächtigkeit. Abbildung 4.5 stellt diesen Aspekt schematisch dar.

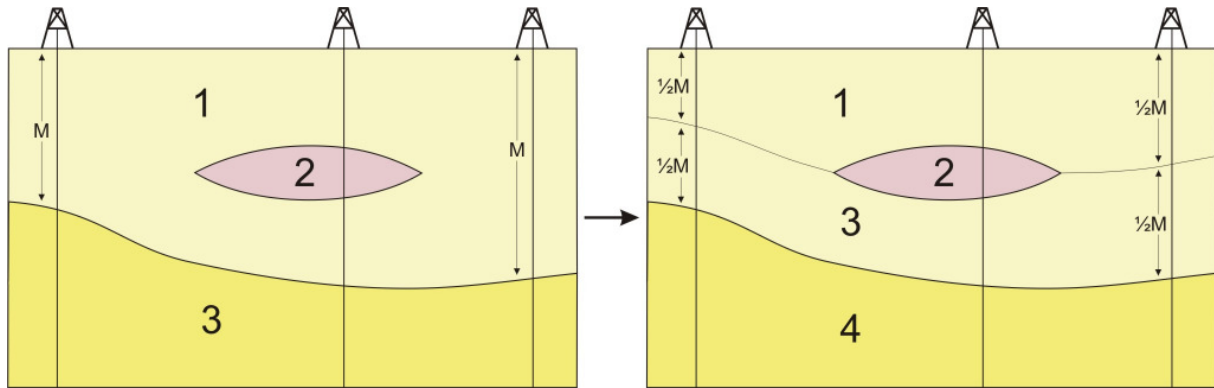


Abb. 4.5: Die Anpassung von Bohrungen und Modellhierarchie an die Bedingung, dass alle Schichtglieder über das gesamte Modellgebiet verbreitet sind. Das Auftreten von Linsenstrukturen resultiert in einer Zweiteilung der betroffenen Schichtglieder (M : Mächtigkeit).

Die Modellierung allein auf der Grundlage von Bohrinformationen führte im Zusammenhang mit der vorhandenen Bohrdatendichte sowie der komplexen geologischen Situation, wie sie im Raum Bitterfeld-Süd anzutreffen ist, zu keinen befriedigenden Ergebnissen (Abb. 4.6 A).

Dies liegt darin begründet, dass bei einer Modellerstellung aus Bohrungen keinerlei zusätzliche Informationen in den Modellierprozess einfließen können. Damit ließen sich weder ein DGM noch Informationen zur lateralen Ausdehnung der Schichtkörper integrieren. Auch eine Einflussnahme auf die Parameter der Kriging-Interpolation, welche neben der so genannten Spline-Interpolation als einzige für die geologische Modellierung zur Verfügung steht, ist nur sehr begrenzt möglich. Neben einem Symmetrie- bzw. Anisotropie-Faktor lassen sich für die Varianzanalyse weiter der Suchradius und ein Minimum für die (Aussage-) Reichweite, ab dem der Sill oder Schwellenwert frühestens erreicht werden darf, definieren. Das Variogrammmodell wird dann automatisch vom System generiert. Dabei handelt es sich stets um ein sphärisches Modell, welches nach der Methode der kleinsten Quadrate an die analysierte Datenbasis angepasst wird. Die Anwendung eines Symmetrie- bzw. Anisotropie-Faktors definiert dabei das Verhältnis der Aussage- bzw. Reichweiten für die orthogonal zueinander orientierten Achsen des (Semi-) Variogramms (Haupt- und Nebenachse).

Ein weiteres Problem, welches bereits unter Kapitel 3.4.4 beschrieben wurde, ergab sich durch den Umstand, dass jede Schicht in allen Bohrungen repräsentiert sein muss. Somit wird jede Schichtgrenze durch exakt die gleiche Anzahl von Datenpunkten beschrieben. Dies kann im Fall von tief eingeschnittenen Erosionsstrukturen problematisch sein (vgl. Abb. 3.15). Zwar besitzen ausgeräumte Schichtglieder an den betroffenen Bohrlokalitäten eine Mächtigkeit von 0 m, die zugehörigen Schichtflächen werden jedoch unter Berücksichtigung der definierten Modellhierarchie unter der Erosionsstruktur hindurch geführt.

Aufgrund der unzureichenden Ergebnisse, die im Zuge einer Modellierung allein auf der Basis von Bohrinformationen erreichbar waren, wurde unter MVS ein zweites Modell entwickelt (Abb. 4.6 B), welches auf einer abweichenden modelltechnischen Umsetzung beruht. Dabei wurden schichtbezogene Datensätze generiert, die neben den Bohrdaten auch Informationen

aus dem DGM enthalten. Unter Berücksichtigung der Modellhierarchie wurden aus dem DGM mit Hilfe von Verbreitungspolygonen in ArcGIS schichtbezogen Datensätze selektiert und den entsprechenden Datensätzen zur Schichtbeschreibung angehängt. Die aus dem DGM gewonnenen Daten beschreiben jene Bereiche, in denen eine Modellschicht nicht an der Oberfläche verbreitet ist. Die Schichtunterkante bekommt in diesem Fall die Z-Werte des DGMs zugewiesen und fällt mit selbigem zusammen. Bei dem Vorgang der Selektion von DGM-Informationen ist jedoch unbedingt die Hierarchie zu berücksichtigen. Ausgehend von der obersten Modellschicht wird die Selektion sukzessive für die hierarchisch tiefer eingestuften Modellschichten durchgeführt, wobei sich der Umfang der aus dem DGM selektierten Daten zunehmend verringert.

Zudem wurden die Kippenkörper separat von der übrigen Schichtenfolge, welche zusammenhängend bearbeitet wurde, modelliert. Hierdurch war es möglich, zunächst ein Modell zu generieren, welches annähernd jene geologische Situation widerspiegelt, wie sie sich ohne anthropogene Eingriffe darstellen würde. Da die Schichtenfolge bis auf die Kippenkörper zusammenhängend modelliert wurde, waren auch die Interpolationsparameter für alle Schichtflächen einheitlich zu definieren. Aus diesem Grund wurde der Symmetrie-Faktor auf den Wert 1 gesetzt. Die resultierenden Variogramme sind damit omni-direktional. Der Suchradius für die Varianzanalyse wurde mit 3800 m auf etwa $\frac{2}{3}$ des maximalen Abstandes zwischen zwei Datenpunkten in der Datenbasis begrenzt.

Zum Abschluss der Modellierung wurde die Schichtenfolge mit der Unterseite der separat modellierten Bergbaukippen beschnitten und anschließend mit den Kippenkörpern zu einem 3D-Modell vereinigt.

Im Zuge der Beschneidung von Schichtflächen oder -körpern werden unter MVS die betroffenen Bereiche durch Triangulation mit zusätzlichen Stützpunkten besetzt bzw. ergänzt. Dies stellt sicher, dass die beschnittenen Flächen oder Körper exakt mit der zur Beschneidung verwendeten Fläche zusammenfallen. Dadurch werden Lücken oder Überlappungen vermieden und damit die Konsistenz des Modells gewahrt. Durch diese Art der Beschneidung zeigt MVS als einziges der betrachteten Modellierwerkzeuge, welche den interpolativen Modellierungsansatz nutzen, nicht die unter Kapitel 3.4.4 beschriebenen und in Abbildung 3.14 dargestellten Artefakte einer hierarchiebezogenen Schichtflächenkorrektur.

Die modelltechnische Umsetzung lässt sich wie folgt zusammenfassen:

- Anpassung des Bohrdatenbestandes und der Modellhierarchie an die modelltechnischen Anforderungen von MVS,
- Separation des Bohrdatenbestandes in Kippenstrukturen und die übrige Schichtenfolge beschreibende Informationen,
- schichtflächenbezogene Erweiterung der Datenbasis um DGM-Informationen unter Berücksichtigung der regionalen Modellhierarchie,
- separate Modellierung von Bergbaukippen und der übrigen Schichtenfolge,

- Beschneidung aller erstellten Schichtglieder mit der Unterkante der Kippenkörper,
- Vereinigung von Bergbaukippen und dem übrigen Schichtstapel zu einem zusammenhängenden, konsistenten 3D-Modell.

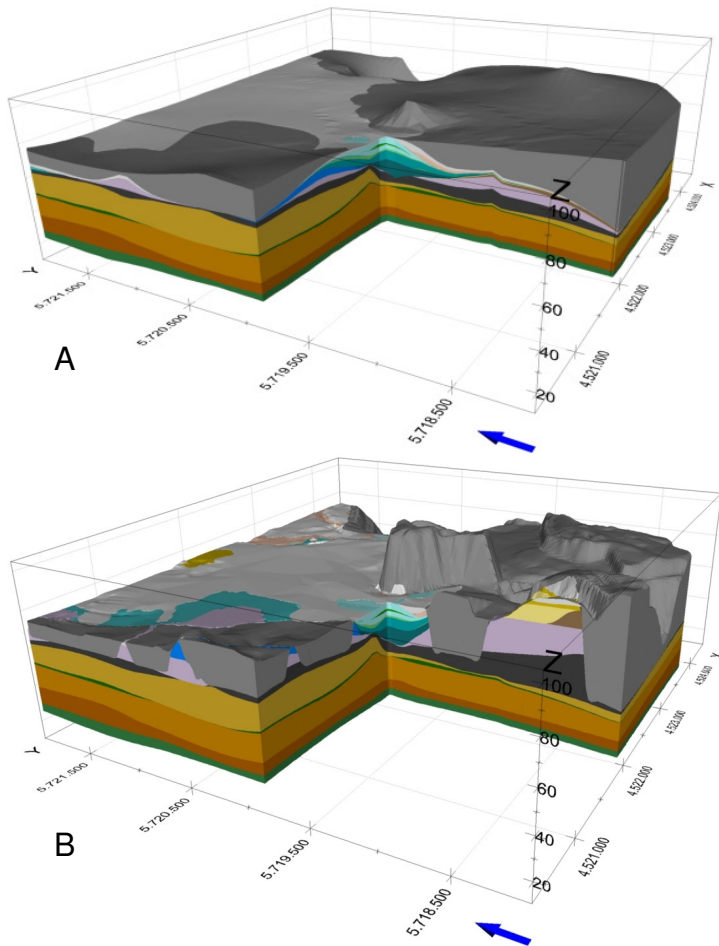


Abb. 4.6: Die beiden unter MVS erstellten geologischen 3D-Modelle. Das unter A dargestellte Modell wurde allein auf der Grundlage von Bohrformationen erstellt. In das unter B abgebildete Modell sind neben Bohrdaten auch Informationen aus dem digitalen Geländemodell eingeflossen. Diese wurden unter Berücksichtigung der Modellhierarchie sowie unter Verwendung von Verbreitungspolygonen schichtweise selektiert und den entsprechenden Daten zur Modellerstellung angehängt. In beiden Modellen wurde zum Zweck eines besseren Einblicks der südwestliche Teil ausgeblendet. Deutlich ist zu erkennen, dass die Modellierung allein auf der Basis von Bohrdaten zu keinen befriedigenden Ergebnissen führte. Dagegen spiegelt die geologische Situation des unteren Modells annähernd die Verhältnisse des Referenzmodells wider. Beide Darstellungen sind 15fach überhöht. Die über das gesamte Modellgebiet verbreiteten Schichtkörper sind ab einer Mächtigkeit von 0,1 m dargestellt. (Legende: siehe Anhang 3)

Die horizontale Auflösung beider Modelle beträgt 20 x 20 m. Die Schichtflächen wurden jeweils auf ein strukturiertes, kurvenförmiges Raster interpoliert, dessen Geometrie von einem, die Datenbasis einhüllenden, Polygon (*Convex Hull*) bestimmt wird. Für alle weiterführenden Betrachtungen wurde ausschließlich das unter Abbildung 4.6 B dargestellte Modell herangezogen.

4.4 RockWorks

Die Modellierung unter RockWorks erfolgte ebenfalls unter einem flächenbasierten, interpolativen Modellierungsansatz. Im Vergleich zu MVS stellt RockWorks für die Interpolation von (Schicht-) Flächen zahlreiche Verfahren zur Verfügung (vgl. Anhang 2). Um jedoch die Vergleichbarkeit zu wahren, war ebenfalls Kriging das Interpolationsverfahren der Wahl.

Wie MVS, so bietet auch RockWorks im Zusammenhang mit der Variogrammerstellung nur eingeschränkte Möglichkeiten einer umfassenden, manuellen Datenanalyse. Jedoch können die Variogrammparameter im Vergleich zu MVS detaillierter vorgegeben bzw. angepasst

werden. Die Variogrammerstellung wird über die Wahl des Variogrammodells (sphärisch, exponentiell, linear) sowie die Parameter *Spoke Angle*, *Spoke Tolerance*, *Distance Increments*, *Distance Tolerance* und *Maximum Distance* definiert (Abb. 4.7). Für den Fall, dass Anisotropien berücksichtigt werden sollen, müssen die Parameter *Spoke Angle* und *Spoke Tolerance* ausreichend klein gewählt werden, so dass Richtungsabhängigkeiten während der Datenanalyse erkannt werden können. Sowohl die Datenanalyse als auch die Anpassung des gewählten Variogrammodells erfolgt automatisch und programmintern ohne eine Visualisierung der Ergebnisse. Eine Überprüfung der Ergebnisse der Varianzanalyse ist somit nicht möglich.

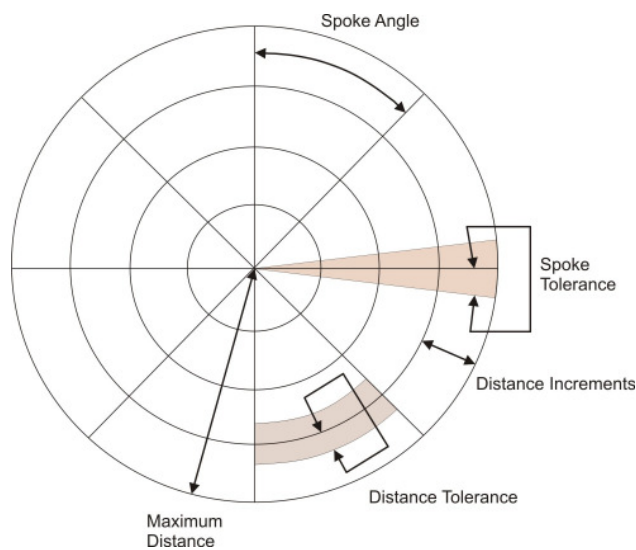


Abb. 4.7: Die Parameter, welche unter RockWorks in Vorbereitung einer Varianzanalyse definiert werden können. Auf Basis dieser Parameter werden die Datenpaare für die Varianzanalyse zusammengestellt. Anschließend wird das zuvor gewählte Variogrammodell automatisch und programmintern an das experimentelle Variogramm angepasst.

Bohrdaten werden in RockWorks ausschließlich über Teufeninformationen gehalten, wobei für jede Schicht Top und Basis angegeben werden. Wie in MVS, so sind auch unter RockWorks alle Schichtglieder in allen Bohrungen vertreten. Schichten, die Linsenstrukturen enthalten, waren, wie auch unter MVS, in zwei Schichtkörper aufzusplitten. Die regionale Modellhierarchie wird über eine separate Stratigraphietabelle definiert.

Auch unter RockWorks führte die Modellierung rein auf der Grundlage von Bohrdaten nur zu unbefriedigenden Ergebnissen. Das resultierende Modell ähnelt stark dem in Abbildung 4.6 A dargestellten Modell. Aus diesem Grund wurde die ursprüngliche Datenbasis ebenfalls um Informationen erweitert, die schichtflächenbezogen aus dem DGM gewonnen wurden.

Nach der Aufbereitung und Erweiterung der Datenbasis wurden im weiteren Verlauf der Modellierung sämtliche Schichtunterkanten separat auf ein regelmäßiges Raster mit einer Auflösung von 20 x 20 m interpoliert. Mit Ausnahme der weichselzeitlichen Rinne basiert die Interpolation der Schichtflächen auf omni-direktionalen Variogrammen (*Spoke Angle*: 0°, *Spoke Tolerance*: 90°). Der Suchradius (*Maximum Distance*) wurde mit 3800 m auf ca. $\frac{2}{3}$ des maximalen Abstandes zwischen zwei Datenpunkten in der Datenbasis begrenzt. Für die Unterseite der weichselzeitlichen Rinne wurden *Spoke Angle* und *Spoke Tolerance* mit 10° bzw. 5°

definiert. Hierdurch war sichergestellt, dass Richtungsabhängigkeiten bei der automatischen Varianzanalyse ausreichend berücksichtigt werden können. Für sämtliche Variogramme wurde ein sphärisches Variogrammodell gewählt.

Die resultierenden Schichtflächen sind, wie auch in MVS, über das gesamte Modellgebiet verbreitet.

Die separate Modellierung der Schichtflächen hat gegenüber einer zusammenhängenden Modellierung, wie sie in MVS stattfindet, den Nachteil, dass die einzelnen Schichtflächen nicht zueinander in Beziehung stehen. Das heißt, es kann unter Umständen zu Überlappungen kommen. Um diesem Problem entgegenzuwirken, wurden sämtliche Schichtflächen manuell mit einem so genannten *High-Stop/Low-Pass* Filter bearbeitet. Dabei wird zunächst eine Fläche als primäre und eine andere als sekundäre Fläche definiert. Im weiteren Verlauf werden alle Bereiche, in denen die sekundäre Fläche über der primären Fläche liegt, an die Z-Werte der primären Fläche angepasst. Abbildung 4.8 stellt die Wirkungsweise des Filters schematisch dar. Die Flächenkorrektur wurde, ausgehend vom DGM, sukzessive für alle hierarchisch tiefer liegenden Schichtflächen durchgeführt, wobei die primäre Fläche stets von der zuvor korrigierten, hierarchisch höher eingestuft Fläche gestellt wurde.

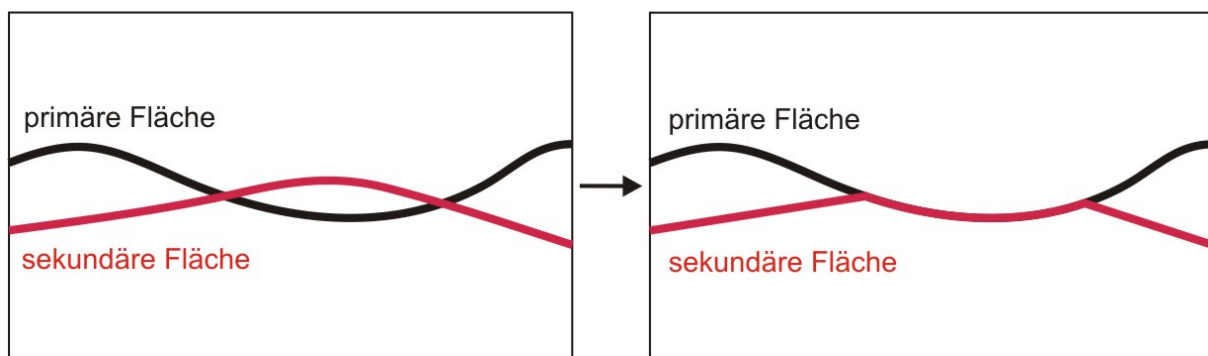


Abb. 4.8: Schematische Darstellung der Wirkungsweise des *High-Stop/Low-Pass* Filters: Durchdringen sich zwei Schichtflächen, wird die sekundäre Fläche zugunsten der primären Fläche angepasst.

Da es sich hierbei nicht um eine Beschneidung sondern lediglich um eine vertikale Anpassung der betroffenen Z-Koordinaten handelt, bleiben sämtliche Schichtflächen und damit auch die Schichtkörper über das gesamte Modellgebiet verbreitet. Das resultierende Modell zeigt in Bereichen steil einfallender Flächen die unter Kapitel 3.4.4 beschriebenen und in Abbildung 3.14 dargestellten Artefakte einer hierarchiebezogenen Schichtflächenanpassung.

Zum Abschluss der Modellierung wurden die angepassten Schichtflächen zu einem zusammenhängenden Volumenmodell vernetzt.

Das 3D-Modell zeigt insbesondere in Bereichen hoher räumlicher Variabilität Artefakte, die in der Interpolation begründet liegen (vgl. Abb. 4.9). Verantwortlich hierfür sind so genannte *Over-* und *Undershoots*, welche besonders an steil einfallenden Schichtgrenzen auftreten. Im Zuge der Interpolation wird gewissermaßen der Trend steil einfallender Flächen berücksich-

tigt, so dass die interpolierte Fläche Z-Werte enthält, die maßgeblich über bzw. unter den entsprechenden Werten der Datenbasis liegen können.

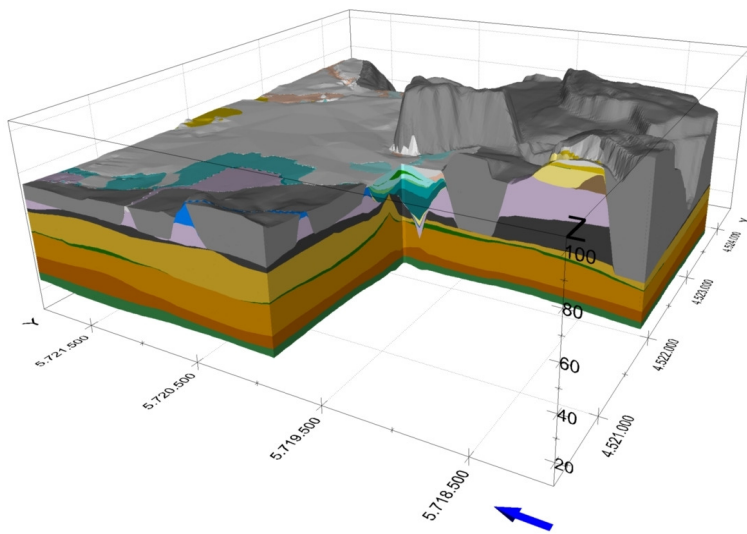


Abb. 4.9: Das unter RockWorks erstellte Modell zeigt besonders im Zentrum, das durch komplexe geologische Verhältnisse geprägt ist, die von der Interpolation verursachten Artefakte. Die beschränkten Möglichkeiten zur Steuerung der Kriging-Interpolation führen besonders bei hoher räumlicher Variabilität zu *Over-* und *Undershoots*. Der SW-Teil des Modells wurde ausgeblendet. Darstellung 15fach überhöht. Die über das gesamte Modellgebiet verbreiteten Schichtkörper sind ab einer Mächtigkeit von 0,1 m dargestellt. (Legende: siehe Anhang 3)

4.5 GMS

In GMS sind sowohl Ansätze für eine konstruktive, profilschnittgestützte als auch eine interpolative Modellierung implementiert. Dabei ist es prinzipiell auch möglich, beide Modellierungsansätze miteinander zu kombinieren. Jedoch hat sich in Verbindung mit der ausgesprochen heterogenen geologischen Situation im Modellgebiet Bitterfeld-Süd herausgestellt, dass die Modellierung auf Basis eines konstruktiven, profilschnittgestützten Ansatzes aufgrund zahlreicher Einschränkungen in GMS nicht möglich war.

Die folgenden Eigenschaften führten dazu, dass unter GMS ebenfalls ausschließlich der Ansatz einer interpolativen, flächenbasierten Modellierung zur Anwendung kam:

- Im Profilschnitteditor ist stets nur der Abschnitt zwischen zwei Bohrungen einseh- und bearbeitbar. Das heißt, Trends, wie sie zum Beispiel von lateral angrenzenden Profilabschnitten vorgegeben werden, können bei der Konstruktion des aktuellen Abschnittes nicht berücksichtigt werden (behooben in Version 6.5).
- In einem Profilschnitt können ausschließlich Schichtflächen erstellt bzw. modelliert werden, die mindestens in einer der beiden angrenzenden Bohrungen vorhanden sind. Es ist somit nicht möglich, zusätzliche Schichtglieder in den Profilschnitt einzubinden.
- Eine korrekte und detaillierte Anpassung der Profilschnitte an die oberflächige Verbreitung von Schichtgliedern ist nahezu unmöglich, da diese im Profilschnitteditor nicht visualisiert werden kann.
- Profilschnitte können sich stets nur an Bohrlokalitäten kreuzen, da alle anderen Kreuzungspunkte im Bearbeitungsmodus nicht dargestellt werden bzw. die entsprechende Höhenlage der äquivalenten Schichtgrenzen im durchkreuzten Profilschnitt nicht visu-

alisiert wird. Dies hat zur Folge, dass während der Profilschnitterstellung eine Konsistenzprüfung nur schwer bis überhaupt nicht möglich ist.

Wie bei den anderen Modellierwerkzeugen, so benötigte auch die Modellierung unter GMS vorab eine Aufbereitung bzw. Anpassung der Datenbasis. Als Besonderheit ist dabei herauszustellen, dass sich die Modellierung unter GMS auf die Schichtoberkanten bezieht, während alle weiteren betrachteten Modellierwerkzeuge stets Schichtunterkanten modellieren. Die Bohrdatensätze waren somit entsprechend anzupassen. Dabei werden Schichtflächeninformationen ausschließlich in Form von Höhenangaben gehalten. Eine Angabe von Teufen ist nicht vorgesehen. Im Gegensatz zu MVS und RockWorks werden in den Bohrungen unter GMS ausschließlich die real vorhandenen Schichtglieder erfasst bzw. aufgeführt. Im Wesentlichen folgte die Anpassung der Datenbasis jedoch ähnlichen Regeln wie unter MVS und RockWorks. Die Zuordnung der entsprechenden Schichtinformationen zu einer stratigraphischen Einheit erfolgt unter GMS über die Vergabe einer so genannten *Material ID*.

Eine weitere Besonderheit von GMS ist, dass sich neben Bohrdaten ebenfalls Verbreitungspolygone in die Modellierung einbinden lassen, welche die Geometrie der Schichtkörper maßgeblich beeinflussen können. Da das resultierende 3D-Modell ebenfalls aus Schichtkörpern besteht, welche in ihrer Ausdehnung die gesamte Fläche des Modellgebietes einnehmen, dienten die Verbreitungspolygone dazu, ein initiales bzw. primäres, für alle Schichtflächen gültiges TIN zu definieren. Dieses TIN ist hinsichtlich seiner Geometrie sowohl an die oberflächige Verbreitung der einzelnen Schichtglieder als auch an die Bohrlokalitäten angepasst worden (vgl. Abb. 4.10). Auf diese Weise war gewährleistet, dass die Zielfläche für die Interpolation entlang der Ausbisslinien der Schichtkörper durch zusätzliche Stützpunkte definiert ist.

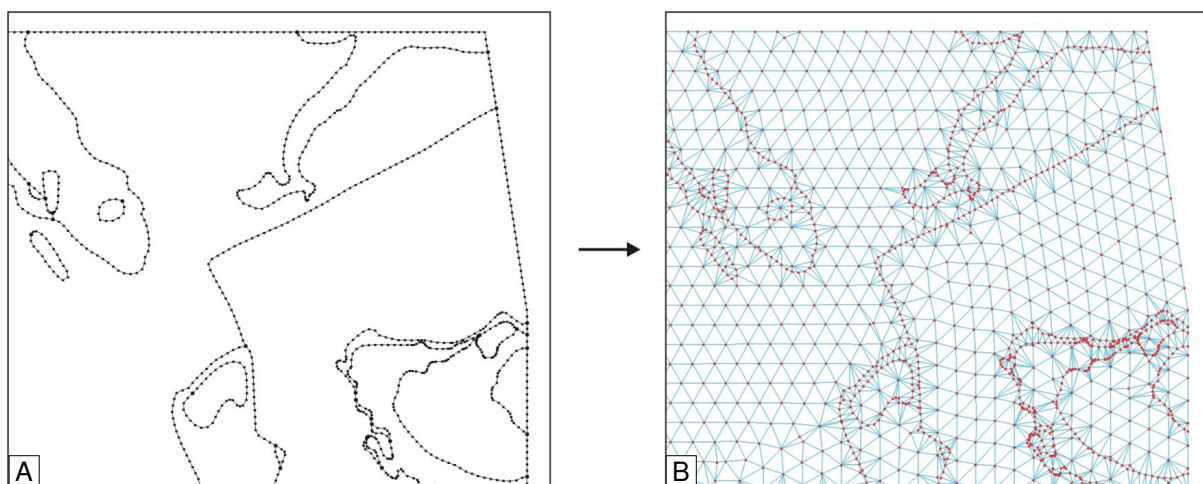


Abb. 4.10: Ein Ausschnitt des Modellgebietes Bitterfeld-Süd in der Aufsicht. Unter GMS wurde die Information zur oberflächigen Verbreitung von Schichtkörpern (A) genutzt, um eine initiale Zielfläche für die Interpolation zu erstellen, die in ihrer Geometrie sowohl an die Lage der Bohrungen als auch an die Ausbisslinien der Schichtglieder angepasst ist (B).

Für die Interpolation der Schichtflächen wurde dann, wie auch unter MVS und RockWorks, ein Datensatz verwendet, der um Informationen aus dem DGM schichtflächenbezogen erweitert worden ist.

Aus Gründen der Vergleichbarkeit wurde unter GMS ebenfalls das Interpolationsverfahren (Ordinary) Kriging verwendet. Von den betrachteten Modellierwerkzeugen, die den interpolativen Ansatz implementiert haben, bietet GMS die umfangreichsten Möglichkeiten, die Interpolationsparameter und damit die Ergebnisse der Interpolation zu beeinflussen. Anisotropien lassen sich entweder durch die Angabe eines Anisotropie-Faktors oder durch die Definition gerichteter Variogramme berücksichtigen. Die Varianzanalyse selbst erfolgt manuell. Das heißt, es wird zunächst ein experimentelles Variogramm erstellt, an welches dann eine Variogrammfunktion angepasst wird. Bei der Verwendung von Anisotropie-Faktoren wird für die Haupt- und Nebenachse des Variogramms dasselbe Variogrammmodell genutzt, lediglich die Aussageweite wird entsprechend des definierten Faktors variiert. Bei der Anwendung gerichteter Variogramme werden für Haupt- und Nebenachse jeweils separate Variogramme erstellt, wobei neben der Reichweite auch das Variogrammmodell variiert werden kann.

Die wechsellagernde Rinne ausgenommen, wurden für die zu modellierende Schichtenfolge symmetrische und somit omni-direktionale Variogramme auf Basis eines sphärischen Modells erstellt. Der definierbare maximale Suchradius wurde ebenfalls auf 3800 m begrenzt. Das Variogramm für die Rinne wurde mit einem Anisotropie-Faktor von 0,5 belegt, wobei die Hauptachse mit 160° entlang der Richtung des größten Datenzusammenhangs und damit parallel zur Streichrichtung der Rinnenstruktur orientiert ist. Das gewählte Variogrammmodell ist ebenfalls sphärisch.

Generell lassen die Variogramme der Schichtflächen, welche um Daten aus dem DGM erweitert wurden, eine Zweiteilung erkennen. Die Varianz steigt mit zunehmender Entfernung zunächst an und erreicht dann ein erstes Plateau. Im weiteren Verlauf erhöht sich die Varianz erneut bis zu einem zweiten Schwellenwert (Abb. 4.11 A). Die erste Abflachung wird dabei durch die engmaschigen Daten aus dem DGM hervorgerufen, während der zweite Anstieg bzw. Schwellenwert die Analyse der Bohrinformationen widerspiegelt. Um die Interpolation nicht zu verfälschen, wurden die Variogrammmodelle an das experimentelle Variogramm der Bohrdaten angepasst. Dagegen zeigen die experimentellen Variogramme der tieferliegenden Schichtglieder, welche nicht mit zusätzlichen Daten aus dem DGM besetzt worden sind, mit zunehmender Entfernung der Datenpaare einen allmählichen Anstieg der Varianz, bevor schließlich ein Schwellenwert erreicht wird (Abb. 4.11 B).

Um sicherzustellen, dass keine Flächendurchdringungen auftreten, waren die einzelnen Schichtflächen nach der Interpolation unter Berücksichtigung der regionalen Modellhierarchie aneinander anzupassen. Das Prinzip ist identisch zur Filterfunktion, wie sie unter RockWorks angewendet wurde. Das heißt, es wird jeweils eine hierarchisch tiefer eingestufte Fläche an eine in der Hierarchie höher gestellte Fläche angepasst. Der Prozess wurde sukzessive von oben nach unten für alle Schichtflächen durchlaufen.

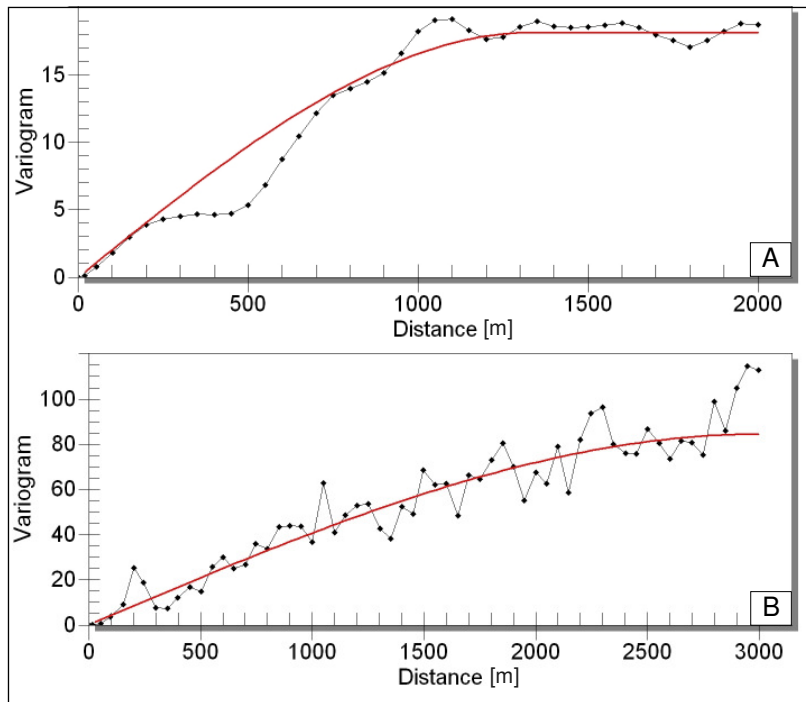


Abb. 4.11: Zwei Variogramme aus dem Modellgebiet Bitterfeld-Süd. A zeigt das experimentelle Variogramm (mit Punkten besetzte Linie) sowie das Variogrammodell (rote Linie) der Unterkante des Sandlösses. Die erste Abflachung der Kurve wird durch die Daten aus dem DGM verursacht, während der zweite Schwellenwert die Analyse der Bohrdaten repräsentiert. Unter B ist das Variogramm des Bitterfelder Flözkomplexes dargestellt. Diese Modellschicht wurde nicht mit Daten aus dem DGM erweitert. Das experimentelle Variogramm zeigt einen allmählichen Anstieg der Varianz.

Die Volumenkörper wurden über eine vertikale Vernetzung der Schichtflächen-TINs, die ebenfalls eine horizontale Auflösung von 20 x 20 m besitzen, gebildet. Dabei zeigen Schichtkörper, die lateral an Körper mit steil einfallenden Flanken angrenzen, ebenfalls die Relikte, die aus der Anpassung der Schichtflächen resultieren (vgl. Kap. 3.4.4 und Abb. 3.14).

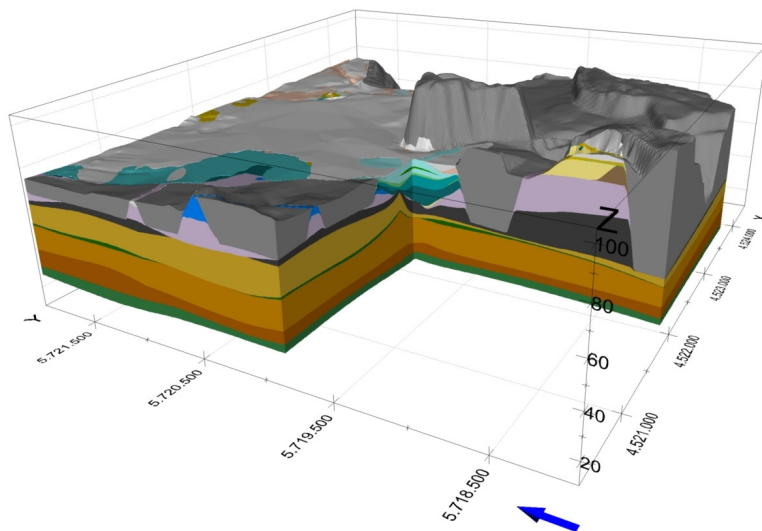


Abb. 4.12: Das unter GMS entwickelte geologische 3D-Modell des Raumes Bitterfeld-Süd. Im Vergleich zu dem unter RockWorks erstellten Modell sind *Over-* und *Undershoots* hier deutlich weniger stark ausgeprägt. Der südwestliche Teil des Modells wurde zwecks eines besseren Einblicks ausgeblendet. Darstellung 15fach überhöht. Die über das gesamte Modellgebiet verbreiteten Schichtkörper sind ab einer Mächtigkeit von 0,1 m dargestellt. (Legende: siehe Anhang 3)

4.6 GOCAD

GOCAD verwendet einen völlig eigenständigen methodischen Ansatz zur geologischen 3D-Modellierung (vgl. Kap. 3.4.3). Die einzige Gemeinsamkeit zu den bisher vorgestellten Konzepten ist, dass die Modellerstellung ebenfalls auf der Basis von Schichtflächen erfolgt.

In Vorbereitung auf die Modellierung war die Datengrundlage entsprechend anzupassen. Hierbei ist erwähnenswert, dass für die Modellerstellung nicht die Bohrungen selbst, sondern

schichtflächenbezogene Datensätze, die ausschließlich X-, Y- und Z-Koordinaten enthalten, genutzt wurden. Für jede zu modellierende Schicht wurden deshalb die zugehörigen Koordinaten aus den Bohrdatensätzen extrahiert. Im Gegensatz zu MVS und RockWorks wird dabei jede Schichtfläche ausschließlich durch Datenpunkte aus denjenigen Bohrungen beschrieben, in denen die entsprechende Schicht auch mit einer realen Mächtigkeit vorhanden ist.

Zunächst wurde das Digitale Geländemodell in Form einer ASCII-Datei mit XYZ-Koordinaten importiert und direkt zu einer Fläche mit einer Auflösung von 20 x 20 m nach dem Delaunay-Verfahren trianguliert. Im weiteren Verlauf wurde die Schichtenfolge schrittweise von oben nach unten modelliert. Dabei stellt sich die prinzipielle Vorgehensweise zur Modellierung einer Schichtfläche vereinfacht wie folgt dar:

- Import der die Schichtunterkante beschreibenden Datenpunkte,
- Import von Polygonen, welche die oberflächige Verbreitung der Schicht charakterisieren,
- ggf. zusätzliche Erweiterung der Verbreitungspolygone um die laterale Ausdehnung einer Schicht im Untergrund (basierend auf dem Vorhandensein der Schicht in den Bohrungen),
- vertikale Projektion der Verbreitungspolygone auf alle überlagernden Schichtunterkanten,
- Erstellen eines initialen TINs innerhalb der definierten Schichtverbreitung,
- Belegung des TINs mit verschiedenen *Constraints* und Interpolation mittels *DSI*,
- ggf. Anpassung der horizontalen Auflösung und iterative Modellierung der Schichtunterkante mit (schrittweise) veränderten *Constraints*,
- Beseitigung von Inkonsistenzen, wie Lücken oder Flächenüberschneidungen.

Die Erweiterung der Verbreitungspolygone um die laterale Schichtausdehnung im Untergrund erfolgte für alle Schichten, die nicht in sämtlichen Bohrungen repräsentiert sind. Ist zum Beispiel eine Schicht in einer Bohrung vorhanden, in der Nachbarbohrung jedoch nicht, dann wurde der Verlauf des Polygonzuges möglichst so gewählt, dass er die Strecke zwischen beiden Bohrungen halbiert. Dabei wurde jedoch stets die Geometrie des Polygons als Ganzes berücksichtigt, so dass die Einhaltung dieser Regel unter Einbeziehung des geologischen Sachverstandes nicht immer sinnvoll war.

In Bereichen, die durch das Auftreten von Bergbaukippen geprägt sind, wurden die Verbreitungspolygone der lateral angrenzenden Schichtglieder so konstruiert, dass sie die Unterkante der Kippenkörper schneiden. Die entsprechenden Schichtflächen wurden im Nachhinein mit der Unterkante der Bergbaukippen beschnitten.

Die anschließende Projektion der Verbreitungspolygone auf die Unterkanten der überlagernden Schichtglieder stellt sicher, dass die entsprechende Schicht entlang der definierten

Verbreitung auskeilt. Bei der Vertikalprojektion ist unbedingt die Modellhierarchie zu berücksichtigen. Ausgehend von der obersten Fläche (DGM) wird das Verbreitungspolygon einer Schicht sukzessive auf alle überlagernden Schichtunterkanten projiziert. Damit wird der gleiche Effekt erzielt, als würde das Polygon direkt auf eine gemeinsame Unterkante aller Hangendschichten übertragen.

Im weiteren Verlauf erfolgt dann die Erstellung eines initialen TINs, dessen Geometrie und Ausdehnung vom Verbreitungspolygon der aktuellen Schicht bestimmt wird. Vor der eigentlichen Interpolation wird dieses TIN dann mit Kontrollelementen bzw. *Constraints* belegt. Dabei werden die Kanten der Fläche, welche bereits mit dem projizierten Verbreitungspolygon zusammenfallen, als *Control Nodes* definiert. Das heißt, die Stützpunkte der Kanten sind für die folgende Interpolation fixiert und dürfen in ihrer Lage nicht verändert werden. Alle weiteren Daten, die zur Beschreibung der Schichtflächengeometrie dienen, werden als *Control Points* definiert. Sie beeinflussen die Interpolation dahingehend, dass die Geometrie der Fläche an diese Punkte angepasst wird (Abb. 4.13).

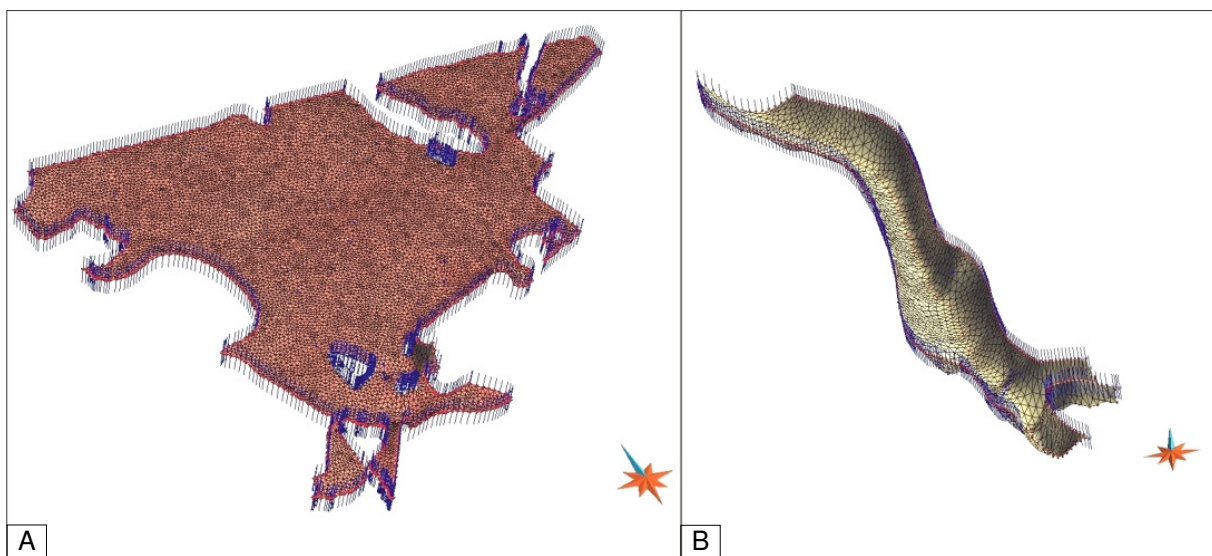


Abb. 4.13: Zwei unter GOCAD erstellte und mit verschiedenen *Constraints* belegte Schichtflächen des Modells Bitterfeld-Süd. Ihre Modellierung erfolgte iterativ, wobei zwischen den einzelnen Interpolationsschritten Art und Umfang der *Constraints* variiert wurden. In A ist die Unterkante der Auffülle dargestellt. B zeigt die Schichtunterkante der weichselzeitlichen Rinne, die das Modellgebiet in NNW-SSE-Richtung quert. Beide Flächen sind mit unterschiedlichem Maßstab dargestellt.

Für die Interpolation kam der in GOCAD implementierte *DSI*-Algorithmus (*Discrete Smooth Interpolation*; vgl. unter anderem MALLET, 2002) zur Anwendung. Dieser Algorithmus ist darauf ausgelegt, die Rauigkeit bzw. Krümmung einer Fläche zu minimieren, wobei die definierten *Constraints* die Gestalt der Fläche maßgeblich beeinflussen. In der Regel erfolgt die Interpolation in mehreren Iterationsschritten. Hierbei wird die Geometrie der initialen Fläche zunehmend an die definierten *Constraints* oder Randbedingungen angepasst. Eine Fläche kann dabei auch mit multiplen *Constraints* belegt sein (vgl. Abb. 4.13). Entscheidend hierfür ist, dass diese nicht im Widerspruch zueinander stehen.

Für die meisten Schichtflächen erfolgte die Modellierung iterativ. Das heißt, die resultierende Flächengeometrie basiert auf einer mehrfachen Interpolation, wobei zwischen den einzelnen Interpolationsschritten Art und Umfang der *Constraints* variiert wurden. In diesem Zusammenhang wurde auch die Auflösung der triangulierten Flächen an die gewünschte Zielauflösung angepasst. Obwohl es prinzipiell möglich ist, sämtliche Schichtflächen durch TINs mit unterschiedlicher Diskretisierung darzustellen, wurde die horizontale Auflösung der resultierenden Flächen so gewählt, dass ihre Stützpunkte einen Abstand von annähernd 20 m besitzen.

War die Modellierung einer Schichtfläche weitestgehend abgeschlossen, galt es sicherzustellen, dass das Modell in sich konsistent ist. Hierzu wurden die Kontaktbereiche zwischen den Schichtflächen auf Lücken oder Durchdringungen geprüft und ggf. berichtigt. Hierfür stellt GOCAD ebenfalls entsprechende Werkzeuge, wie zum Beispiel Beschneidungsfunktionen oder *Constraints*, die auf eine Kontaktfläche gerichtet sind und die das Schließen von Lücken ermöglichen, bereit. In diesem Zusammenhang ist herauszustellen, dass die Triangulation im Bereich der Schnitt- bzw. Kontaktlinien so aktualisiert wird, dass die Stützpunkte der angepassten Fläche stets mit der Referenzfläche zusammenfallen.

Von den betrachteten Modellierwerkzeugen ermöglicht GOCAD als einziges ein effektives direktes Arbeiten am 3D-Objekt. So kann beispielsweise die Lage einzelner Stützpunkte manuell im virtuellen Raum verändert werden. Diese lassen sich dann für eine erneute Interpolation als *Constraints* definieren und haben somit einen direkten Einfluss auf die resultierende Flächengeometrie. Die Auswahl und Definition von *Constraints* erfolgt in vielen Fällen ebenfalls interaktiv am 3D-Objekt. Auch die Prüfung auf Inkonsistenzen und ihre Behebung wird in der Regel direkt im 3D-Raum durchgeführt.

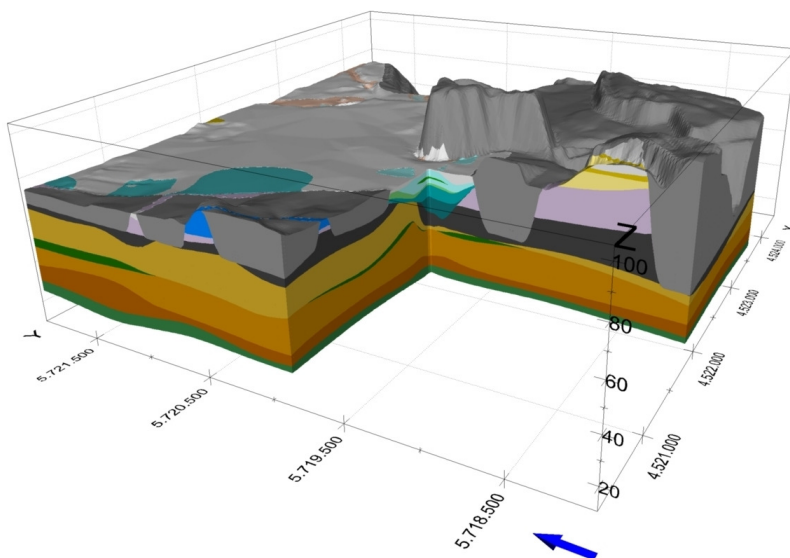


Abb. 4.14: Das unter GOCAD erstellte Modell wurde auf der Basis von TINs generiert, die ausschließlich Bereiche mit realer Schichtverbreitung repräsentieren. Anders als unter MVS, RockWorks und GMS sind die entsprechenden Schichtunterkanten nicht über das gesamte Modellgebiet verbreitet. Der südwestliche Teil des Modells wurde ausgeblendet. Darstellung 15fach überhöht. (Legende: siehe Anhang 3)

5. Ergebnisse der geologischen 3D-Modellierung

5.1 Beeinflussende Faktoren

Die betrachteten geologischen Modelle wurden allesamt für den Modellraum Bitterfeld-Süd erstellt. Obwohl sämtlichen Modellen eine identische Datenbasis zugrunde liegt und sie auf den ersten Blick die geologische Situation in ähnlicher Weise widerspiegeln (vgl. Kap. 4), zeigen sich im Detail doch erhebliche Unterschiede. Die Gründe hierfür sind vielfältig und ergeben sich oft aus einem Zusammenspiel mehrerer Faktoren. Im Folgenden sollen deshalb die Einflüsse, welche den Modellierprozess und damit die Ergebnisse der geologischen Modellierung prägen, dargestellt und ihre Auswirkungen an Beispielen aus den Einzelmodellen verdeutlicht werden. Die Darstellungen beziehen sich auf Erfahrungen mit den verwendeten Modellierwerkzeugen. Es ist daher nicht auszuschließen, dass in anderen Spezialwerkzeugen zur geologischen 3D-Modellierung die Ergebnisse von weiteren Faktoren beeinflusst werden können.

Da Modellierwerkzeuge in der Regel einer ständigen Weiterentwicklung unterliegen, sollen hier nicht einzelne programmspezifische Funktionen und Möglichkeiten im Fokus stehen. Vielmehr geht es um allgemein gültige Aspekte, die mehr oder weniger in allen Werkzeugen zur geologischen 3D-Modellierung zum Tragen kommen und welche den gesamten Modellierprozess beeinflussen können.

Abbildung 5.1 stellt die wesentlichen Faktoren dar, die einen erheblichen Einfluss auf die Ergebnisse einer geologischen Modellierung haben können. Einzelne Aspekte können dabei durchaus miteinander in Wechselwirkung stehen bzw. sich gegenseitig bedingen. Bezogen auf die Realisierung einer Modellierung in einem Modellierwerkzeug können hierbei **externe** und **interne** Faktoren unterschieden werden.

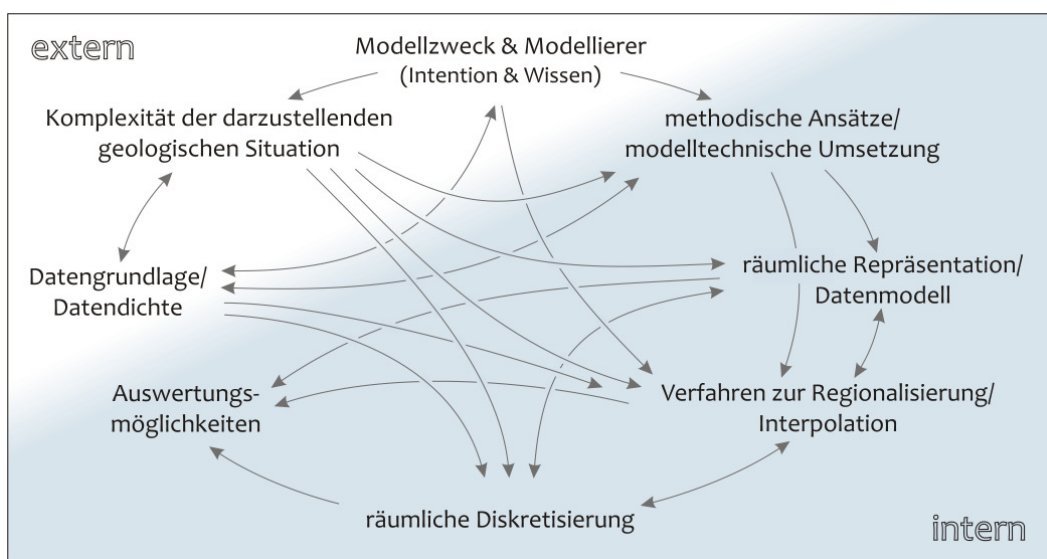


Abb. 5.1: Die wesentlichen Faktoren, welche die Ergebnisse einer geologischen Modellierung beeinflussen können, stehen oft miteinander in Beziehung oder bedingen sich sogar gegenseitig. Bezüglich der Umsetzung einer Modellierung in einem Modellierwerkzeug lassen sich interne und externe Faktoren definieren.

Im Hinblick auf die Faktoren, die eine geologische 3D-Modellierung entscheidend beeinflussen, ist zunächst der Modellierer zu nennen. Er kennt das Ziel der Modellierung und besitzt im idealen Fall sowohl umfangreiches (regional-) geologisches Fachwissen als auch methodisches Hintergrundwissen.

Über das Ziel der Modellierung und das (Experten-) Wissen des Modellierers wird die Komplexität der abzubildenden geologischen Situation definiert. Das geologische Strukturmodell hat dabei die Aufgabe, die geologischen Lagerungsverhältnisse möglichst zweckorientiert abzubilden. So ist es zum Beispiel im Zusammenhang mit einer hydrogeologischen Modellierung in den wenigsten Fällen sinnvoll, sämtliche lithostratigraphischen Einheiten eines Modellgebietes separat und mit hohem Detailgrad abzubilden. Die geologischen Strukturen werden hier meist auf der Basis hydraulisch wirksamer Parameter zu Grundwasserleitern und Grundwassergeringleitern zusammengefasst. Dies kann die Komplexität der abzubildenden Situation deutlich reduzieren.

Weiter wählt der Modellierer die für die Modellerstellung zu verwendende Datengrundlage aus und führt ggf. bereits in dieser frühen Phase Interpretationsarbeiten durch. Gedacht sei hier unter anderem an die Auswahl und Stratifizierung von Bohrungen sowie das Zusammentragen und Auswerten von thematischem Kartenmaterial. Somit unterliegt ebenfalls die in die Modellierung einfließende Datenbasis dem Fachwissen, dem Verständnis und der Subjektivität des Modellierers.

Die Datenbasis selbst gibt Aufschluss über die geologischen Verhältnisse und beeinflusst mit ihrem Umfang sowie ihrer Qualität und Quantität die darstellbare räumliche Komplexität maßgeblich. In umgekehrter Richtung stellt eine hohe räumliche und strukturelle Variabilität besondere Anforderungen an die in den Modellierprozess einfließenden Daten sowie ihrer Verteilung im Raum (Datendichte). In der Regel steigt mit zunehmender Heterogenität, welche selbst nur aus den zur Verfügung stehenden Daten abgeleitet werden kann, der Bedarf an beschreibenden Informationen für die Modellierung überproportional an.

Neben den Anforderungen an das zu erstellende Modell und dem methodischen Hintergrundwissen des Modellierers sollten nicht zuletzt die Datengrundlage und noch viel mehr die Heterogenität der zu modellierenden geologischen Situation über den zu verwendenden methodischen Ansatz entscheiden. In diesem Zusammenhang sind ebenfalls die Art und Weise der modelltechnischen Umsetzung, die Formen der räumlichen Repräsentation von Geokörpern sowie die Verfahren zur Diskretisierung und Interpolation als beeinflussende Faktoren zu nennen.

Die meisten Modellierwerkzeuge haben jedoch lediglich einen methodischen Ansatz zur geologischen 3D-Modellierung implementiert (vgl. Kap. 3). Auch die damit verbundene modelltechnische Umsetzung, die zur Verfügung stehenden Datenmodelle sowie die Verfahren zur Diskretisierung und Interpolation lassen innerhalb eines Werkzeuges oft nur wenig Spielraum für Variationen.

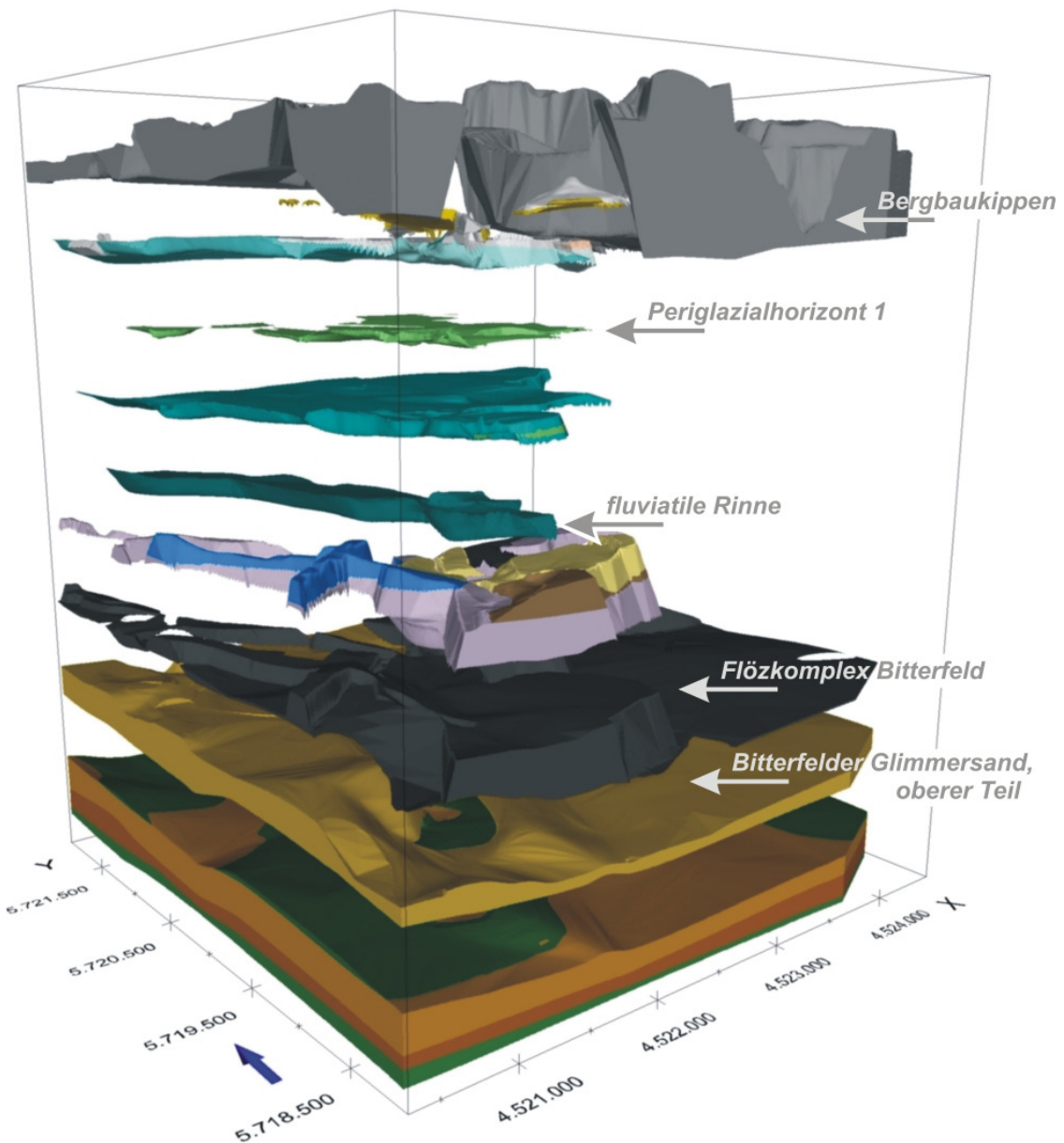
Die Datengrundlage stellt dabei Anforderungen an die räumliche Diskretisierung. Denn für ein annähernd korrektes Abbild einer realen geologischen Situation ist es entscheidend, ob die Datenbasis mit der gewählten Auflösung ausreichend abgebildet werden kann. In den meisten Modellierwerkzeugen sind die Möglichkeiten zur räumlichen Diskretisierung jedoch stark vom implementierten Datenmodell abhängig, so dass es in den seltensten Fällen möglich sein wird, die Datenbasis in idealer Weise in die Modellebene zu überführen.

Weiter werden durch das Datenmodell die Möglichkeiten vorgegeben, geologische Körper oder Flächen adäquat im 3D-Raum darzustellen. Die oft eingeschränkte Flexibilität, wie sie zum Beispiel den regelmäßigen 2D- und 3D-Gittern zueigen ist, führt in der Regel dazu, dass Bereiche mit hoher räumlicher Variabilität nur unzureichend genau abgebildet werden können. In diesen Fällen stellen die resultierenden Modelle nicht nur eine Annäherung an die reale geologische Situation dar, sondern spiegeln ebenfalls die Datenbasis in Form einer Approximation wider.

Auch haben die Struktur und die Dichte der zur Modellierung herangezogenen Daten sowie das methodische Wissen des Modellierers erheblichen Einfluss auf das zu wählende Verfahren zur Regionalisierung bzw. Interpolation. Denn das Verfahren entscheidet über die Art und Weise, wie von den Daten auf die Eigenschaften einer Fläche geschlossen wird und ob vor der eigentlichen Interpolation eine Analyse des räumlichen Zusammenhangs stattfindet. Selbstverständlich liefern unterschiedliche Interpolationsverfahren bei gleicher Datengrundlage unterschiedliche Ergebnisse. Wie die Erfahrungen aus den Modellierungen, die in Verbindung mit der vorliegenden Arbeit durchgeführt wurden, zeigen, kann aber auch die Interpolation mit dem gleichen Verfahren zu unterschiedlichen Ergebnissen führen. In Kombination mit den verschiedenen Möglichkeiten zur räumlichen Diskretisierung sind hier die Unterschiede bezüglich des Umfangs einer möglichen Einflussnahme auf die Interpolationsparameter verantwortlich.

Letztendlich werden ebenfalls die Auswertungsmöglichkeiten und -ergebnisse, wie sie zum Beispiel durch die Berechnung von Schichtverbreitungen, Schichtkubaturen oder Isolinien-darstellungen bezüglich Mächtigkeit und Tiefenlage von Schichtgliedern gegeben sind, entscheidend vom Datenmodell, dem verwendeten Interpolationsverfahren und der Diskretisierung beeinflusst. So können verschiedene Datenmodelle bei der Berechnung von Volumina durchaus in unterschiedlichen Ergebnissen resultieren. Ebenso wird beispielsweise der Verlauf von Isochoren maßgeblich vom Interpolationsverfahren und der räumlichen Auflösung beeinflusst.

Im Folgenden sollen an ausgewählten Schichtgliedern des Modellraumes Bitterfeld-Süd die Auswirkungen der internen Faktoren exemplarisch dargestellt und verglichen werden. Abbildung 5.2 verdeutlicht die Position der betrachteten Schichtkörper im geologischen Raummodell. Der Fokus der vergleichenden Darstellung liegt auf den verschiedenen, bereits unter den Kapiteln 3.3 und 3.4 beschriebenen, methodischen Ansätzen sowie den damit verbundenen Datenmodellen, Interpolationsverfahren und den Möglichkeiten zur Diskretisierung. Die als extern definierten Aspekte sollen im weiteren Verlauf nicht weiter betrachtet werden.



| | | | |
|---|---|---|--|
| Bergbaukippen | Schluffhorizont | Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (2) | Flözkomplex Bitterfeld |
| Auffülle | Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (2) | fluviatile Rinne | Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil |
| Auenlehm | Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde | glazifluviatile Kiese und Sande | Breitenfelder Horizont |
| Holozän-Terrasse der Mulde | Periglazialhorizont 1 | Grundmoräne der Saale-Kaltzeit | Bitterfelder Glimmersand, unterer Teil |
| Sandlöss und Löss | Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (1) | Hauptterrasse der Mulde | Glaukonitsand |
| Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (1) | Periglazialhorizont 2 | Bitterfelder Decktonkomplex | Glaukonitschluff |

Abb. 5.2: Partielle Explosionsdarstellung des Modellraumes Bitterfeld-Süd. Die grauen Pfeile bezeichnen jene Strukturen, die im Folgenden vergleichend betrachtet werden. Die Abbildung wurde auf Basis des Referenzmodells (FABRITIUS, 2002) erstellt. Darstellung 15fach überhöht.

5.2 Ergebnisse unter dem konstruktiv-profilschnittgestützten Ansatz (GSI3D)

Bergbaukippen

Als anthropogen verursachte Strukturen dominieren die Bergbaukippen weite Bereiche des Modellgebietes. Sie greifen stellenweise tief in die unterlagernde Schichtenfolge ein und beeinflussen so das hydraulische Regime maßgeblich. Da die Kippenkörper das Schichtglied mit der höchsten hierarchischen Einstufung darstellen, beeinflussen sie unter allen betrachteten Ansätzen zur geologischen 3D-Modellierung die Geometrie der unterlagernden Schichtenfolge entscheidend.

Aufgrund der Möglichkeit zur Einbindung von Verbreitungspolygonen konnte die oberflächige Ausdehnung der Kippenstrukturen exakt abgebildet werden. Durch die iterative Modellierung über ein dichtes Netz von Profilschnitten war es möglich, ein detailliertes geometrisches Abbild der komplexen Strukturen zu erstellen. Die damit verbundene Erweiterung der ursprünglichen Datenbasis erlaubte es, auch Bereiche, die durch Bohrungen nicht ausreichend beschrieben waren, mit zusätzlichen, wissensbasierten Informationen zu besetzen. So war es unter anderem möglich, die Böschungswinkel der Kippenflanken zu berücksichtigen (FABRITIUS, 2002). Weiter konnte ebenfalls der im E des Modellgebietes erhalten gebliebene Straßenpfeiler der ehemaligen Braunkohlenbahn rekonstruiert werden (vgl. Abb. 5.3), welcher in den Bohrdaten nur an zwei Stellen belegt ist.

Die Vermaschung der Datenpunkte zu einem TIN gewährleistet zunächst, dass diese zugleich Stützpunkte der resultierenden Fläche sind. Das TIN bildet somit die Daten exakt ab. Im weiteren Verlauf wird auf Basis des TINs ein Schichtflächenraster generiert. Die Summe aller Schichtflächenraster dient dann zum Aufbau des 3D-Modells. Die Überführung der TINs in ein regelmäßiges Raster birgt zumindest theoretisch die Gefahr des Informationsverlustes, wenn die Auflösung des Gitters nicht adäquat definiert wurde.

FABRITIUS (2002) gibt für das Schichtglied der Kippenkörper eine Verbreitung von 8,47 Mio. m² an. Mit einem Volumen von 216,84 Mio. m³ nehmen die Bergbaukippen fast ¼ des Modellvolumens ein. Die Tiefenlage der Schichtunterkante variiert zwischen 40,12 und 101,46 mNN. Die maximale Schichtmächtigkeit ist im Bereich der Hochhalde Bitterfeld lokalisiert und beträgt 57,83 m.

Periglazialhorizont 1

Der Periglazialhorizont 1 stellt einen lokalen Grundwassergeringleiter dar und gliedert das quartäre Grundwasserstockwerk in einen oberen und unteren Teil (vgl. Kap. 2.3). Eine Besonderheit des Schichtkörpers ist seine unregelmäßige und lückenhafte Verbreitung bei einer zugleich verhältnismäßig geringen und dennoch stark schwankenden Mächtigkeit (vgl. Abb. 5.4). Diese Eigenschaften stellen besondere Anforderungen an die modelltechnische Umsetzung, die räumliche Diskretisierung sowie die zur Anwendung kommenden Verfahren zur Regionalisierung.

Bei der Umsetzung im Referenzmodell hatte neben den konstruierten Profilschnitten und dem verwendeten Verbreitungspolygon die Modellhierarchie einen erheblichen Einfluss auf die Gestalt des resultierenden Schichtkörpers. Denn diese bewirkt, wie bereits unter Kapitel 3.4.2 beschrieben, dass im Fall von Flächenüberschneidungen die in der Hierarchie tiefer eingestuftten Flächen von allen höher eingestuftten Flächen beschnitten werden.

Im Referenzmodell ist der Periglazialhorizont 1 im nördlichen und zentralen Bereich verbreitet. Er beansprucht eine Fläche von 3,64 Mio. m² und besitzt ein Volumen von 4,71 Mio. m³. Bei einer maximalen Mächtigkeit von 6,32 m ist die entsprechende Schichtunterkante in Tiefenlagen zwischen 64,9 und 76,57 mNN lokalisiert.

Fluviatile Rinne

Bei der weichselzeitlichen Rinne handelt es sich um eine fluviatil angelegte Struktur, die überwiegend mit Niederterrassenmaterial der Mulde sowie Umlagerungen tertiärer Sedimente verfüllt ist (vgl. Kap. 2.3 und Anhang 1).

Die Rinne bildet ebenfalls ein zentrales Element des Modellraumes Bitterfeld-Süd. Sie quert das Gebiet ausgehend von NW in Richtung SSE und wird südlich des Modellzentrums von den Kippenkörpern abgeschnitten. Die Struktur zeichnet sich durch ihre stark begrenzte laterale Ausdehnung sowie Linearität aus (Abb. 5.5). In Verbindung mit ihrer modelltechnischen Darstellung bedeutet dies eine ausgeprägte Anisotropie, welche in Abhängigkeit des implementierten Ansatzes und den vorhandenen Funktionalitäten nicht immer einfach umzusetzen war. Eine weitere Besonderheit ist durch die Aufgabelung der Struktur im Bereich ihrer südlichen Verbreitung gegeben. Hier spaltet sich die Rinne in zwei kleinere Teilrinnen auf. Zudem bildet die Rinnenstruktur den hydraulischen Kontakt zwischen quartärem und tertiärem Grundwasserstockwerk und stellt somit ein wichtiges hydraulisch wirksames Element dar.

Bei der Modellierung der Rinnenstruktur kam der konstruktive, profilschnittgestützte Modellierungsansatz besonders zum Tragen. Die Struktur ist zwar durch mehrere Bohrungen belegt, ihre detaillierte Darstellung war jedoch nur in Verbindung mit einem ausreichend dichten Profilschnittnetz sowie einem Verbreitungspolygon möglich.

Die quartäre Rinne besitzt im Referenzmodell eine horizontale Verbreitung von 0,97 Mio. m². Die aus dem Modell errechnete Schichtkubatur beträgt 6,2 Mio. m³. Die modellierte Unter- kante ist in Tiefen zwischen 50,6 und 69,34 mNN lokalisiert. Die Mächtigkeit der Schicht erreicht maximal 14,48 m.

Flözkomplex Bitterfeld

Der Flözkomplex Bitterfeld nimmt, wenn auch mit stark variierenden Mächtigkeiten, weite Bereiche im S, W und E des Modellgebietes ein (Abb. 5.6). Als Grundwasserhemmer bis Grundwassergeringleiter eingestuft, stellt der Flözkomplex zudem einen potentiellen Adsorptionshorizont für im Untergrund befindliche Schadstoffe dar und könnte in diesem Zusammenhang im weiteren Verlauf als sekundäre Schadstoffquelle fungieren. Aus diesen Gründen

ist eine realitätsnahe Abbildung dieses Schichtkörpers im Modell von besonderer umweltgeologischer Relevanz.

Der Flözkomplex ist durch eine ausgesprochen hohe räumliche Variabilität geprägt. Die Geometrie des Volumenkörpers zeigt eine feinteilige Zergliederung in Bereiche, in denen die Braunkohle in ursprünglicher Mächtigkeit erhalten geblieben ist, und solche, die durch Auskohlung und Erosionsprozesse geprägt sind.

Auffällig sind, wie auch bei den Kippenkörpern, die Strukturen der im Zuge der Auskohlung erhalten gebliebenen Straßenpfeiler im W und E des Modellgebietes. Zudem ist südlich des zentralen Modellbereiches die in zwei Teilarme aufgespaltene, weichselzeitliche Rinne in den Flözkomplex eingeschnitten.

Modelltechnisch wird die Gestalt des Schichtkörpers somit maßgeblich von den überlagernden Körpern der Bergbaukippen und der quartären Rinne geprägt. Für die ausgekohlten Bereiche wurde von FABRITIUS (2002) eine Restmächtigkeit der Kohle von 0,5 bis 1 m angenommen und entsprechend in der iterativen Profilschnittkonstruktion umgesetzt. Die Triangulation der konstruierten bzw. abgetasteten Stützpunkte ermöglichte im Zusammenhang mit der damit verbundenen flexiblen Diskretisierung eine detaillierte, dreidimensionale Abbildung des Flözkomplexes. Die anschließende Übertragung auf ein regelmäßiges Raster mit hoher horizontaler Auflösung stellte den Erhalt von Detailinformationen sicher.

Der Flözkomplex Bitterfeld ist im Referenzmodell über eine Fläche von 12,35 Mio. m² verbreitet und beansprucht ein errechnetes Volumen von 71,02 Mio. m³. Die modellierte Tiefenlage der Schichtunterkante erstreckt sich über Werte zwischen 38,86 und 73,97 mNN. Die größte Schichtmächtigkeit befindet sich mit 23,21 m im S des Modellgebietes.

Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil

Der Obere Bitterfelder Glimmersand bildet den oberen Teil des tertiären Grundwasserstockwerks. Der Schichtkörper ist nahezu über die gesamte Fläche des Modellgebietes verbreitet und gegenüber den zuvor betrachteten Schichtgliedern weniger stark strukturiert. Eine auffällige Besonderheit kann jedoch der Mächtigkeitsdarstellung (Abb. 5.7) entnommen werden: Im nördlichen Teil des Modellgebietes ist die weichselzeitliche Rinnenstruktur mit ihrer Erosionsbasis bis in den Oberen Bitterfelder Glimmersand eingeschnitten und stellt in diesem Zusammenhang die Verbindung zwischen quartärem und tertiärem Grundwasserstockwerk her.

Weiter lässt die Mächtigkeitsdarstellung eine Zweiteilung erkennen: Während der nordwestliche Teil durch verhältnismäßig hohe Mächtigkeiten repräsentiert ist, sind im SW-Teil eher geringere Mächtigkeiten zu beobachten. Der Mächtigkeitsprung wird mit einer in SW-NE-Richtung verlaufenden Dünenbildung in Verbindung gebracht (FABRITIUS, 2002).

Der Obere Bitterfelder Glimmersand besitzt im Referenzmodell eine Ausdehnung von 15,63 Mio. m² und nimmt ein Volumen von 146,98 Mio. m³ ein. Die Tiefenlage der Schichtunterkante variiert zwischen Werten von 35,44 und 59,08 mNN. Die größten Mächtigkeiten von bis zu 19,96 m befinden sich im Bereich der Dünenstruktur im NW des Modellgebietes.

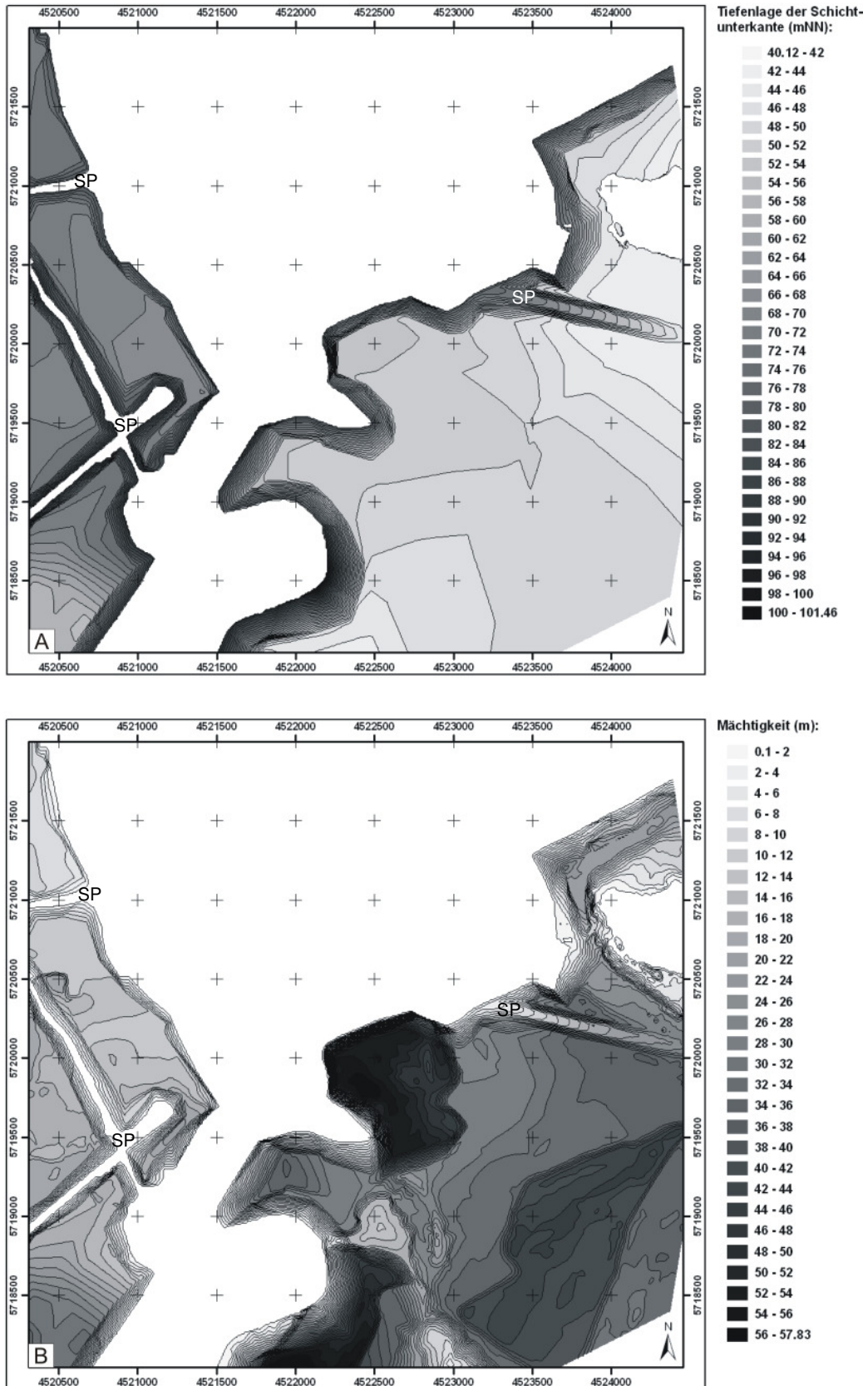


Abb. 5.3: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der Kippenkörper aus dem Referenzmodell. In beiden Darstellungen ist der im E des Modellgebietes gelegene, rekonstruierte Straßenpfeiler deutlich zu erkennen. Er ist nur in zwei Bohrungen belegt. Im W werden die Kippenkörper ebenfalls durch Straßenpfeiler separiert, welche hier jedoch bis zur Oberfläche reichen. Sie werden von der anstehenden, nicht anthropogen beeinflussten Schichtenfolge aufgebaut. SP – Straßenpfeiler.

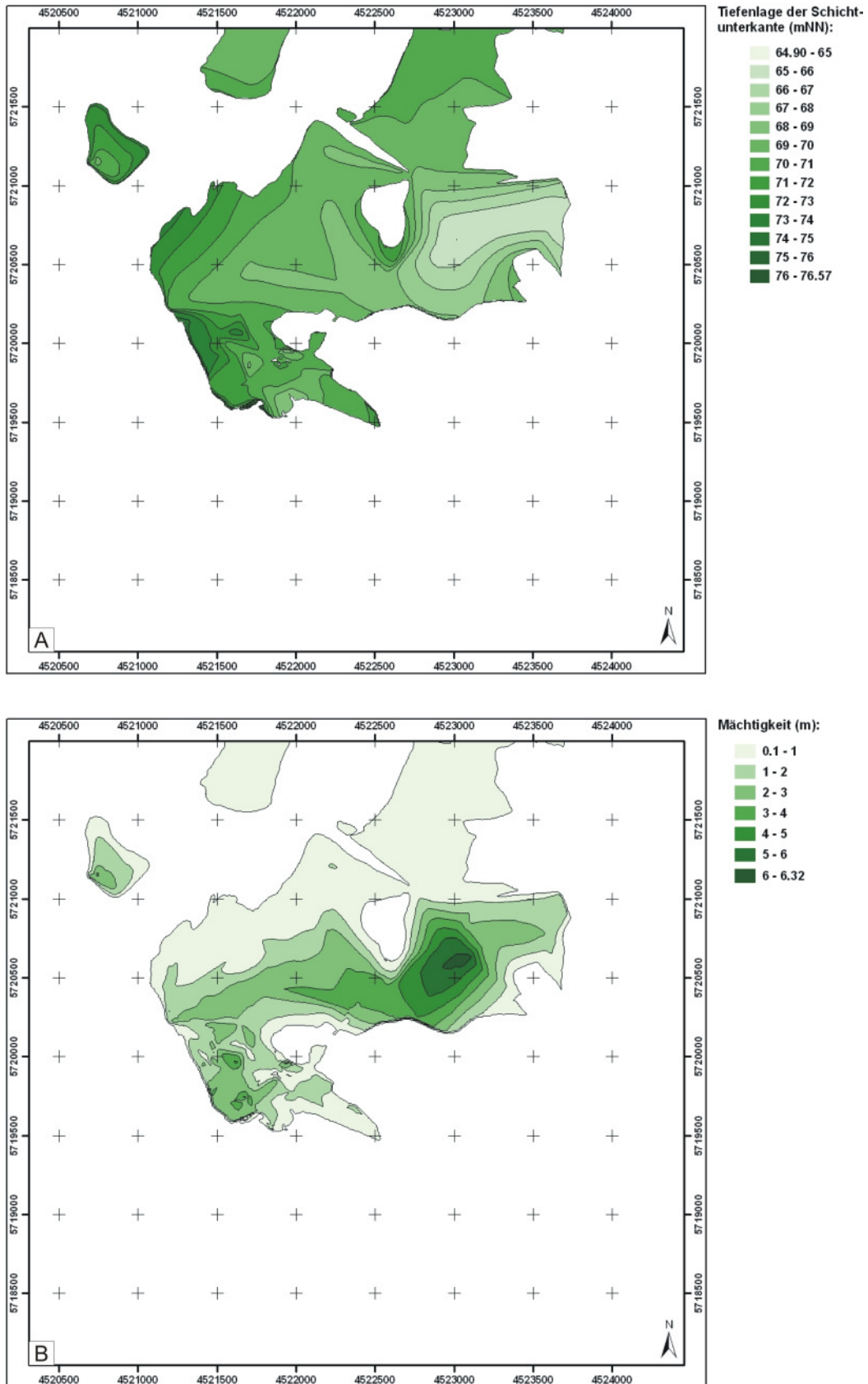


Abb. 5.4: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Periglazialhorizontes 1 aus dem Referenzmodell. Der Schichtkörper ist lückenhaft und mit deutlich variierenden Mächtigkeiten überwiegend im nördlichen Abschnitt des Modellgebietes verbreitet.

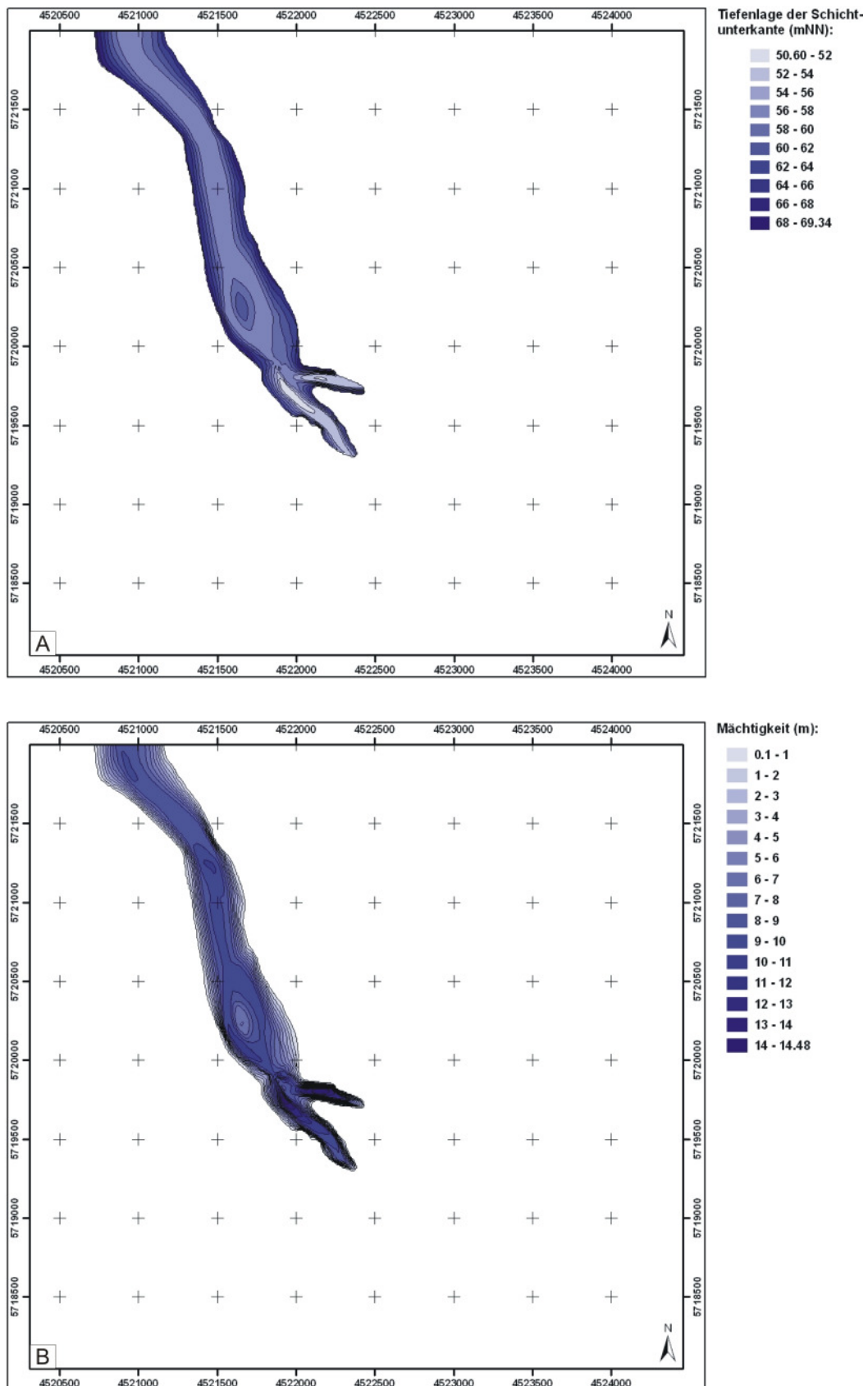


Abb. 5.5: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluviatilen Rinne aus dem Referenzmodell. Die Rinnenstruktur verläuft ausgehend vom NW des Modellgebietes in Richtung SSW und wird südlich des zentralen Modellbereiches von den Kippenkörpern begrenzt.

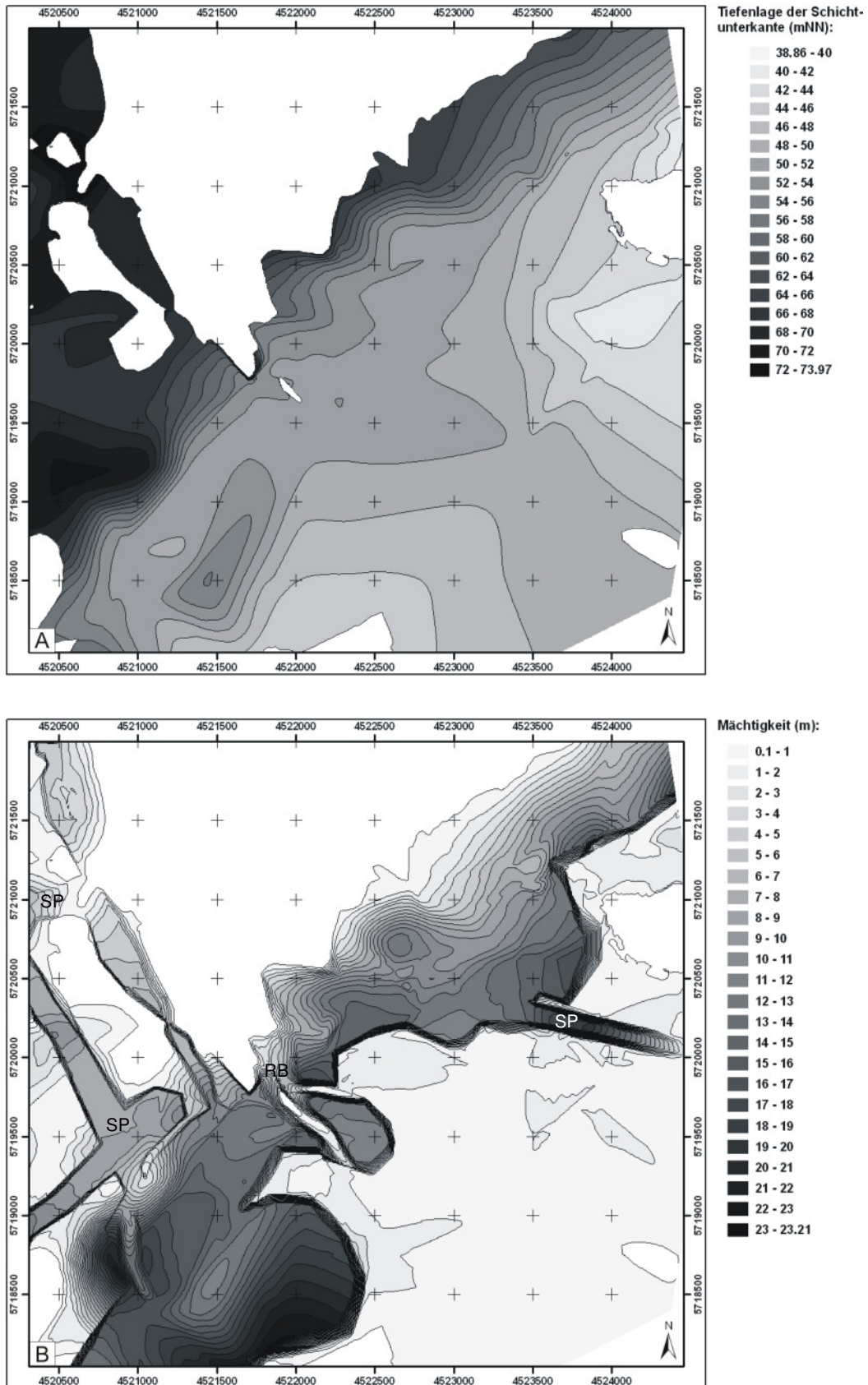


Abb. 5.6: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Flözkomplexes Bitterfeld aus dem Referenzmodell. Die hohe räumliche Variabilität ergibt sich durch die ausgekohlten Bereiche, die eingeschnittene weichselzeitliche Rinne sowie Zonen, in denen die Kohle in ihrer ursprünglichen Mächtigkeit erhalten ist. SP – Straßenpfeiler; RB – Rinnenbasis.

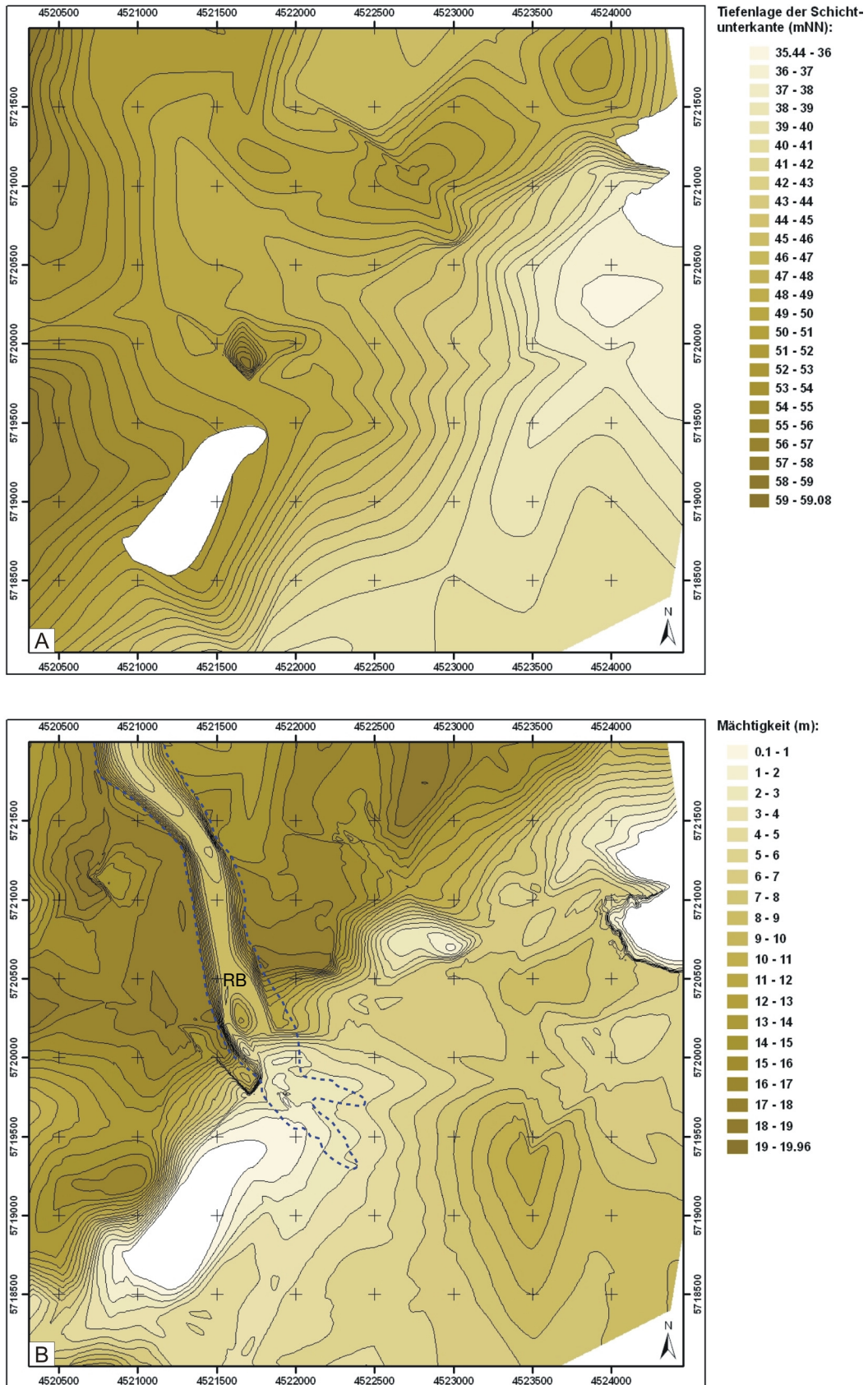


Abb. 5.7: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Oberen Bitterfelder Glimmersandes aus dem Referenzmodell. Deutlich ist in der Mächtigkeitsdarstellung die Erosionsbasis der weichselzeitlichen Rinne zu erkennen. Die Verbreitung der Rinnenstruktur wird durch die dunkelblaue, gestrichelte Linie markiert. RB – Rinnenbasis.

5.3 Ergebnisse der iterativen Modellierung über Kontrollelemente (GOCAD)

Bergbaukippen

Eine adäquate dreidimensionale Abbildung der Kippenkörper war nur in Verbindung mit einer Modellierung in mehreren Stufen möglich. Zunächst wurden die Unterkanten für den westlichen und östlichen Teil der Struktur jeweils separat und allein auf der Grundlage von Bohrinformationen modelliert. Die horizontale Ausdehnung wurde dabei so gewählt, dass die erstellten Flächen über die eigentliche Verbreitung des Schichtkörpers hinausgehen. Durch die Interpolation auf ein TIN war es möglich, die Datenbasis exakt zu implementieren bzw. zu repräsentieren.

Im Gegensatz zu den Ergebnissen, wie sie unter dem konstruktiv-profilschnittgestützten Ansatz erreicht wurden, konnten die Flankenwinkel der Kippenkörper hier nur in generalisierter Form berücksichtigt werden. Hierzu wurden die Stützpunkte der zuvor erstellten TINs exportiert und im GIS mit Hilfe von Verbreitungspolygonen und einem Puffer für eine erneute Interpolation selektiert. Hierbei galt es zu beachten, dass die Unterkante des östlichen Teils der Kippenstrukturen deutlich tiefer liegt als im westlichen Abschnitt der Verbreitung (vgl. Abb. 5.9 - A). Um einen annähernd konstanten Flankenwinkel zu gewährleisten wurden die Puffer für die Selektion unterschiedlich definiert. Während bei der Selektion im E ein Puffer von 100 m zur Anwendung kam, wurden die Stützpunkte des westlichen Teils der Unterkante mit einem Puffer von 50 m selektiert (vgl. Abb. 5.8). Die so angepassten Datensätze konnten dann zusammen mit dem auf das DGM projizierten Verbreitungspolygon als Randbedingungen bzw. *Constraints* für die eigentliche Modellierung der Kippenunterkante genutzt werden.

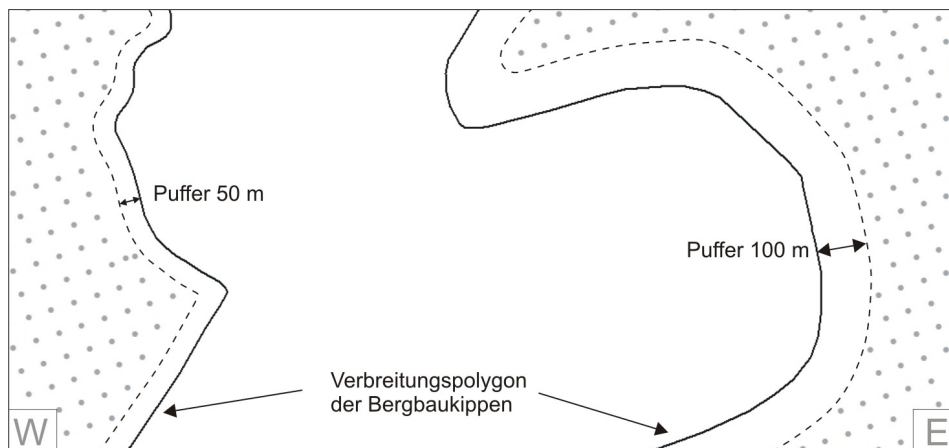


Abb. 5.8: Schematische Darstellung der Selektion von Stützpunkten unter Verwendung von Verbreitungspolygonen und definierten Pufferbereichen (Darstellung nicht maßstabsgetreu).

Die resultierenden Flankenwinkel stehen somit in direkter Beziehung zum gewählten Pufferbereich und der Tiefenlage der Schichtunterkante im Bereich der Pufferzone. Sie können deshalb nur als generalisierte modellhafte Realisierung betrachtet werden.

Wie in Abbildung 5.9 zu erkennen ist, war die oberflächige Verbreitung der Kippenkörper durch die direkte Einbindung von Verbreitungspolygonen und die Verwendung eines TINs als

Basisfläche sehr gut fixierbar. Sie deckt sich nahezu vollständig mit der Verbreitung der Bergbaukippen im Referenzmodell (vgl. Abb. 5.3). Mit einer errechneten Schichtverbreitung von 8,56 Mio. m² beträgt die Abweichung nur etwa +1 %.

Im Vergleich zum Referenzmodell zeigen jedoch sowohl die Unterkante als auch die Mächtigkeitssdarstellung einen deutlich gleichmäßigeren und stetigeren Verlauf ihrer Isolinien – eine Auswirkung des auf minimale Rauigkeit von Flächen ausgerichteten *DSI*-Algorithmus (vgl. Kap. 4.6).

Der wohl bedeutendste Unterschied lässt sich jedoch im E des Modellgebietes ausmachen: Der im Referenzmodell rekonstruierte Straßenpfeiler der ehemaligen Braunkohlenbahn konnte mit der vorhandenen Datendichte nicht adäquat abgebildet bzw. modelltechnisch erfasst werden. Die Struktur kommt lediglich in einer geringen Aufwölbung der Unterkante zum Ausdruck.

Die Tiefenlage der modellierten Schichtunterkante nimmt Werte zwischen 40,38 und 101,43 mNN an (Referenzmodell: 40,12 bis 101,46 mNN). Die größten Mächtigkeiten sind ebenfalls im Bereich der Hochhalde lokalisiert und erreichen, wie auch im Referenzmodell, ein Maximum von über 57,8 m. Die errechnete Schichtkubatur ist mit 211,89 Mio. m³ um etwa 2,3 % kleiner als das Volumen der Kippenkörper im Modell, welches unter dem konstruktiv-profilschnittgestützten Ansatz generiert wurde. Die Ursachen hierfür sind zum einen im Interpolationsverfahren und der daraus resultierenden, verhältnismäßig weniger stark strukturierten Schichtunterkante zu suchen. Zum anderen resultiert die lokale Aufwölbung der Unterkante im Bereich des Straßenpfeilers im E des Gebietes in einer räumlich ausgedehnten Verringerung der Mächtigkeiten, was einen direkten Einfluss auf die sich ergebende Schichtkubatur hat.

Periglazialhorizont 1

Die Einheit des Periglazialhorizontes 1 erstreckt sich wie im Referenzmodell von der nördlichen Modellgrenze ausgehend, bis hinein in den zentralen Bereich des Modellgebietes. Jedoch weist der Schichtkörper mit 3,76 Mio. m² eine Verbreitung auf, die jene des äquivalenten Schichtgliedes im Referenzmodell um 3,3 % übersteigt. Die größten Unterschiede sind hierbei im N und NW des Modellgebietes lokalisiert. Während der Schichtkörper im Referenzmodell in diesen Bereichen durch eine lückenhafte Verbreitung charakterisiert ist, wird der unter GOCAD modellierte Horizont hier durch eine kontinuierlichere Verbreitung geprägt (vgl. Abb. 5.10).

Obwohl sich die Schichtunterkante mit Werten zwischen 64,71 und 78,6 mNN in einer nahezu identischen Tiefenlage wie im Referenzmodell befindet und die Abweichungen in den Bereichen der zusätzlichen Schichtverbreitung zu suchen sind, zeigt ein Vergleich der Mächtigkeitssverteilung und Mächtigkeitssspannen deutliche Unterschiede. So erreicht der Periglazialhorizont im Modell, welches unter GOCAD entwickelt wurde, maximale Mächtigkeiten von über 10 m. Im Referenzmodell werden dagegen nur maximal 6,32 m erreicht. Zusammen mit

der variierenden Mächtigkeitsverteilung ergibt sich so eine Schichtkubatur von 8,23 Mio. m³. Sie übersteigt das Volumen des Schichtkörpers aus dem Referenzmodell um 74,7 %.

Der Periglazialhorizont 1 ist damit ein ausgezeichnetes Beispiel dafür, wie sich die verschiedenen Faktoren auf die Ergebnisse einer Modellierung auswirken können. Obwohl beiden Modellierungen sowohl ein konstruiertes Verbreitungspolygon als auch ein identischer Bohrdatensatz zugrunde lagen, unterscheiden sich die Ergebnisse zwischen Referenzmodell und dem unter GOCAD erstellten Modell in nicht unerheblichem Maße. Ursache hierfür ist ganz eindeutig das Zusammenspiel von Datenbasis (Bohrungen und Verbreitungspolygon), Interpolationsverfahren und Modellhierarchie. Denn sowohl die resultierende Schichtverbreitung als auch die Mächtigkeitsverteilung werden im vorliegenden Fall neben der Datenbasis entscheidend vom Interpolationsverfahren und der Geometrie der überlagernden Schichtenfolge bestimmt. Dabei ist anzumerken, dass der unter GOCAD modellierte Periglazialhorizont ebenso wenig im Widerspruch zu den Eingangsdaten steht wie der im Referenzmodell enthaltene Schichtkörper. Die aufgeführten Aspekte lassen sich nahezu auf alle Schichtglieder übertragen, welche im tieferen Untergrund lokalisiert sind und sich, wie der unregelmäßig und lückenhaft verbreitete Periglazialhorizont 1, zudem durch eine räumlich wechselhafte Verbreitung auszeichnen.

Fluviatile Rinne

Die Rinnenstruktur konnte unter dem Ansatz der iterativen Modellierung über Kontrollelemente modelltechnisch gut erfasst und als solche modelliert werden (vgl. Abb. 5.11). Dabei decken sich Verlauf und Lage recht gut mit der linearen Rinnenstruktur des Referenzmodells.

In Verbindung mit einem konstruierten Verbreitungspolygon ließen die äußerst flexiblen Möglichkeiten zur Einflussnahme auf die Interpolation die Modellierung der Rinne auf der Grundlage von Bohrdaten zu. Die Struktur wurde dabei iterativ entwickelt. Das heißt, im Zuge der Modellierung wurden mehrere Interpolationsschritte durchgeführt, wobei die Randbedingungen bzw. *Constraints* jeweils den Anforderungen der aktuellen Interpolation angepasst bzw. bestehende Randbedingungen um zusätzliche *Constraints* erweitert worden sind.

Die Rinnenstruktur ist mit einer Fläche von 0,92 Mio. m² verbreitet. Der Unterschied zum Referenzmodell beträgt damit etwa -5,5 %. Dabei ist jedoch zu bedenken, dass bei kleinräumig verbreiteten Schichtkörpern bereits geringste Differenzen in relativ hohen prozentualen Abweichungen resultieren. Die modellierte Schichtunterkante nimmt Tiefenlagen zwischen 50,6 und 69,48 mNN ein (Referenzmodell: 50,6 bis 69,34 mNN). Die scheinbare Mächtigkeit erreicht im südlichen Abschnitt der Schichtverbreitung maximal 14 m. Im Referenzmodell ist die Rinne an gleicher Stelle maximal 14,48 m mächtig. Die Schichtkubatur fällt mit 5,01 Mio. m³ etwa 19 % geringer aus als das Volumen der Rinne im Referenzmodell. Ursache hierfür sind die vergleichsweise flacher einfallenden Flankenwinkel sowie die etwas geringere Verbreitung der Struktur. Im Bereich der südlichen Schichtkörperverbreitung beeinflussen vor allem die generalisierten Flankenwinkel der Bergbaukippen, welche die Rinne hier begrenzen, die Ausdehnung und damit auch das durch die Rinnenstruktur beanspruchte Volumen.

Flözkomplex Bitterfeld

Wie im Referenzmodell, so wird auch in dem unter GOCAD entwickelten Modell die Gestalt des Flözkomplexes maßgeblich von den überlagernden Strukturen der Bergbaukippen sowie der weichselzeitlichen Rinne geprägt (vgl. Abb. 5.12 und 5.6).

Der verwendete Interpolationsalgorithmus resultiert auch hier in einer deutlich gleichmäßigeren und ruhigeren Morphologie der Schichtunterkante, was in Verbindung mit der Wirkung der Modellhierarchie zu einer stellenweise geringeren Schichtverbreitung führt. Dies trifft besonders für jene Bereiche zu, in denen die Braunkohle im Zuge der Auskohlung nur noch in geringen Mächtigkeiten anzutreffen ist. Denn Zonen mit geringer Mächtigkeit reagieren besonders sensibel auf Trends, die während der Interpolation verfolgt bzw. berücksichtigt werden. So ist es nicht erstaunlich, dass der Flözkomplex mit 10,89 Mio. m² eine Verbreitung besitzt, die etwa 12 % unter der Schichtverbreitung im Referenzmodell liegt.

Dagegen spiegelt die Gestalt der Schichtfläche mit dem Verlauf ihrer Isolinien ein ähnliches Bild wie im Referenzmodell wider: Der südöstliche Bereich ist in beiden Modellen durch ein relativ flaches Relief geprägt. Ausgehend von einer in NW-SE-Richtung verlaufenden Achse fällt die Schichtunterkante jeweils mit flachen Winkeln nach SW und NE ein. Ebenfalls beiden Modellen gemein ist ein deutlicher Anstieg der Schichtunterkante nordwestlich einer Diagonalen, welche das Gebiet von SW nach NE quert. Die Schichtunterkante ist mit Werten zwischen 37,8 und 74,4 mNN in ähnlichen Tiefenlagen lokalisiert wie im Referenzmodell, wo die Unterkante des Flözkomplexes Werte zwischen 38,86 und 73,97 mNN annimmt.

Die Mächtigkeitsdarstellung (Abb. 5.12 - B) offenbart dagegen größere Unterschiede. So sind die während der Auskohlung erhalten gebliebenen Straßenpfeiler im E und W des Modellgebietes weniger deutlich ausgeprägt. Größter Einflussfaktor hierfür ist die Gestalt der in den Untergrund eingreifenden Bergbaukippen. Wie bereits im Zusammenhang mit den Kippenkörpern beschrieben (Kap. 5.3), kommt der östliche Straßenpfeiler nur in Form einer Aufwölbung der Kippenunterkante zum Ausdruck, was in einem direkten Einfluss auf die Mächtigkeit des Flözkomplexes in diesem Bereich resultiert. Dagegen spiegeln die Mächtigkeitsdarstellungen beider Modelle die im zentralen Teil des Modellgebietes eingeschnittene Rinnenstruktur wider, welche sich hier in zwei kleinere Teilrinnen aufspaltet.

Als Ergebnis des verwendeten Interpolationsalgorithmus zeigt auch die Mächtigkeitsverteilung generell einen gleichmäßigeren Verlauf der entsprechenden Isochoren. Die größten Mächtigkeiten sind dabei mit knapp 21 m im südlichen Bereich der Schichtverbreitung lokalisiert. Im Referenzmodell ist der Flözkomplex hier maximal 23,21 m mächtig. Das errechnete Schichtvolumen von 73,99 Mio. m³ übersteigt die äquivalente Schichtkubatur im Referenzmodell um ca. 4 %.

Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil

Der Obere Bitterfelder Glimmersand ist, ähnlich wie im Referenzmodell, mit einer Ausdehnung von 15,6 Mio. m² fast über die gesamte Fläche des Modellgebietes verbreitet (vgl. Abb. 5.13). Die Abweichung in der flächenmäßigen Ausdehnung beträgt hierbei lediglich -0,2 %.

Wie auch schon bei den zuvor vorgestellten Schichtkörpern, so ist auch die Schichtunterkante des Oberen Bitterfelder Glimmersandes durch einen vergleichsweise harmonischen bzw. gleichmäßigen Verlauf ihrer Isolinien geprägt. Dennoch repräsentiert die Morphologie der Fläche ähnliche Trends, wie sie auch im Referenzmodell zum Ausdruck kommen (vgl. Abb. 5.13 - A und 5.7 - A).

Die Schichtunterkante befindet sich in einer Tiefenlage von 33,31 bis 60,28 mNN, wogegen die Schichtfläche im Referenzmodell zwischen 35,44 und 59,08 mNN lokalisiert ist. Die Ursache hierfür ist in einer geringfügigen Über- bzw. Unterschreitung der durch die Datenbasis repräsentierten Werte zu suchen. Die Verfolgung von Trends kann im Zuge der Interpolation zu derartigen Phänomenen führen, während eine direkte Triangulation, wie sie bei der Erstellung des Referenzmodells zur Anwendung kam, derartige Effekte von vornherein ausschließt. Allgemein betrachtend muss hier jedoch angemerkt werden, dass in den wenigsten Fällen der vollständige Wertebereich durch die Datenbasis repräsentiert sein wird. Dies wird besonders unter dem Gesichtspunkt, dass es sich bei Bohrinformationen stets nur um stichprobenartige und punktuelle Repräsentationen eines realen Objektes handelt, deutlich.

Die Mächtigkeitsdarstellung (Abb. 5.13 - B) zeigt, wenn auch in geglätteter Form, deutliche Parallelen zum Referenzmodell. Als auffälligste Elemente sind hier die Erosionsbasis der fluvialen Rinne, welche den Kontakt zwischen quartärem und tertiärem Grundwasserleiter herstellt, und der ausgeprägte Mächtigkeitssprung entlang einer, das Modellgebiet in NE-SW-Richtung querenden Diagonalen herauszustellen. Die Mächtigkeiten erreichen Werte bis 23,63 m, wogegen der entsprechende Schichtkörper im Referenzmodell maximal 19,96 m mächtig ist. Die errechnete Schichtkubatur von 148,66 Mio. m³ variiert vom Referenzmodell, in dem der Obere Bitterfelder Glimmersand ein Volumen von 146,98 Mio. m³ einnimmt, lediglich um 1,1 %.

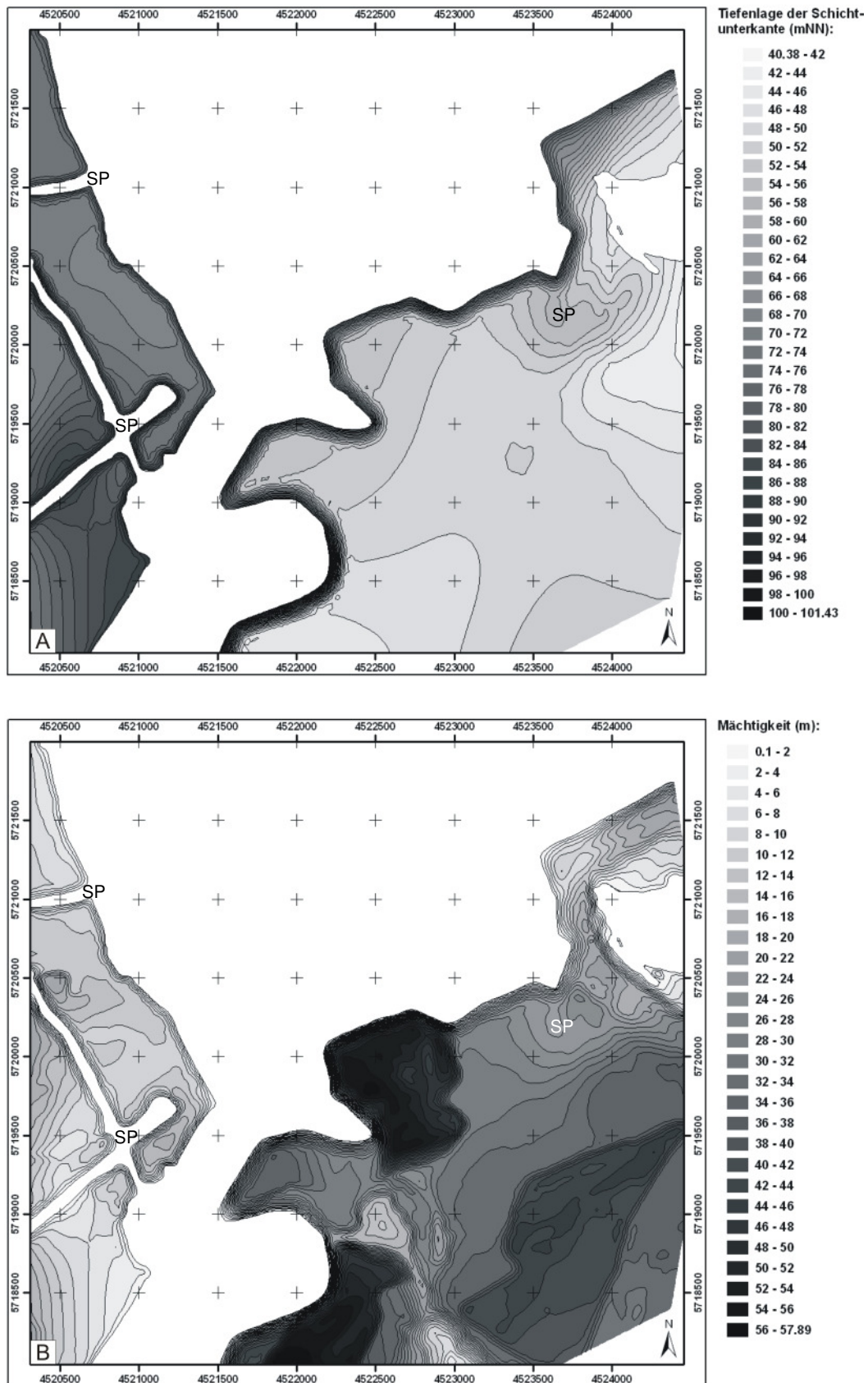


Abb. 5.9: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der Kippenkörper aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Der im E gelegene Straßenpfeiler der ehemaligen Braunkohlenbahn kommt nur in Form einer Aufwölbung der Schichtunterkante zum Ausdruck. Die Flankenwinkel der Kippenstrukturen konnten modelltechnisch nur in generalisierter Form erfasst werden. SP – Straßenpfeiler.

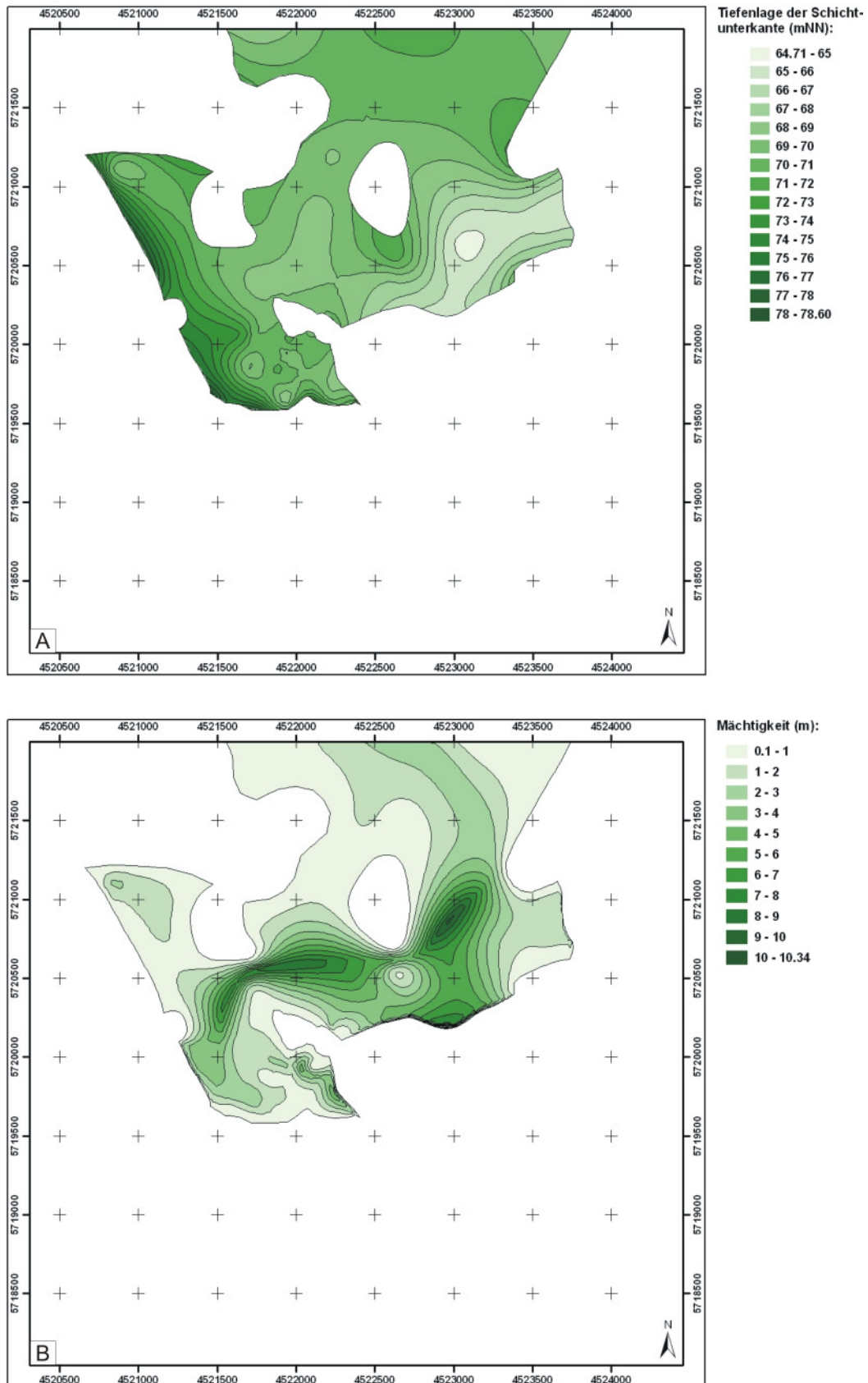


Abb. 5.10: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Periglazialhorizontes 1 aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Die Gestalt des Schichtkörpers wird neben der Datenbasis entscheidend vom Interpolationsverfahren sowie der Geometrie der überlagernden Schichtenfolge beeinflusst.

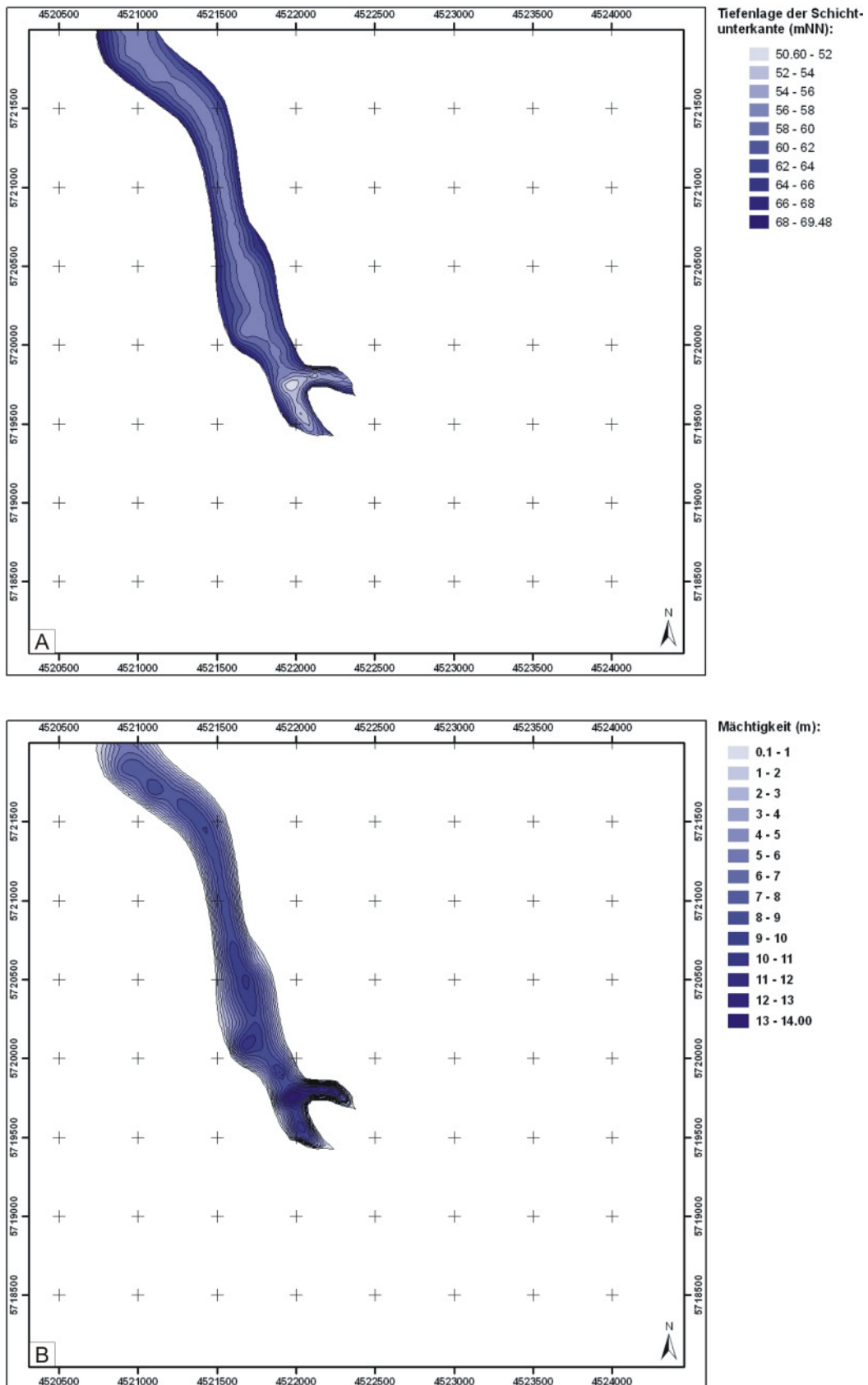


Abb. 5.11: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluvialen Rinne aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Mit dem implementierten modelltechnischen Ansatz konnte die Rinnenstruktur gut als solche modelliert werden.

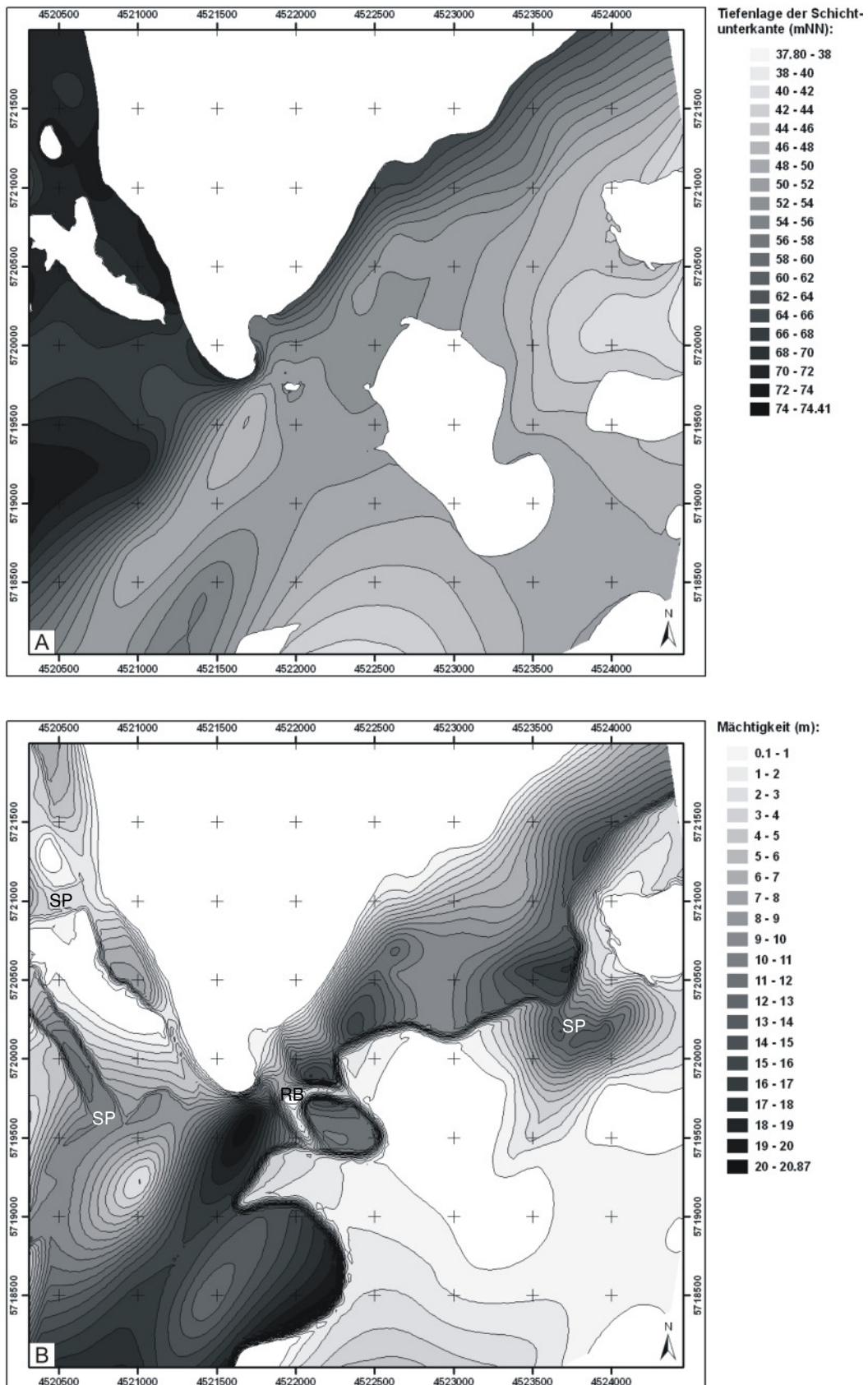


Abb. 5.12: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Flözkomplexes Bitterfeld aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Die Straßenfeiler im E und W des Modellgebietes sind weniger deutlich ausgeprägt. Dagegen ist die in den Flözkomplex eingeschnittene Rinnenstruktur im zentralen Bereich deutlich zu erkennen. SP – Straßenfeiler; RB – Rinnenbasis.

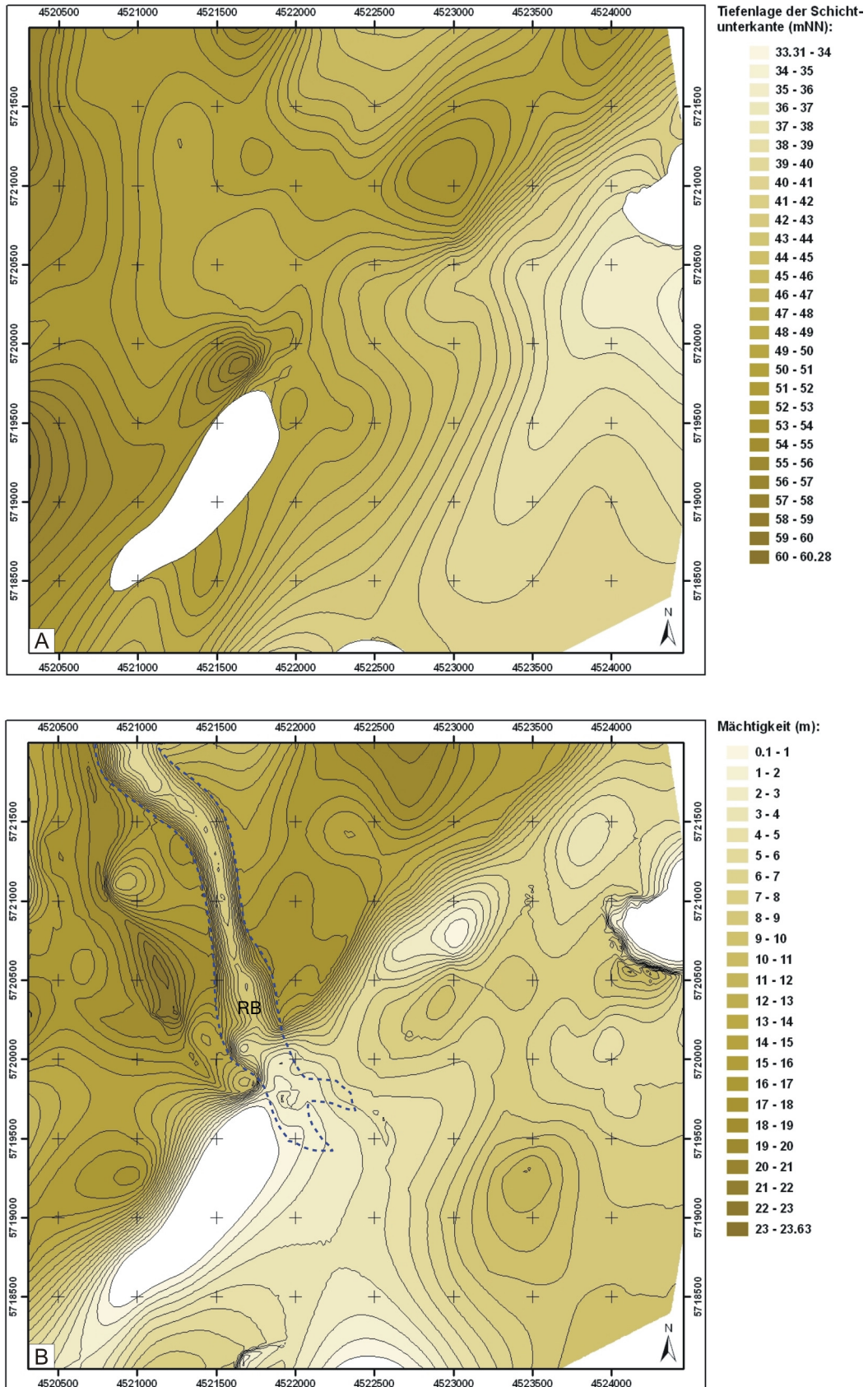


Abb. 5.13: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Oberen Bitterfelder Glimmersandes aus dem unter GOCAD entwickelten Modell. Deutlich ist in der Mächtigkeitsdarstellung die Erosionsbasis der weichselzeitlichen Rinne sowie der Mächtigkeitsprung entlang einer gedachten, SW-NE verlaufenden Linie zu erkennen. Die Verbreitung der Rinnenstruktur wird durch die dunkelblaue, gestrichelte Linie markiert. RB – Rinnenbasis.

5.4 Ergebnisse unter dem interpolativen Ansatz (MVS, RockWorks, GMS)

Da die Modellierwerkzeuge MVS, RockWorks und GMS allesamt den interpolativen Ansatz zur geologischen 3D-Modellierung implementiert haben, sollen die Resultate in diesem Teilkapitel nur auszugsweise und zusammenfassend dargestellt werden. Obwohl sich die Ergebnisse, die mit den verschiedenen Modellierwerkzeugen erreicht wurden, in Abhängigkeit von den unterschiedlichen Möglichkeiten der Datenintegration, Diskretisierung und Interpolation (vgl. Kap. 4) stellenweise unterscheiden, lassen sich die Effekte und Auswirkungen des verwendeten Ansatzes sowie der modelltechnischen Umsetzung an ausgewählten Beispielen zusammenfassend verdeutlichen.

Eine Besonderheit aller betrachteten Werkzeuge, die diesen Ansatz in sich vereinen, ist, dass die resultierenden Volumenmodelle auf der Grundlage von Schichtflächen erstellt werden, die jeweils die gesamte Fläche des Modellgebietes abdecken. Wie bereits unter Kapitel 3.4.4 detailliert beschrieben, kann dies zum Phänomen der „Schichtverschleppung“ führen. Im Zusammenhang mit der Anwendung einer regional gültigen Modellhierarchie werden unter Umständen einzelne Bereiche von Schichtflächen und -körpern nach oben oder unten verschleppt, wodurch sich teilweise fehlerhafte und unplausible Resultate ergeben können.

Gegenüber MVS und RockWorks besitzt GMS mit der Möglichkeit, ein TIN als initiale Basisfläche zu definieren, Voraussetzungen, der Datenbasis besser gerecht zu werden. Denn die Geometrie eines TINs lässt sich sowohl exakt an Bohrlokalitäten als auch an die oberflächige Verbreitung der Schichtglieder anpassen. Aus diesem Grund konnten die Ausbisslinien unter GMS grundsätzlich besser und genauer dargestellt werden.

Generell ist jedoch anzumerken, dass die laterale Eingrenzung von Schichtkörpern unter diesem Ansatz problematisch ist. Dies trifft insbesondere für tiefer liegende Schichtglieder zu. Die resultierende Schichtverbreitung wird dann nahezu ausschließlich vom Interpolationsverfahren, der Diskretisierung sowie der überlagernden Schichtenfolge bestimmt.

Bergbaukippen

Die Kippenkörper waren modelltechnisch recht gut erfass- und darstellbar. Dabei wurden die Kippenstrukturen, wie bei der Modellerstellung unter GOCAD, in mehreren Stufen in die Modellebene überführt: Nach einer separaten Modellierung des westlichen und östlichen Teils der Kippenunterkante auf der Grundlage von Bohrinformationen wurden die Stützpunkte der Flächen exportiert und im GIS mit Hilfe eines Verbreitungspolygons und einer definierten Pufferzone (vgl. Kap. 5.3) für die erneute Interpolation selektiert. Sämtliche Bereiche, in denen die Kippen oberflächlich nicht verbreitet sind, wurden schichtflächenbezogen mit Informationen aus dem DGM besetzt (vgl. Kap. 4.3, 4.4 und 4.5). In einem weiteren Schritt war es dann möglich, die Unterkante der Kippenkörper zusammenhängend zu interpolieren. Die Berücksichtigung von Flanken- bzw. Böschungswinkeln war dabei ebenfalls nur in generalisierter Form möglich. Auch hier stehen die resultierenden Flankenwinkel in direkter Beziehung zum gewählten Pufferbereich sowie zur Tiefenlage der Schichtunterkante entlang der Pufferzone.

Beispielhaft ist in Abbildung 5.16 die Unterkante und Mächtigkeitsverteilung der Bergbaukippen aus dem unter GMS entwickelten Modell dargestellt. Auffällig sind hierbei die starken Analogien zu den Kippenstrukturen, welche dem GOCAD-Modell entstammen: Sowohl die Morphologien der Schichtunterkanten als auch die Mächtigkeitsverteilungen zeigen sehr ähnliche Muster. Im Vergleich zum Referenzmodell besitzen auch hier die Isolinien grundsätzlich einen gleichmäßigeren, homogeneren Verlauf. Verantwortlich hierfür ist ebenfalls das angewendete Interpolationsverfahren. Die Varianzanalyse resultierte in relativ hohen Aussageweiten, was in Verbindung mit dem Kriging-Verfahren zu Flächen mit vergleichsweise niedriger Rauigkeit oder räumlicher Variabilität führt. Dies ist ebenfalls bei den unter MVS und RockWorks erreichten Ergebnissen zu beobachten. Offensichtlich führte hier die automatische Varianz- und Variogrammanalyse (vgl. Kap. 4.3 und 4.4) zu ähnlich hohen Aussageweiten.

Im Vergleich zum Referenzmodell kommt der im E des Modellgebietes gelegene Straßenpfeiler in allen Modellen nur als Aufwölbung der Schichtunterkante zum Ausdruck. Die Datenlage reicht hier nicht aus, um die Struktur in detaillierter Form mit den implementierten Methoden abzubilden. Dagegen konnten die Straßenpfeiler im W des Gebietes durch die Einbindung von schichtflächenbezogenen DGM-Informationen gut dargestellt werden.

Die Schichtverbreitung des ausgewählten Beispiels beträgt 8,45 Mio. m². Sie weicht damit um -0,2 % vom Referenzmodell ab. Auch der Tiefenbereich, in dem die Schichtunterkante lokalisiert ist, sowie die maximalen Mächtigkeiten entsprechen mit 39,71 bis 101,4 mNN bzw. 57,42 m nahezu den Werten aus dem Referenzmodell. Die errechnete Schichtkubatur von 214,49 Mio. m³ liegt nur etwa 1 % unterhalb des Volumens der Kippenkörper aus dem von FABRITIUS (2002) entwickelten Modell.

Periglazialhorizont 1

Als beispielhafte Auswahl der Ergebnisse, die unter dem interpolativen Ansatz erreicht wurden, ist in Abbildung 5.17 der Periglazialhorizont 1 aus dem GMS-Modell aufgeführt. Die Schichtverbreitung ist mit 4,91 Mio. m² um fast 35 % höher als im Referenzmodell. Da dieser Horizont nicht oberflächlich ansteht, konnte seine laterale Ausdehnung in den Modellen nur eingeschränkt mit zusätzlichen Informationen aus dem DGM fixiert werden. Damit sind Gestalt und Verbreitung des Schichtkörpers fast ausschließlich von den Bohrdaten, dem Interpolationsverfahren, den definierbaren Interpolationsparametern sowie der Geometrie der überlagernden Schichtenfolge abhängig.

Die in Abbildung 5.17 - A dargestellte Unterkante variiert in ihrer Tiefenlage zwischen 63,43 und 80,69 mNN, während die Unterkante des Schichtkörpers im Referenzmodell Werte zwischen 64,9 und 76,57 mNN annimmt. Die Morphologie der Unterkante lässt dabei deutlich die Auswirkungen erkennen, wie sie bei einer Modellierung von Schichtflächen, die über das gesamte Modellgebiet hinweg verbreitet sind, auftreten können: Im westlichen Bereich der Schichtverbreitung wird die Unterkante entlang des Bitterfelder Decktonkomplexes, welcher hier an der Oberfläche aufgeschlossen ist, gewissermaßen nach oben geschleppt (Abb. 5.14).

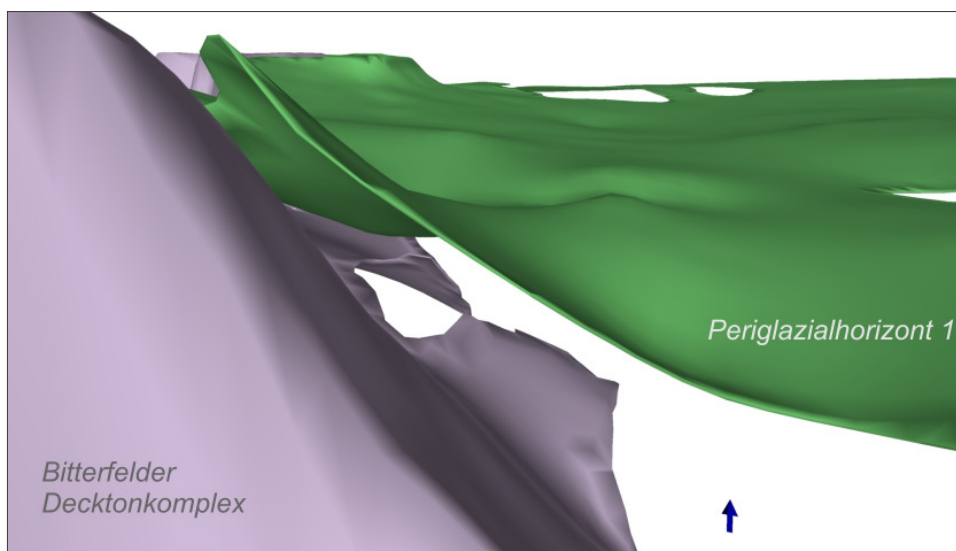


Abb. 5.14: Das Phänomen der Schichtverschleppung, wie es stellenweise bei den unter MVS, RockWorks und GMS erstellten Schichtkörpern auftritt. Die Abbildung wurde auf Basis des unter GMS generierten Modells erstellt. Im W des Modellgebietes ist der Periglazialhorizont entlang des Bitterfelder Decktonkomplexes nach oben geschleppt. Der Raum zwischen Deckton und Periglazialhorizont wird durch weitere Schichtglieder eingenommen, die in ihrer Gestalt ebenfalls durch Verschleppung beeinflusst worden sind. Darstellung 15fach überhöht.

Die Mächtigkeitsdarstellung (Abb. 5.17 - B) des gewählten Beispiels spiegelt dagegen ähnliche Trends wider, wie sie auch im Referenzmodell zu beobachten sind. In beiden Modellen befinden sich die größten Mächtigkeiten mit Werten von knapp über 6 m im SE der Schichtverbreitung, während der Horizont im N nur mit geringen Mächtigkeiten verbreitet ist.

Das von der Schicht beanspruchte Volumen von 4,93 Mio. m³ weicht vom Referenzmodell, in dem der Horizont eine Kubatur von 4,71 Mio. m³ besitzt, um ca. 4,6 % ab. Im Vergleich zu der um 35 % höheren Schichtverbreitung fällt dieser Wert gering aus. Die Ursachen hierfür sind in der geringen Schichtmächtigkeit in Bereichen der zusätzlichen Verbreitung sowie der geringeren räumlichen Variabilität, deren Ursprung im verwendeten Interpolationsverfahren begründet liegt, zu suchen.

Fluviatile Rinne

Die weichselzeitliche Rinnenstruktur ist jenes Schichtglied, bei dem sich im Vergleich zum Referenzmodell die größten Unterschiede ausmachen lassen. Die geringe laterale Verbreitung sowie die ausgesprochen hohe strukturelle Anisotropie des Schichtkörpers sind unter dem interpolativen Ansatz, wie er in MVS, RockWorks und GMS implementiert ist, modelltechnisch nur schwierig bis kaum realisierbar. Dabei ist gerade die Gestalt der Rinne entscheidend für weiterführende hydrogeologische Untersuchungen. Denn wie bereits erwähnt, bildet sie im Raum Bitterfeld den Kontakt zwischen quartärem und tertiärem Grundwasserstockwerk.

Beispielhaft sollen hier die Schichtkörper der fluviatilen Rinne aus den unter MVS (Abb. 5.18) und RockWorks (Abb. 5.19) erstellten Modellen behandelt werden.

Wie unter Kapitel 4.3 beschrieben, war unter MVS die Berücksichtigung von Anisotropien über die Definition eines Symmetriefaktors nicht sinnvoll nutzbar. Da der Faktor für die ge-

samte zu modellierende Schichtenfolge einheitlich definiert wird und die übrigen Schichtkörper im Wesentlichen isotrope Verhältnisse widerspiegeln, musste diese Annahme auch für das Schichtglied der fluviatilen Rinne übernommen werden.

Abbildung 5.18 lässt deutlich erkennen, dass die Struktur im Modell, welches unter MVS entwickelt wurde, eine erheblich größere Verbreitung besitzt. Hier stehen die 0,97 Mio. m² des Schichtkörpers aus dem Referenzmodell den 2,02 Mio. m² des unter MVS modellierten Schichtgliedes gegenüber. Der Unterschied beträgt somit gut 108 %. Die Ausdehnung der Struktur kann mit der vorhandenen Aufschlussdichte und in Verbindung mit einer Modellierung, welche sich allein auf die Interpolation von diskreten Datenpunkten stützt, nicht ausreichend eingegrenzt werden. Zudem beschreiben die Modellergebnisse keine zusammenhängende Rinnenstruktur. Hier kommen ebenfalls die im Zusammenhang mit dem verwendeten Ansatz verhältnismäßig schlechte Beschreibung der Struktur durch die vorhandenen Daten sowie die fehlende Berücksichtigung von Anisotropien zum Tragen.

Weiter unterscheidet sich der Tiefenbereich, in dem die Schichtunterkanten lokalisiert sind, beträchtlich. So variieren die Werte aus dem Referenzmodell zwischen 50,6 und 69,34 mNN, während die betreffende Unterkante aus dem MVS-Modell Werte zwischen 53,4 und 81,92 mNN annimmt. Als Ursache hierfür ist zum einen die größere Verbreitung der Modellschicht anzusehen. Zudem zeigt die Unterkante, wie auch im Fall des zuvor betrachteten Periglazialhorizontes aus dem GSM-Modell, im westlichen Teil der Schichtverbreitung eine Verschleppung nach oben. Dieser Effekt ist ebenfalls das Resultat einer Modellierung von Schichtflächen und -körpern über die gesamte Fläche des Modellgebietes. Die minimal erreichte Tiefenlage von 53,4 mNN ist ein Beispiel dafür, dass die Datenbasis nicht immer exakt repräsentiert werden kann. Die räumliche Darstellung über ein Raster lässt in Verbindung mit der gewählten Diskretisierung hier nur eine Annäherung zu.

Die Unterschiede bezüglich Schichtverbreitung und Schichtunterkante wirken sich selbstverständlich ebenfalls auf die Mächtigkeitsverteilung aus. So erreicht der unter MVS modellierte Schichtkörper nur eine maximale Mächtigkeit von 10,98 m. Im Referenzmodell ist die Rinne dagegen bis zu 14,48 m mächtig. Die Schichtkubatur weicht in diesem Zusammenhang mit einem Wert von 6,4 Mio. m³ nur um +3,2 % vom äquivalenten Schichtkörper aus dem Referenzmodell ab. Die verhältnismäßig hohe Bohrdatendichte im zentralen Teil des Modellgebietes (vgl. Abb. 4.2) gewährleistet, dass die Aufgabelung der Rinnenstruktur, wenn auch mit einem größeren Winkel, zumindest ansatzweise zum Ausdruck kommt.

Im Gegensatz zu MVS ließen sich bei der Modellierung der fluviatilen Rinne unter RockWorks und GSM Anisotropien berücksichtigen. Abbildung 5.19 zeigt die Rinnenstruktur aus dem unter RockWorks erstellten Modell. Die Einbeziehung von Richtungsabhängigkeiten äußert sich, sowohl in der Darstellung zur Tiefenlage der Schichtunterkante als auch in der Mächtigkeitsverteilung, in einem deutlich gerichteten Verlauf der Isolinien. Der größte räumliche Zusammenhang ergibt sich demnach in einer Richtung zwischen 150° und 160°.

Die Berücksichtigung von Anisotropien verstärkt jedoch einen Effekt, welcher in Verbindung mit dem Interpolationsverfahren Kriging auftreten kann: Neben Wichtungsfaktoren werden beim Kriging gewissermaßen auch Trends berücksichtigt. Dies kann im Zusammenhang mit der flächendeckenden Modellierung von Schichtunterkanten zu dem Phänomen führen, dass ein Schichtkörper flecken- oder inselförmig zwischen zwei Bohrungen auftritt, obwohl dieser durch keine der beiden angrenzenden Bohrungen belegt ist. Abbildung 5.15 stellt das beobachtete Problem schematisch dar.

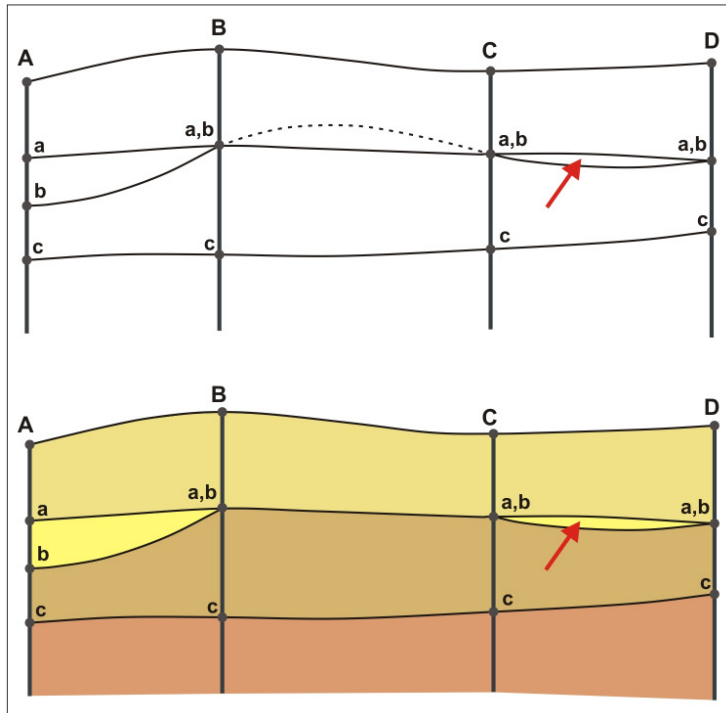


Abb. 5.15: Die Berücksichtigung von Trends kann im Zuge der Interpolation in solitären Schichtelementen resultieren. Die Abbildung stellt das Problem schematisch dar: In Bohrung A sind alle Schichten und damit ihre Unterkanten (a, b und c) real vorhanden. In den Bohrungen B bis D fallen die Schichtflächen a und b zusammen, der entsprechende Schichtkörper ist hier nicht verbreitet. Die Berücksichtigung von Trends während der Interpolation kann zu einem welligen Erscheinungsbild der modellierten Schichtunterkante führen. Während die Flächenüberschneidung zwischen den Bohrungen B und C (gestrichelte Linie) durch die Anpassung an die Modellhierarchie korrigiert wird, ist der resultierende Schichtkörper zwischen den Bohrungen C und D verbreitet (roter Pfeil). Dabei ist sein Auftreten weder in Bohrung C noch in Bohrung D belegt.

Sowohl unter RockWorks (vgl. Abb. 5.19) als auch unter GMS führte die Berücksichtigung von Richtungsabhängigkeiten bei der Modellierung der Rinnenstruktur zu derartigen solitären Schichtelementen. Dabei stehen die Ergebnisse nicht im Widerspruch zu den Bohrdaten selbst. Zeigt eine Bohrung die Abwesenheit des Schichtgliedes an, so besitzt der modellierte Schichtkörper an der Bohrlokalisierung eine Mächtigkeit von 0 m.

Durch die geschilderten Effekte besitzt das Beispiel aus dem unter RockWorks erstellten Modell mit 3,78 Mio. m² eine um 290 % größere Verbreitung als die Rinnenstruktur im Referenzmodell. Auch resultieren die zusätzliche Schichtverbreitung sowie die mehrfach angesprochene Schichtverschleppung in deutlichen Differenzen bezüglich des Tiefenbereiches, in dem die Schichtunterkanten realisiert sind. Während die Unterseite im Referenzmodell Werte zwischen 50,6 und 69,34 mNN besitzt, nimmt die unter RockWorks erstellte Schichtfläche Werte von 48,0 bis 90,95 mNN ein.

Mit 16 m erreicht die Mächtigkeit ein etwas höheres Maximum als die Rinne aus dem Referenzmodell. Auch die Schichtkubatur ist mit 7,91 Mio. m³ erwartungsgemäß höher. Sie übersteigt das von der Rinne im Referenzmodell eingenommene Volumen um 27,5 %.

Flözkomplex Bitterfeld

Als beispielhafte Darstellung der unter dem interpolativen Ansatz entwickelten Modelle ist in Abbildung 5.20 der Flözkomplex des unter GMS erstellten Modells aufgeführt.

Im Vergleich zum Referenzmodell zeigt die Schichtunterkante bei ähnlichen regionalen Trends einen gleichmäßigeren Verlauf ihrer Isolinien. Wie bereits beim Beispiel der Bergbaukippen beschrieben, ist dies eine Auswirkung der während der Varianzanalyse ermittelten, relativ hohen Aussageweite. Diese resultiert im Zuge der Interpolation in Flächen mit vergleichsweise niedriger Rauigkeit. Die Unterkante ist zwischen 36,47 und 72,91 mNN lokalisiert (Referenzmodell: 38,86 bis 73,97 mNN). Dabei befindet sich das Minimum jeweils im E des Modellgebietes. Die hier auftretende Differenz von über 2 m wird durch Extrapolation verursacht, die stellenweise in Abhängigkeit der Datenlage im Zusammenhang mit dem verwendeten Interpolationsverfahren Kriging auftritt. Bei der Regionalisierung wird hier der Trend der nach E einfallenden Schichtunterkante verfolgt.

Obwohl der numerische Wert der Schichtverbreitung mit 12,64 Mio. m² vom Referenzmodell lediglich um +2,4 % differiert, zeigen die Darstellungen in den Abbildungen 5.6 und 5.20 größere strukturelle Abweichungen. Wie bereits mehrfach beschrieben, werden Schichtverbreitung und Mächtigkeitsverteilung neben der modellierten Unterkante maßgeblich von der überlagernden Schichtenfolge beeinflusst. In diesem Zusammenhang zeigt sich, dass die hohe räumliche Variabilität, wie sie beim Flözkomplex aus dem Referenzmodell zum Ausdruck kommt, mit den Möglichkeiten des interpolativen Ansatzes nur schwer bis nicht erfassbar bzw. darstellbar ist. So sind in Abbildung 5.20 - B weder die im E und W befindlichen Straßenpfeiler noch die Erosionsbasis der fluviatilen Rinne in adäquater Form repräsentiert. Die äquivalenten Schichtglieder aus den unter MVS und RockWorks entwickelten Modellen sind durch ähnliche geometrische Eigenschaften charakterisiert. Dennoch besitzt der beispielhaft dargestellte Flözkomplex aus dem GMS-Modell bei einer maximalen Mächtigkeit von 21,51 m ein Volumen von 69,89 Mio. m³. Die Abweichung zum Referenzmodell beträgt damit lediglich -1,6 %.

Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil

Die exemplarische Darstellung des Oberen Bitterfelder Glimmersandes in Abbildung 5.21 entstammt dem unter MVS entwickelten Modell. Die vergleichsweise kleineren Schichtlücken im SW und NE bedingen eine Schichtverbreitung von 16,09 Mio. m², welche die flächenmäßige Ausdehnung des entsprechenden Schichtkörpers aus dem Referenzmodell um ca. 3 % übersteigt.

Die verhältnismäßig harmonisch verlaufenden Isolinien in der Darstellung zur Tiefenlage der Schichtunterkante beschreiben Werte zwischen 31,97 und 58,13 mNN, wogegen sich die äquivalente Unterkante aus dem Referenzmodell in einem Tiefenbereich zwischen 35,44 und 59,08 mNN befindet. Die recht hohe Abweichung der Minima ist dabei, wie auch beim oben beschriebenen Flözkomplex aus dem GMS-Modell, am östlichen Rand des Modellgebietes lokalisiert und ist ebenso als Ergebnis einer Trendverfolgung im Zuge der Regionalisierung

zu sehen. Der Verlauf der Isolinien spiegelt, wenn auch in geglätteter Form, im Wesentlichen die Verhältnisse, wie sie im Referenzmodell zu beobachten sind, wider.

Dagegen lassen sich bei einem Vergleich der Mächtigkeitsdarstellungen (Abb. 5.7 - B und 5.21 - B) zum Teil beträchtliche Unterschiede feststellen. Am auffälligsten ist hierbei die Abwesenheit einer ausgeprägten Erosionsbasis der fluviatilen Rinne. Sie ist im Referenzmodell tief in den Glimmersand eingeschnitten und bildet den hydraulischen Kontakt zwischen zwei bedeutenden Grundwasserstockwerken. Der interpolative Ansatz bietet mit einer Modellierung, welche allein auf der Interpolation diskreter Datenpunkte basiert, sowie in Verbindung mit der genutzten Datenbasis nur unzureichende Möglichkeiten, die Rinnenstruktur als solche zu modellieren. Dies hat ebenfalls erhebliche Auswirkungen auf die geometrische Gestalt des hier betrachteten Glimmersandes. So wird die Erosionsbasis nur an zwei Stellen durch eine leichte Verringerung der Mächtigkeit verkörpert und ist damit nur ungenügend repräsentiert.

Zudem erfolgt der in NE-SW-Richtung verlaufende Mächtigkeitsanstieg über einen deutlich weiteren Bereich, so dass dieser im Vergleich zum Referenzmodell weniger markant ausgeprägt ist.

Die Mächtigkeiten des ausgewählten Beispiels erreichen maximale Werte von 18,4 m. Im Referenzmodell ist der Obere Bitterfelder Glimmersand maximal 19,96 m mächtig. Die errechnete Schichtkubatur differiert bei einem Wert von 142,31 Mio. m³ vom entsprechenden Volumen im Referenzmodell (146,98 Mio. m³) um -3,2%.

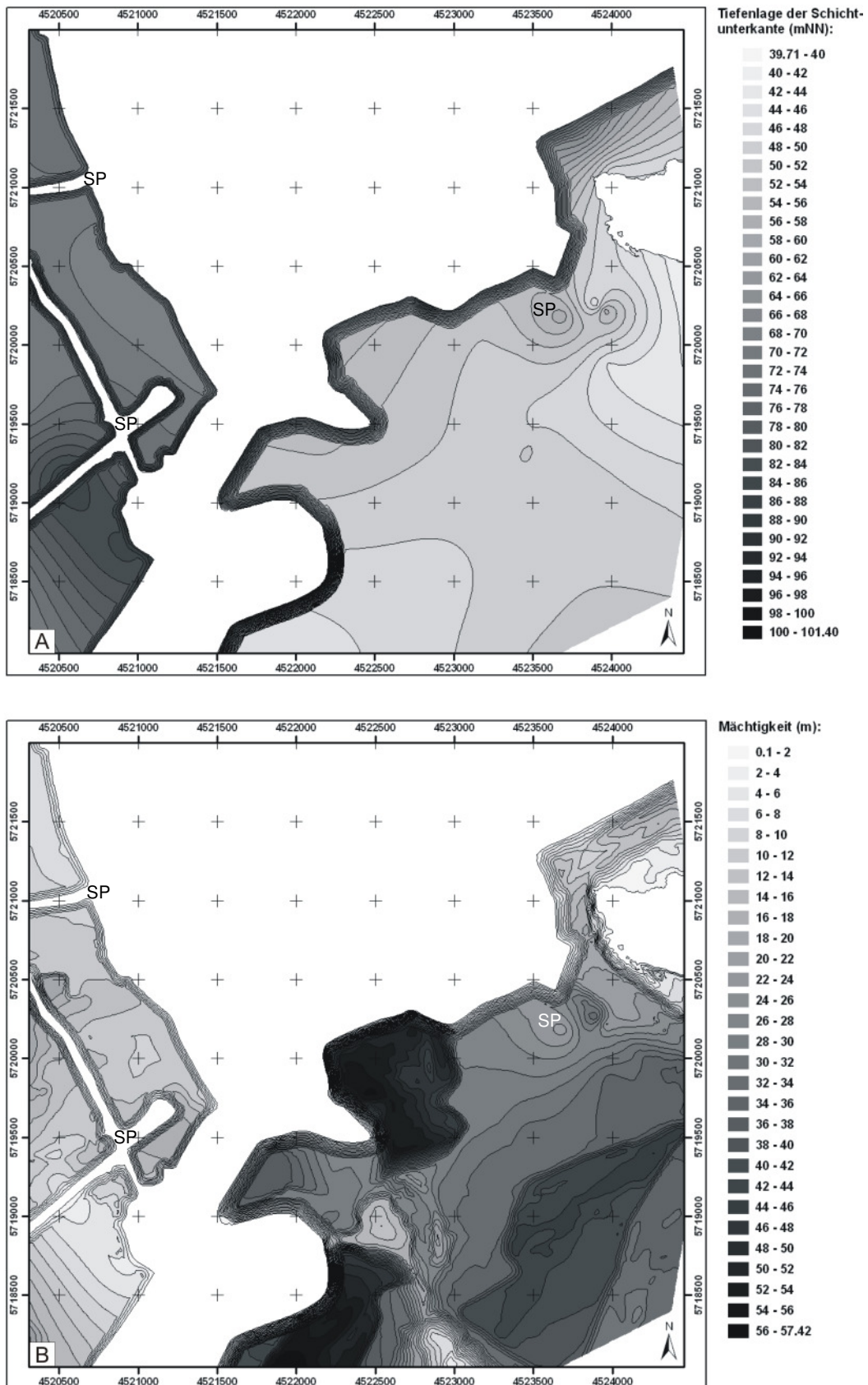


Abb. 5.16: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der Kippenkörper aus dem unter GMS entwickelten Modell. Der im E gelegene Straßenpfeiler der ehemaligen Braunkohlenbahn kommt nur in Form einer Aufwölbung der Schichtunterkante zum Ausdruck. Die Flankenwinkel der Kippenstrukturen konnten modelltechnisch nur in generalisierter Form erfasst werden. SP – Straßenpfeiler.

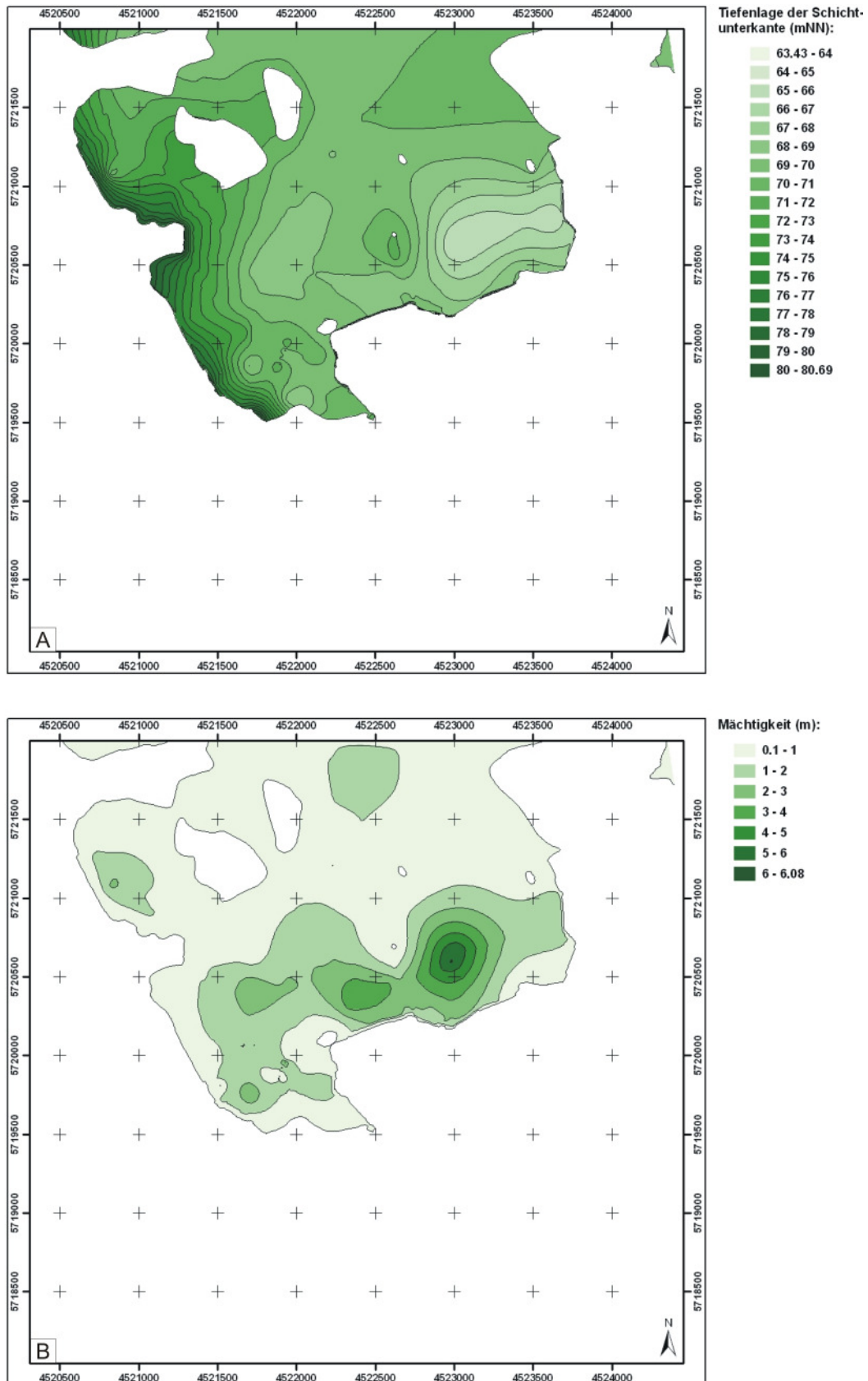


Abb. 5.17: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Periglazialhorizontes 1 aus dem unter GMS entwickelten Modell. Im westlichen Teil der Schichtverbreitung wurde die Schichtunterkante entlang des Decktonkomplexes nach oben verschleppt – ein Resultat der modelltechnischen Umsetzung über Schichtflächen, die über das gesamte Modellgebiet verbreitet sind.

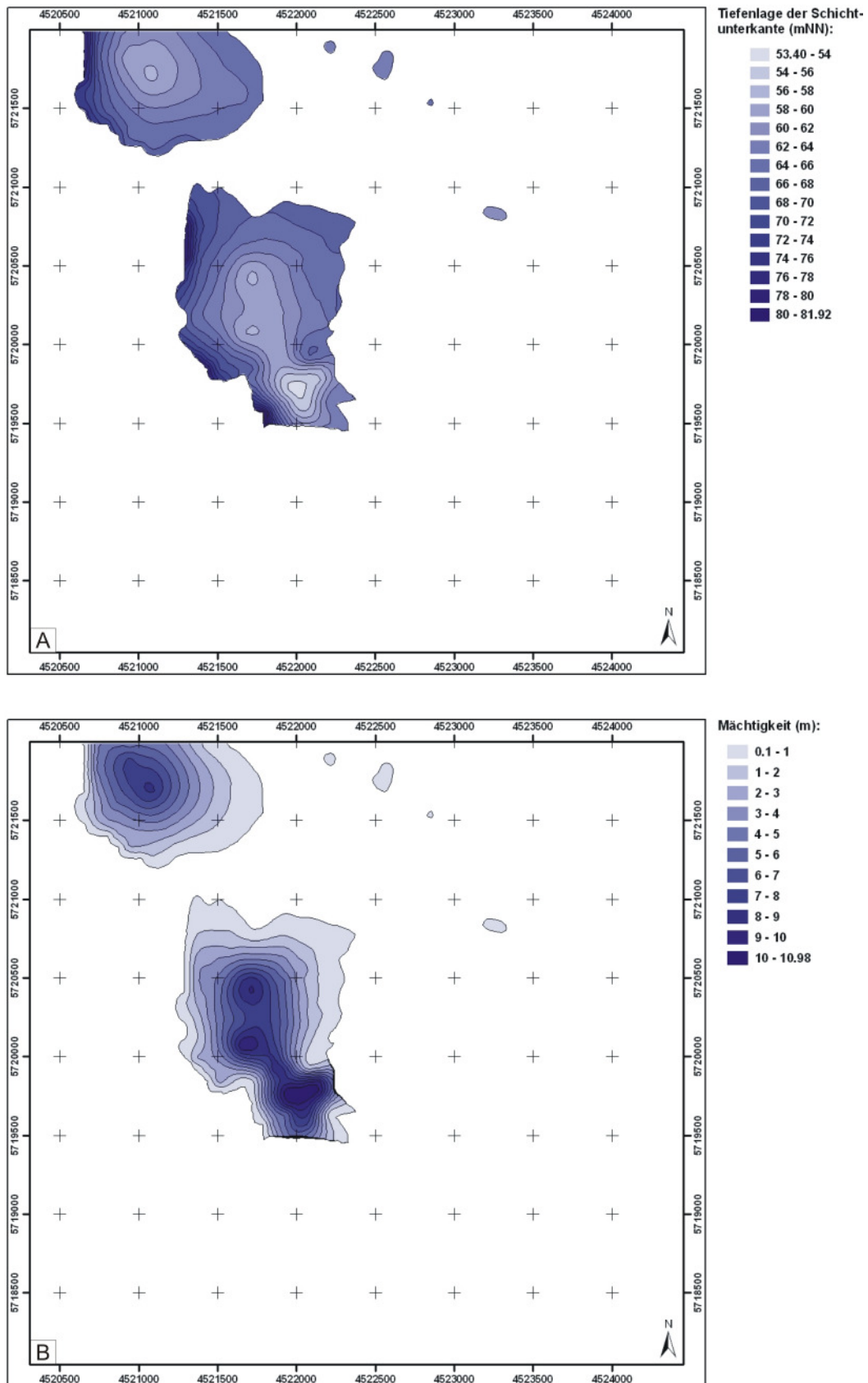


Abb. 5.18: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluviatilen Rinne aus dem unter MVS entwickelten Modell. Mit dem implementierten modelltechnischen Ansatz konnte die Rinnenstruktur nur unzureichend abgebildet werden. Die Berücksichtigung von Anisotropien war unter MVS nicht sinnvoll anwendbar.

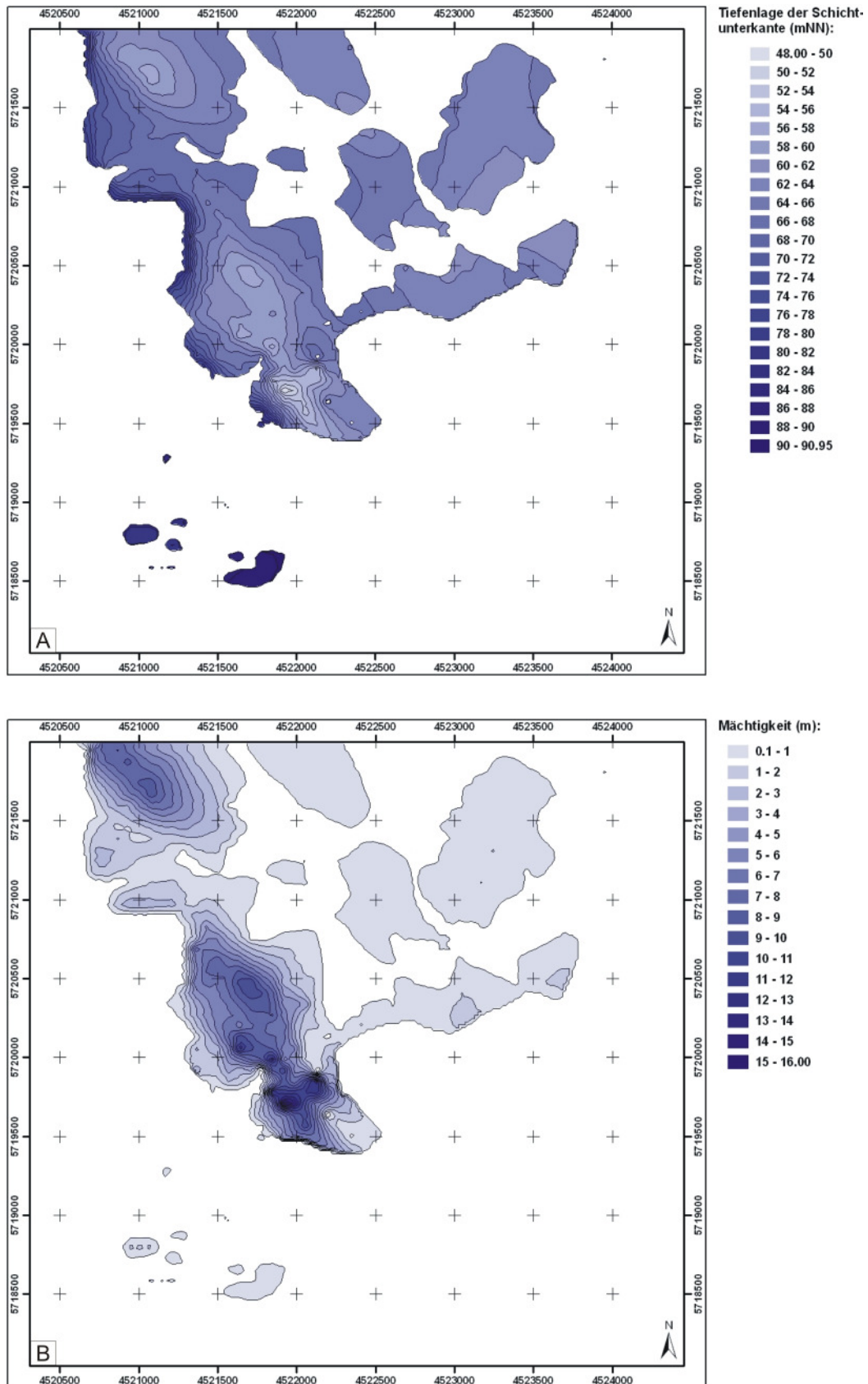


Abb. 5.19: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) der weichselzeitlichen, fluviatilen Rinne aus dem unter RockWorks entwickelten Modell. Die Berücksichtigung von Richtungsabhängigkeiten resultierte unter anderem in inselförmigen, solitären Schichtelementen.

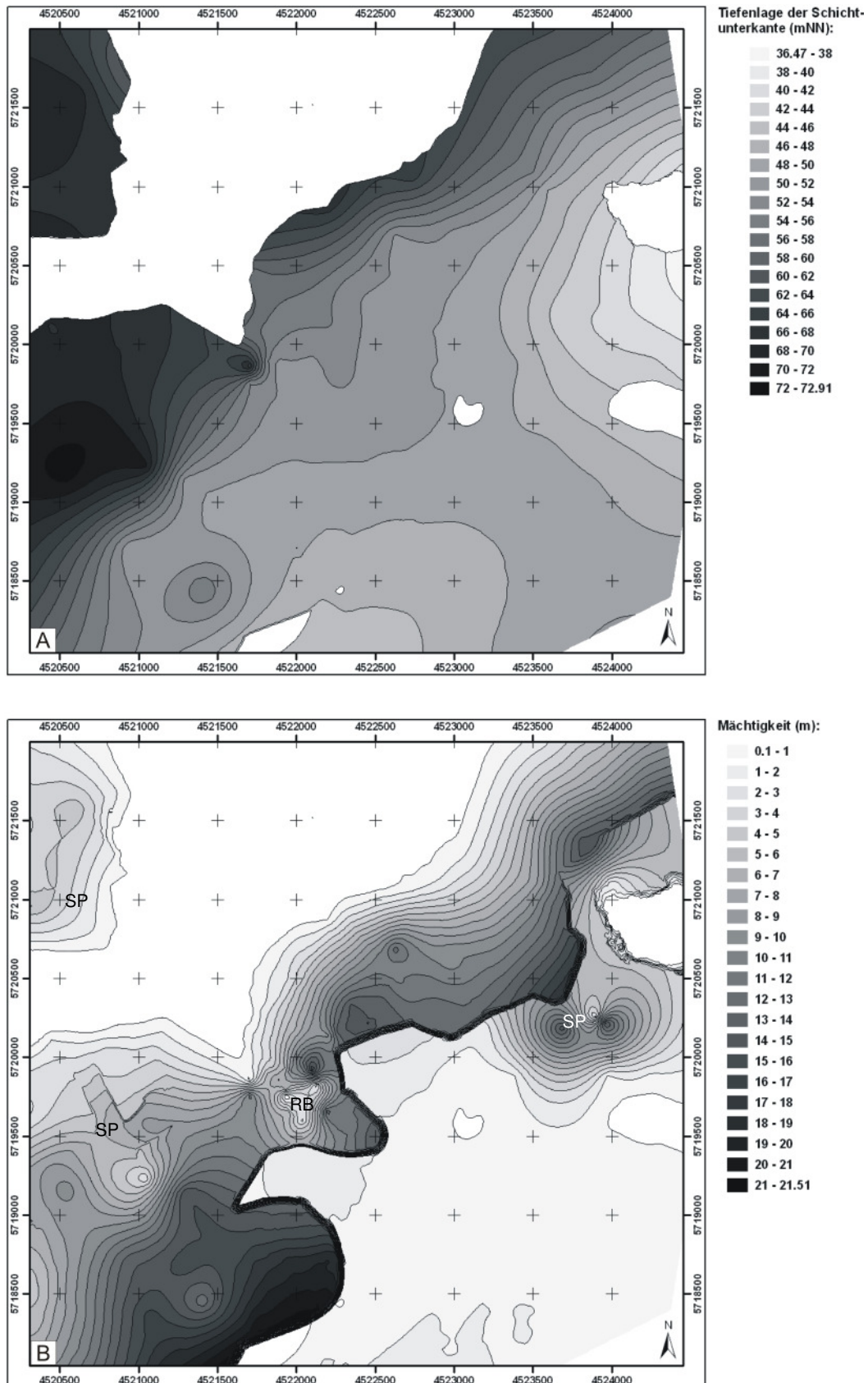


Abb. 5.20: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Flözkomplexes Bitterfeld aus dem unter GIS entwickelten Modell. Sowohl die Straßenpfeiler im E und W als auch die Erosionsbasis der eingeschnittenen Rinne im zentralen Bereich des Modellgebietes sind nur unzureichend repräsentiert. SP – Straßenpfeiler; RB – Rinnenbasis.

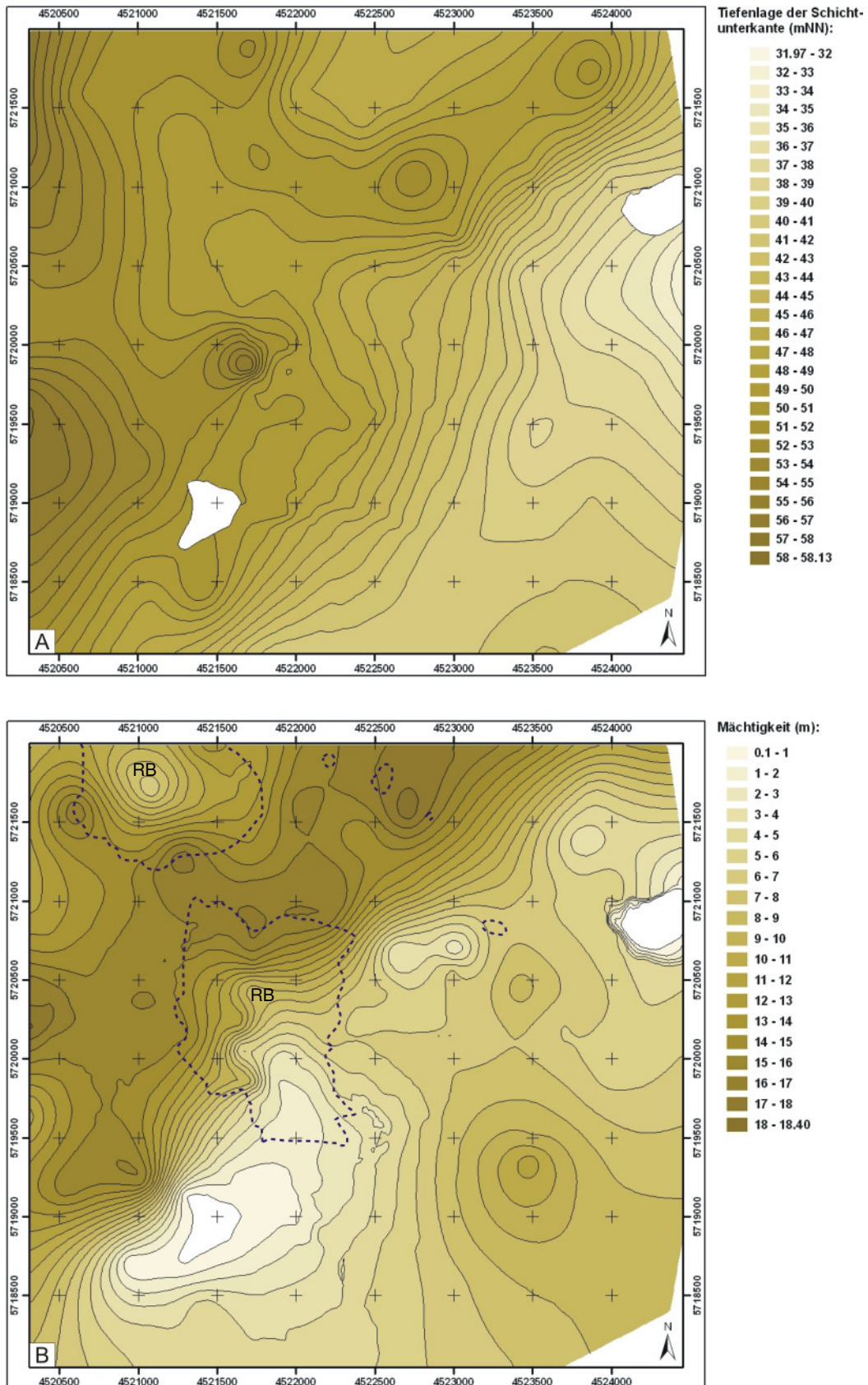


Abb. 5.21: Darstellungen zur Tiefenlage der Schichtunterkante (A) und Mächtigkeitsverteilung (B) des Oberen Bitterfelder Glimmersandes aus dem unter MVS entwickelten Modell. Die Erosionsbasis der weichselzeitlichen Rinne ist nur ungenügend repräsentiert. Die Verbreitung der zugehörigen Rinnenstruktur wird durch die dunkelblaue, gestrichelte Linie markiert. RB – Rinnenbasis.

5.5 Strukturelle Variabilität von Schichtkörpern

Neben dem überwiegend deskriptiven und visuell orientierten Vergleich der vorangegangenen Kapitel, lassen sich die Unterschiede zwischen den einzelnen Schichtgliedern aus den verschiedenen geologischen 3D-Modellen ebenfalls mit Hilfe der Variogrammanalyse erfassen und darstellen.

Insbesondere in Bezug auf die Beschreibung der strukturellen Heterogenität der modellierten Schichtkörper, welche unter einem visuellen, deskriptiven Vergleich kaum bestimmbar ist, ergeben sich durch die Varianzanalyse Möglichkeiten der Quantifizierung.

Die geometrische Heterogenität und damit die strukturelle Variabilität eines Schichtkörpers sind ausschließlich von der Geometrie der den Körper begrenzenden Flächen abhängig. Aus diesem Grund ist es wenig sinnvoll, Schichtober- und Schichtunterkanten separat zu betrachten. Dagegen eignet sich die Mächtigkeitsverteilung gut, um die strukturelle Heterogenität eines Schichtkörpers in gewissem Umfang mit Hilfe von Untersuchungen zur räumlichen Variabilität zu erfassen und zu beschreiben. In diesem Zusammenhang ist jedoch zu beachten, dass alle unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 vorgestellten Ergebnisse auf der Modellierung von Schichtflächen basieren. Die hier betrachtete strukturelle Variabilität von Schichtkörpern ist das Resultat der räumlichen Verteilung von vertikalen Schichtmächtigkeiten, welche auf der Vernetzung von Schichtflächen zu Volumenkörpern beruhen.

Weiter ist zu berücksichtigen, dass das Variogramm zwar den räumlichen Zusammenhang der entsprechenden Eigenschaft widerspiegelt, es jedoch den Raumbezug nur relativ erfassen kann. Das heißt, das Variogramm ist unabhängig vom Ort der Variablen. Dies lässt sich sehr einfach anhand des folgenden Beispiels verdeutlichen: Spiegelt man die Mächtigkeitsverteilung eines Schichtkörpers entlang der XZ- oder YZ-Ebene, so werden sich die entsprechenden omni-direktionalen Variogramme nicht vom Variogramm des ursprünglichen Schichtkörpers unterscheiden. Dennoch erlaubt das (Semi-) Variogramm eine eingeschränkte Quantifizierung der relativen strukturellen Variabilität bzw. Heterogenität eines Schichtkörpers.

Die Varianzanalyse über die Mächtigkeitsverteilung kann in diesem Zusammenhang ein Maß für die strukturelle Heterogenität eines Schichtkörpers liefern. Hierbei lassen sich folgende Zusammenhänge beschreiben und feststellen:

- Je höher die (Gesamt-) Varianz $\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (z_i - \bar{z})^2$ mit

N Anzahl der Datenpunkte

\bar{z} Mittelwert der Probe

z Wert/Ausprägung der Variablen

, umso größer ist die Heterogenität,

- je höher die Semi-Varianz $\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [z(x_i) - z(x_i + h)]^2$ mit

$N(h)$ Anzahl der Datenpaare mit Abstand h

$z(x)$ Wert der Variablen am Ort x

$z(x + h)$ Wert der Variablen am Ort $x + h$

h Abstand zwischen zwei Datenpunkten

, desto größer die Heterogenität,

- je steiler der vom Ursprung ausgehende Anstieg der experimentellen Variogrammkurve, umso stärker nimmt der autokorrelative Zusammenhang der Datenpaare bei zunehmenden Abstand ab, und umso größer ist die strukturelle Variabilität des Datensatzes und
- je kleiner die Reichweite bzw. Korrelationslänge, bei welcher der Sill erreicht wird, umso höher ist die strukturelle Heterogenität.

Auf Basis dieser Beziehungen lassen sich grundsätzlich Rückschlüsse auf die (relative) strukturelle Heterogenität von Schichtkörpern ziehen. Einschränkungen hinsichtlich der Gültigkeit der getätigten Aussagen sowie der Anwendbarkeit der Varianzanalyse im Hinblick auf die Bestimmung der strukturellen Variabilität ergeben sich im Zusammenhang mit besonderen Schichtkörpergeometrien (vgl. Abb. 5.22). Da die Varianzanalyse ausschließlich über die Mächtigkeitsverteilung erfolgt, ließe sich beispielsweise die strukturelle Heterogenität von verfalteten Schichtkörpern, die zudem durch eine relativ konstante Mächtigkeit geprägt sind, mit dieser Methode nicht adäquat erfassen. Auch die strukturelle Variabilität von Schichtkörpern, die durch einen stetigen und homogenen Mächtigkeitanstieg (Trend) oder aber durch Grenzflächen mit hoher Rauhgigkeit geprägt sind, ist mit Hilfe der Varianzanalyse nicht sinnvoll bestimmbar.

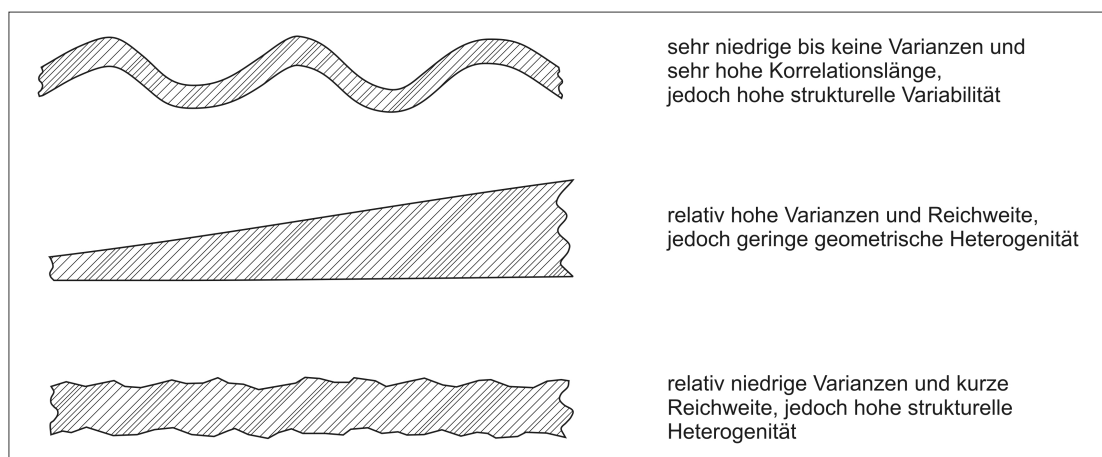


Abb. 5.22: Ungeachtet der modelltechnischen Darstellbarkeit sowie der Maßstabsabhängigkeit der aufgeführten Strukturen, kann ihre strukturelle Variabilität nicht oder nur eingeschränkt mittels einer Varianzanalyse über die Mächtigkeitsverteilung erfasst werden. Auch die zuvor getätigten Aussagen bezüglich der Beziehungen zwischen struktureller Heterogenität und (Gesamt-) Varianz, Semi-Varianz und Korrelationslänge sind auf diese Strukturen nur bedingt anwendbar.

Da jedoch keiner der betrachteten Schichtkörper den aufgeführten Sonderfällen zuzurechnen ist, kann die Varianzanalyse für die Erfassung ihrer strukturellen bzw. geometrischen Heterogenität ein wertvolles Hilfsmittel darstellen.

In Abbildung 5.25 sind die omni-direktionalen Variogramme der Mächtigkeitsverteilung aller unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper vergleichend dargestellt. Abbildung 5.26 zeigt zusätzlich die gerichteten Variogramme der fluviatilen Rinne und des Oberen Bitterfelder Glimmersandes. Die Mächtigkeitsverteilungen beider Schichtkörper lassen ausgeprägte Anisotropien erkennen, weshalb die Betrachtung gerichteter Variogramme zunächst sinnvoll erschien. Dabei wurde für beide Schichtkörper aus den verschiedenen geologischen Modellen je ein experimentelles Variogramm in Richtung der Haupt- und Nebenachse der Anisotropie-Ellipse erstellt. Die Hauptachse ist dabei stets parallel zur Richtung mit dem größten räumlichen Zusammenhang der Daten ausgerichtet. Die Nebenachse ist orthogonal zur Hauptachse orientiert.

Bei genauerer Betrachtung hat sich jedoch gezeigt, dass die gerichteten Variogramme sich in ihrer Ausprägung und ihren Werten zwar von den omni-direktionalen Variogrammen unterscheiden, dies aber für die vergleichende Bewertung der strukturellen Heterogenität nur eine untergeordnete Rolle spielt. Denn auch die gerichteten Variogramme spiegeln im Wesentlichen, wenn auch mit teilweise anderen Wertebereichen, die verhältnismäßigen Beziehungen, wie sie zwischen den experimentellen Variogrammkurven der omni-direktionalen Variogramme beobachtet werden können, wider. Auch lässt sich deutlich erkennen, dass die omni-direktionalen Variogramme die Charakteristik der gerichteten Variogramme, wenn auch in abgeschwächter Form, wiedergeben. Aus diesem Grund werden für die Betrachtung der strukturellen Heterogenität ausschließlich die omni-direktionalen Variogramme genutzt.

Für eine (relative) Quantifizierung der geometrischen Heterogenität kann das Verhältnis zwischen Korrelationslänge bzw. Reichweite und Sill sowie (Gesamt-) Varianz des Datensatzes herangezogen werden. Für die unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper wurden die in Tabelle 5.1 aufgeführten Werte mit Hilfe der folgenden Beziehung errechnet:

$$\text{Maß für die Heterogenität} = \text{Korrelationslänge} / ((\text{Sill} + \text{Varianz des Datensatzes}) / 2).$$

Sill und Korrelationslänge wurden dabei einheitlich für alle betrachteten Schichtkörper auf Basis eines sphärischen Variogrammmodells (Variogrammfunktion) ermittelt. Abbildung 5.23 stellt beispielhaft die omni-direktionalen, experimentellen Variogramme zweier ausgewählter Schichtkörper zusammen mit der jeweils angepassten sphärischen Variogrammfunktion sowie Sill und Korrelationslänge dar. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind in den Abbildungen 5.25 und 5.26 die entsprechenden Variogrammfunktionen nicht dargestellt. Abbildung 5.24 stellt die ermittelten Werte zu Reichweite und Sill für die betrachteten Schichtkörper graphisch dar. Um in die Heterogenitätsanalyse auch die (Gesamt-) Varianz eines Datensatzes zur Mächtigkeitsverteilung einfließen zu lassen, wird der Nenner in der oben aufgeführten Beziehung durch den Mittelwert aus Sill und (Gesamt-) Varianz gebildet.

Die resultierenden Werte lassen dabei relative Aussagen zur strukturellen Variabilität eines Schichtkörpers zu: Je kleiner der ermittelte Wert, desto geringer ist der räumliche Zusammenhang der Daten und umso größer ist die Heterogenität des Schichtkörpers bezüglich der betrachteten Eigenschaft. Umgekehrt weisen hohe Werte auf eine vergleichsweise geringe strukturelle Variabilität und einen höheren räumlichen Zusammenhang der Daten hin (Tab. 5.1).

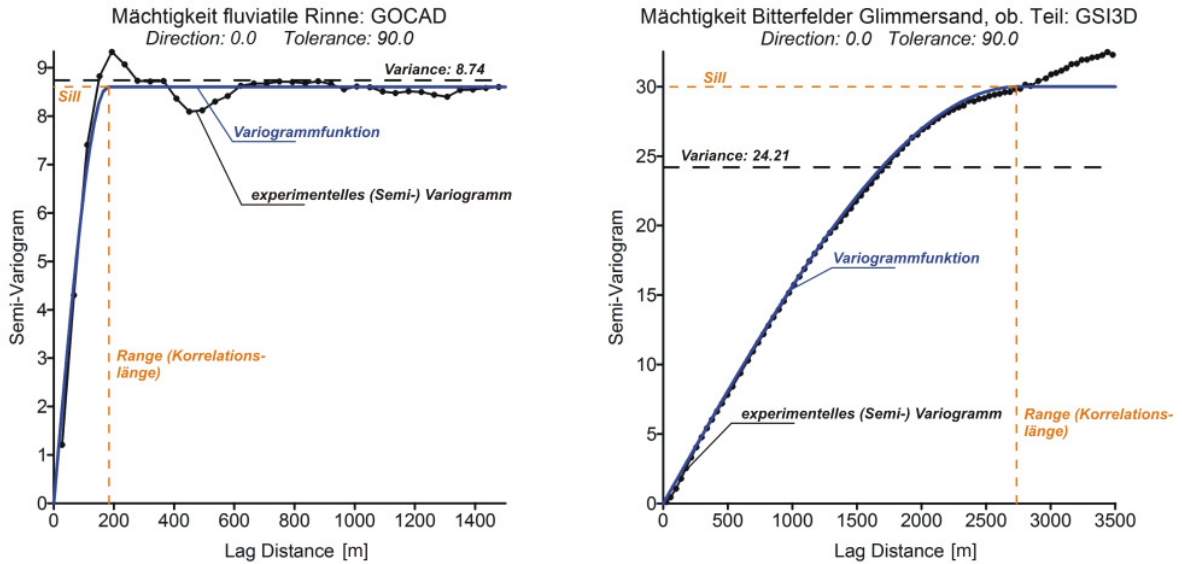


Abb. 5.23: Beispielhafte Darstellung zweier omni-direktionaler Variogramme mit experimentellem (Semi-) Variogramm, angepasster sphärischer Variogrammfunktion mit zugehörigem Sill und entsprechender Korrelationslänge sowie der Varianz des Gesamtdatensatzes.

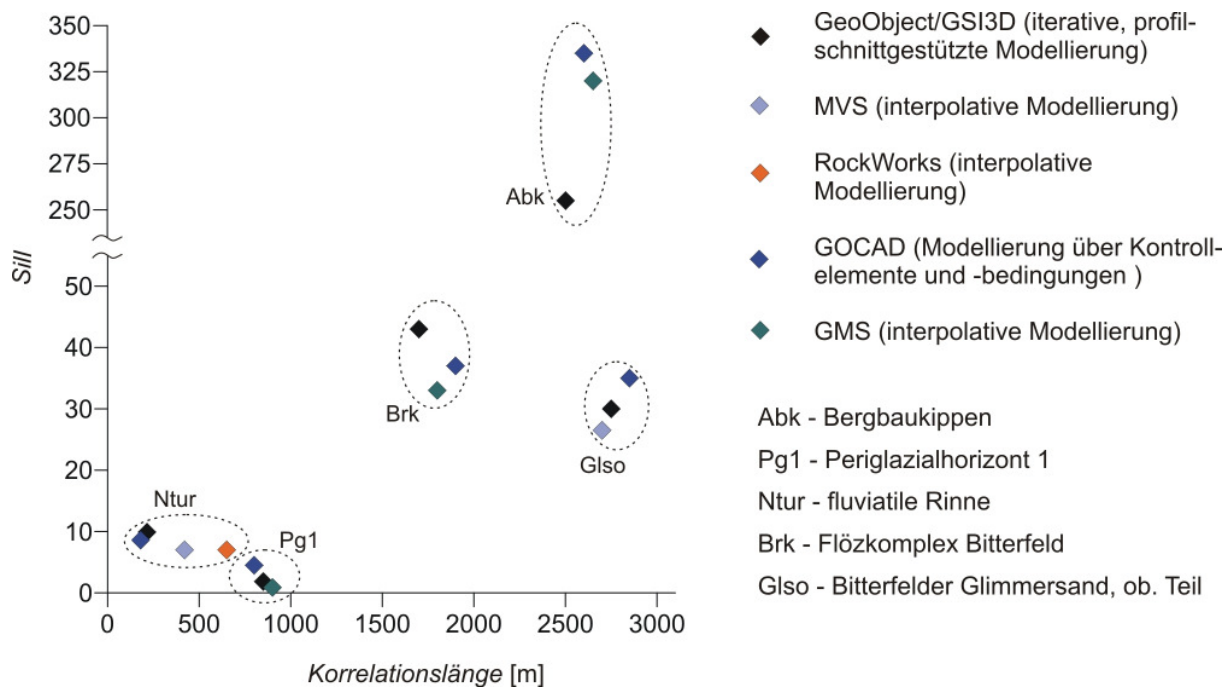


Abb. 5.24: Darstellung der aus der Varianzanalyse ermittelten Werte für Korrelationslänge und Sill bezogen auf die Mächtigkeitsverteilung der betrachteten Schichtkörper.

Tab. 5.1: Quantifizierung der relativen strukturellen Heterogenität der unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper aus den verschiedenen geologischen 3D-Modellen.

| Schichtkörper geol. Modell | Bergbaukippen | Periglazial- horizont 1 | Fluviatile Rinne | Flözkomplex Bitterfeld | Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil |
|-------------------------------|---------------|----------------------------|------------------|---------------------------|---|
| GeoObject/GSI3D | 10,4 | 524,2 | 33,2 | 48,0 | 101,5 |
| MVS | - | - | 79,1 | - | 118,6 |
| RockWorks | - | - | 100,0 | - | - |
| GOCAD | 8,3 | 219,8 | 31,9 | 56,5 | 89,5 |
| GMS | 8,9 | 1164,6 | - | 58,5 | - |

Bergbaukippen

Im Fall der Bergbaukippen zeigen die Schichtkörper aus den unter GOCAD und GMS erstellten Modellen eine geringfügig höhere strukturelle Variabilität als der unter GeoObject/GSI3D generierte Kippenkörper. Als wesentliche Ursache hierfür ist die Methodik zu nennen, mit welcher unter GOCAD und GMS (sowie MVS und RockWorks) die Flankenwinkel der Bergbaukippen modelltechnisch erfasst worden sind (vgl. Kap. 5.3 und 5.4). Die dadurch generell etwas steiler ausgeprägten Böschungswinkel resultieren in einem vergleichsweise schnelleren Anstieg der Schichtmächtigkeit entlang der Kippenflanken, was wiederum Auswirkungen auf die strukturelle Variabilität der betreffenden Schichtkörper hat. In Verbindung mit den verhältnismäßig hohen Mächtigkeitsunterschieden, durch welche die Kippenkörper aller Modelle geprägt sind, fallen Effekte, die durch verschiedene Interpolationsverfahren hervorgerufen werden (z. B. unterschiedliche Rauigkeit von Schichtflächen), bei der Analyse der Heterogenitäten kaum ins Gewicht.

Periglazialhorizont 1

Bei der Betrachtung des Periglazialhorizontes zeigen sowohl die Variogramme als auch die errechneten „Heterogenitäts-Werte“ im Vergleich zu den anderen Schichtgliedern eine relativ geringe strukturelle Variabilität an. Dennoch sind die Unterschiede zwischen den einzelnen Schichtkörpern aus den verschiedenen Modellen auffällig hoch. Dabei besitzt das Schichtglied aus dem GOCAD-Modell mit dem niedrigsten Wert die höchste strukturelle Variabilität – ein Resultat der auf engem Raum stattfindenden, ausgeprägten Mächtigkeitsunterschiede sowie der höheren maximalen Mächtigkeit im zentralen Bereich der Schichtverbreitung (vgl. Kap. 5.3). Dagegen ist der Schichtkörper aus dem GMS-Modell im Vergleich zum Referenzmodell durch eine deutlich geringere strukturelle Heterogenität charakterisiert. Wie der Mächtigkeitsdarstellung unter Kapitel 5.4 (Abb. 5.17) zu entnehmen ist, finden Veränderungen in der Schichtmächtigkeit gleichmäßig und über einen größeren räumlichen Bereich statt.

Fluviatile Rinne

Erwartungsgemäß sind die Rinnenstrukturen aus dem Referenzmodell und dem unter GOCAD entwickelten Modell durch eine sehr ähnliche strukturelle Variabilität geprägt. Beide Schichtkörper gleichen sich in ihrer Ausdehnung und Mächtigkeitsverteilung stark, so dass

sich ebenfalls in Bezug auf die Heterogenität kaum Unterschiede ergeben. Im Gegensatz dazu besitzen die äquivalenten Schichtglieder aus den Modellen, die unter MVS und RockWorks erstellt wurden, eine geringere strukturelle Variabilität. Sie sind über deutlich weitere Bereiche des Modellgebietes verbreitet. Zudem nehmen Veränderungen in der Schichtmächtigkeit weitaus größere räumliche Bereiche in Anspruch, was in deutlich flacheren Gradienten des Mächtigkeitsanstiegs bzw. -abfalls resultiert. Besonders die unter Kapitel 5.4 beschriebenen, solitären und geringmächtigen, aber weit verbreiteten Schichtelemente, die im Zuge der Trendverfolgung während der Interpolation entstehen können, führen bei den unter RockWorks und GMS erstellten Schichtkörpern zu einer zusätzlichen Verringerung der strukturellen Heterogenität.

Flözkomplex Bitterfeld

Die feinteilige Zergliederung sowie die starken Mächtigkeitsschwankungen, wie sie für diese Modellschicht unter dem konstruktiven, profilschnittgestützten Ansatz abgebildet werden konnten (vgl. Kap. 5.2), resultieren in einer vergleichsweise hohen räumlichen Variabilität des Schichtkörpers aus dem GeoObject/GSI3D-Modell. Die „Heterogenitäts-Werte“ für die äquivalenten Schichtkörper aus den Modellen, die unter GOCAD und GMS erstellt wurden, zeigen dagegen eine etwas geringere strukturelle Variabilität an. Zum einen konnten die detaillierten, strukturellen Besonderheiten dieses Schichtgliedes, wie beispielsweise Straßenpfeiler, Auskohlungs- und Erosionsstrukturen, mit den verfügbaren Methoden nur bis zu einem gewissen Maß zufrieden stellend abgebildet werden. Zum anderen resultieren die implementierten und eingesetzten Interpolationsverfahren in gleichmäßigeren, homogeneren Schichtflächen, was sich ebenfalls in der Mächtigkeitsverteilung und damit auch in der strukturellen Variabilität widerspiegelt.

Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil

Obwohl die Mächtigkeitsdarstellung des Oberen Bitterfelder Glimmersandes aus dem GOCAD-Modell einen vergleichsweise ruhigeren Verlauf ihrer Isolinien zeigt (vgl. Kap. 5.3), ist die strukturelle Heterogenität etwas höher als beim äquivalenten Schichtglied aus dem Referenzmodell. Eine wesentliche Ursache hierfür ist die im Vergleich zum Referenzmodell erreichte, höhere maximale Schichtmächtigkeit. Weiterhin ist auch der Mächtigkeitsprung entlang der das Modellgebiet von SW nach NE querenden Diagonalen räumlich enger begrenzt als im Referenzmodell. Dagegen zeigt sich der Schichtkörper aus dem MVS-Modell strukturell weniger variabel. Neben der nahezu vollständig fehlenden Erosionsbasis der fluviatilen Rinne wirken auch die gegenüber dem Referenzmodell eher gemäßigten Übergänge zwischen Mächtigkeitsunterschieden sowie die etwas geringere, maximal erreichte Schichtmächtigkeit mindernd auf die strukturelle Variabilität des Schichtkörpers.

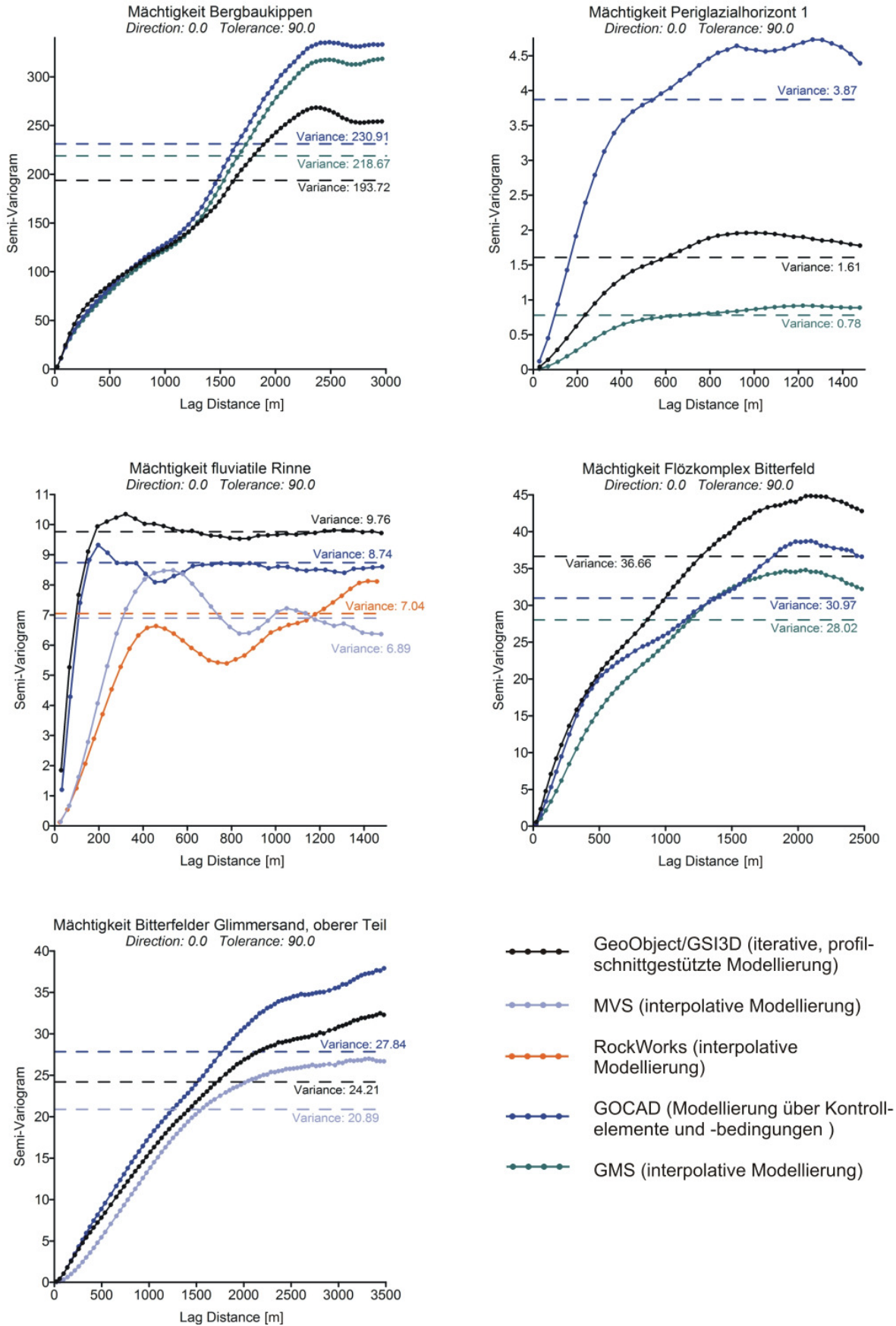


Abb. 5.25: Vergleichende Darstellung der omni-direktionalen Variogramme der unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper aus den verschiedenen geologischen 3D-Modellen.

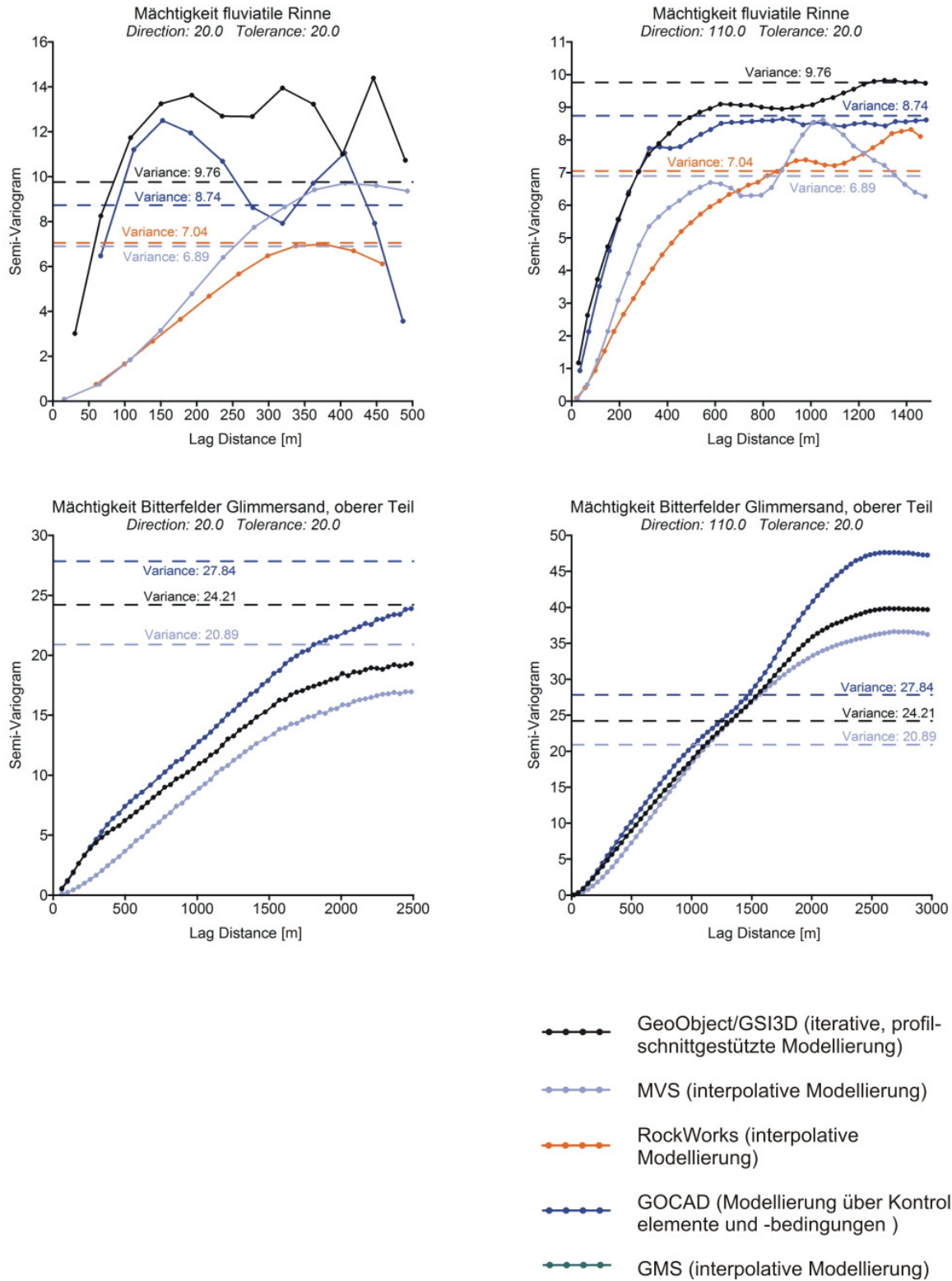


Abb. 5.26: Vergleichende Darstellung der gerichteten Variogramme der unter den Kapiteln 5.2 bis 5.4 betrachteten Schichtkörper der fluvialen Rinne und des Oberen Bitterfelder Glimmersandes.

6. Hydrogeologische Modellierung

Mit Hilfe einer stationären hydrogeologischen Modellierung sollen die Auswirkungen der verschiedenen methodischen Ansätze zur geologischen 3D-Modellierung auf die Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung analysiert und herausgestellt werden.

Die hydrogeologische Modellierung erfolgte unter dem in GMS 6.0 implementierten Werkzeug MODFLOW 2000. Hierbei handelt es sich um ein modulares, dreidimensionales Finite-Differenzen-Grundwassermodell des USGS zur Beschreibung und Vorhersage von Grundwassersystemen. Für die Umsetzung der stationären Strömungssimulation wurde das so genannte *LPF-Package (Layer Property Flow Package)* in Verbindung mit dem Gleichungslöser *PCG2 (Preconditioned Conjugate Gradient)* gewählt.

Das *LPF-Package* erfordert die explizite Vorgabe aller Schichtgrenzen. Neben der (Schicht-) Geometrie werden im *LPF-Package* weiter horizontale und vertikale Durchlässigkeiten sowie bei instationären Verhältnissen spezifischer Speicherkoeffizient (S_s - *Specific Storage*) und Speicherkoeffizient (S_y - *Specific Yield*; \approx nutzbare Porosität bei ungespannten Verhältnissen) als Eingangsgrößen benötigt. Die Definition der vertikalen Durchlässigkeiten kann auch über die Vergabe von Anisotropie-Faktoren erfolgen. In diesem Fall ist die vertikale Durchlässigkeit direkt an die horizontale hydraulische Leitfähigkeit gekoppelt.

Der Gleichungslöser *PCG2* hat sich als relativ schnell und robust erwiesen. Das Gleichungssystem wird iterativ als Minimum-Problem gelöst, wobei das Konvergenzverhalten mit Hilfe einer Präkonditionierungs-Matrix optimiert und beschleunigt wird.

6.1 Eingangsdaten

Wie GOSSEL (2008) beschreibt, benötigt die Berechnung eines stationären Strömungsfeldes als Eingangsdaten Strukturen und Parameter, die idealerweise aus dem geologischen Modell abgeleitet werden können. Weiter definiert er die Wahl der Randbedingungen als diejenige Größe, welche für die horizontale Dimensionierung eines numerischen Grundwasserströmungsmodells einen entscheidenden Einfluss hat.

Da es sich bei sämtlichen, im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit durchgeführten numerischen Strömungsmodellierungen ebenfalls um stationäre Modelle handelt, umfasst die Datenbasis ebenso Strukturen, Parameter und Randbedingungen. Es muss jedoch unbedingt herausgestellt werden, dass die hydrogeologischen Modelle ausschließlich unter dem Gesichtspunkt erstellt wurden, die Auswirkungen der verschiedenen geologischen 3D-Modelle und damit der genutzten Modellierungsmethoden auf das Strömungsfeld der gesättigten Zone aufzuzeigen. Aus Gründen der Vergleichbarkeit und Konformität wurden sowohl Parametrisierung als auch Randbedingungen einfach gehalten und erheben keinen Anspruch auf Entsprechung zur Realität.

Im Gegensatz zu den geologischen 3D-Modellen basieren die hydrogeologischen Modelle nicht auf einer einheitlichen Datengrundlage. Denn die unterschiedlichen geologischen Mo-

delle stellen mit ihren dreidimensionalen Schichtkörpergeometrien eine der wichtigsten Eingangsgrößen für die hydrogeologische Modellierung dar. Die Vergleichbarkeit wurde jedoch dahingehend sichergestellt, dass die Schichtkörpergeometrien der geologischen Modelle nach einem einheitlichen Verfahren in hydrogeologische Modelle überführt und für diese identische Anfangs- und Randbedingungen definiert wurden. Auch die Durchführung der Parametrisierung, der gewählte Algorithmus (*PCG2*) mit dem entsprechenden Abbruchkriterium ($0,01 \text{ m} - \text{Head Change Criterion}$) und die Wahl der Startpunkte für die Berechnung von Bahnlinien (vgl. Kap. 7.2) waren in allen hydrogeologischen Modellen identisch.

6.1.1 Strukturen

Grundlage für die numerische Grundwassermodellierung waren jeweils die 3D-Strukturen der geologischen Modelle, wie sie unter GeoObject/GSI3D, MVS, RockWorks, GOCAD und GMS erstellt wurden. Um sicherzustellen, dass auch die Effekte kleinräumiger Strukturen im Strömungsmodell erfasst werden, wurde auf eine sonst übliche Zusammenfassung bzw. Generalisierung, bei der Schichten mit gleichen oder ähnlichen hydrogeologischen Eigenschaften zu einer hydrogeologischen Modellschicht vereinigt werden, verzichtet. Das heißt, die vertikale Auflösung der hydrogeologischen Modelle entspricht der Anzahl der Schichtkörper in den geologischen Modellen.

In Vorbereitung auf die numerische Grundwassermodellierung wurden die Schichtkörpergeometrien in ein parallel zur Hauptströmungsrichtung orientiertes, dreidimensionales Finite-Differenzen-Gitter übertragen. Die horizontale Auflösung dieses Gitters entspricht mit $20 \times 20 \text{ m}$ jener der geologischen Strukturmodelle. Die vertikale Diskretisierung aller Modelle beträgt analog der Anzahl der enthaltenen Schichtglieder 24 Zellen (1 Zelle pro Schicht), die in ihrer Mächtigkeit entsprechend der Mächtigkeitsverteilung der Schichtglieder variieren.

Da jedoch an eine numerische Grundwassermodellierung einige Bedingungen geknüpft sind, waren die ursprünglichen (Schichtkörper-) Geometrien der geologischen 3D-Modelle entsprechend anzupassen, ohne dabei die Charakteristik der Strukturen wesentlich zu verändern. So gilt beispielsweise die Bedingung, dass alle hydrogeologischen Einheiten über das gesamte Modellgebiet hinweg verbreitet sein müssen. Weiterhin müssen, im Gegensatz zu den geologischen 3D-Modellen, aus Gründen der numerischen Stabilität alle Schichtkörper überall mit einer definierten Mindestmächtigkeit vertreten sein. Die Vorbereitungen und Anpassungen der geologischen Strukturen an die Anforderungen der numerischen Grundwassermodellierung werden in Kapitel 6.2.1 näher beschrieben.

Da MODFLOW auf die Modellierung der Strömung in der gesättigten Zone ausgerichtet ist, wurden die Finite-Differenzen-Gitter in ihrer vertikalen Ausdehnung auf den Bereich der gesättigten Zone begrenzt. Für die Berechnung wurden diesbezüglich alle hydrogeologischen Einheiten als gespannt (*confined*) bzw. vollständig gesättigt behandelt. Als Referenz für den oberen Abschluss der hydrogeologischen Modelle wurde die Grundwasseroberfläche (Stand: Mitte 2002) aus dem hydrogeologischen Regionalmodell „Untere Mulde/Fuhne“ (GOSEL, 2008) genutzt. Sie konnte auf das Modellgebiet Bitterfeld-Süd übertragen werden.

6.1.2 Parameter

Im Sinne der numerischen Grundwasserströmungsmodellierung werden unter Parametern hydrologische, hydrogeologische und hydraulisch wirksame Eigenschaften verstanden, auf deren Basis das Modellierungssystem und im engeren Sinne das Modellierwerkzeug in Verbindung mit Strukturen und Randbedingungen Strömungszustände, Bilanzen und Druckpotentiale errechnet.

Wie bereits erwähnt, wurde die Parametrisierung der hydrogeologischen Modelle sehr einfach gehalten und erhebt deshalb keinen Anspruch auf Vollständigkeit und Übereinstimmung mit der Realität. Für die Belegung der Zellen mit hydrogeologischen Eigenschaften wurden die Parameter horizontale und vertikale gesättigte hydraulische Leitfähigkeit (k_{f-h} und k_{f-v} [m/s oder m/d]) und nutzbarer bzw. entwässerbarer Porenraum (n_e [-]) herangezogen. Da sämtliche Modelle stationär gerechnet wurden, konnte auf die Zuweisung von Speichergrößen (S_y , S_s) verzichtet werden. Sie werden zusätzlich bei instationären Modellrechnungen benötigt (vgl. HARBAUGH et al., 2000; REILLY & HARBAUGH, 2004; KINZELBACH & RAUSCH, 1995).

Angesichts der verfügbaren Datengrundlage mussten die k_f -Werte teilweise aus der Lithologiebeschreibung der Schichtenverzeichnisse der zur geologischen 3D-Modellierung verwendeten Bohrungen abgeleitet werden. Für einzelne stratigraphische Einheiten konnten jedoch hydraulische Leitfähigkeiten aus der Literatur recherchiert werden (vgl. Kap. 2.3). Bei den ermittelten bzw. abgeschätzten k_f -Werten handelt es sich um horizontale hydraulische Leitfähigkeiten. Für die vertikal wirksamen k_f -Werte wurde ein jeweils um den Faktor 10 kleinerer Wert angenommen. Anhang 4 gibt einen Überblick zu den bei der hydrogeologischen Modellierung verwendeten k_f -Werten. Weiter sind die aus der Literatur recherchierten hydraulischen Durchlässigkeiten zusammen mit den entsprechenden Quellen angegeben.

Bezüglich des nutzbaren Porenraumes konnte die Festlegung der Parametergrößen für ausgewählte stratigraphische Einheiten gestützt auf Laborergebnissen (freundliche Bereitstellung durch DR. RUSKE) erfolgen. Dabei standen für die verschiedenen Einheiten zum Teil mehrere Laborwerte zur Verfügung, so dass in diesen Fällen auf den entsprechenden Mittelwert zurückgegriffen wurde. Für die übrigen Schichtglieder wurden die nutzbaren Porenvolumina unter Berücksichtigung von Lithologiebeschreibungen, Literatur und Erfahrungswerten abgeschätzt. Einen Überblick gibt Anhang 5. Auf eine näherungsweise Bestimmung der effektiven Porositäten aus k_f -Werten, wie sie MAROTZ (1968) oder HELMBOLD (1988) beschreiben, wurde verzichtet. Die von ihnen dargestellten funktionalen Zusammenhänge liefern nur für eine sehr begrenzte Spannweite von k_f -Werten plausible Ergebnisse bzw. gelten explizit für definierte stratigraphische Einheiten eines räumlich benannten Sedimentationsraumes.

Da im Hinblick auf das definierte Ziel der Arbeit die hydrogeologischen Modelle möglichst einfach gehalten werden sollten, wurden innerhalb der einzelnen stratigraphischen bzw. hydrogeologischen Einheiten einheitliche Parameter definiert und damit jeweils isotrope Bedingungen angenommen. Obwohl dies mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht der realen Situation entspricht, wird hierdurch sichergestellt, dass das berechnete Strömungsfeld ausschließlich

von den geologischen Strukturen und nicht zusätzlich durch interpolierte Parameterverteilungen beeinflusst wird.

Die Zuweisung der Parameter erfolgte über Zell-Indizes (*Material-ID's*). Das heißt, zunächst wird jeder Zelle des hydrogeologischen Modells eine ID zugeordnet. Im Fall der vorliegenden Arbeit erfolgte die Vergabe der ID's entsprechend der stratigraphischen Situation im geologischen Modell. Dabei bekommen alle Zellen, die einer stratigraphischen Einheit zugerechnet werden, eine identische ID. Die definierten Zell-Indizes werden dann für die Parametrisierung genutzt, indem gleichen ID's gleiche hydrogeologische Eigenschaften zugeordnet werden. Der Vorteil dieses Verfahrens ist, dass sämtliche Parameter nur einmalig für jede ID zu definieren sind. Denn alle Zellen, welche die gleiche ID besitzen, bekommen identische hydraulische Eigenschaften zugewiesen. Weiter können bereits definierte Parameter für einen erneuten Modelllauf, beispielsweise zum Zweck einer Kalibrierung, mit dieser Methode sehr schnell und einfach verändert, angepasst oder sogar um weitere Größen ergänzt werden.

Die für die hydrogeologische Modellierung eingesetzten 3D-Gitter sind aufgrund der bereits erwähnten Bedingungen (vollständig verbreitete Schichten und Mindestmächtigkeiten) durch strukturelle und geometrische Besonderheiten charakterisiert. Diese erfordern bei der Vergabe von Zell-Indizes eine besondere Vorgehensweise und die Berücksichtigung hierarchischer Kriterien. Die verwendete Methodik ist unter Kapitel 6.2.2 ausführlich beschrieben.

6.1.3 Rand- und Anfangsbedingungen

Die Rand- und Anfangsbedingungen stellen neben den Strukturen und Parametern die dritte entscheidende Eingangsgröße für die Konzeptionierung eines hydrogeologischen Modells dar. Wie GOSSEL (2008) herausstellt, sollte die horizontale Ausdehnung eines Grundwasserströmungsmodells an die aus einem hydrogeologischen Konzeptmodell abgeleiteten Randbedingungen angepasst sein.

Diese Vorgehensweise war jedoch im vorliegenden Fall nicht möglich. Zum einen wurden das initiale geologische 3D-Modell und in der Folge auch die Vergleichsmodelle ohne Berücksichtigung hydrogeologischer Grenzen bzw. Randbedingungen erstellt, zum anderen sind die Strukturmodelle mit einer Ausdehnung von etwa 4 x 4 km relativ klein, so dass die regionalen hydraulischen Verhältnisse über Randbedingungen kaum realitätsnah erfassbar wären.

Aus diesem Grund wurde die horizontale Dimensionierung der hydrogeologischen Strukturmodelle an der Ausdehnung der geologischen Modelle orientiert (vgl. Abb. 6.1). Als Randbedingungen wurden im W und E des Modellgebietes sowie für den bis dato gefluteten Bereich des Tagebaurestlochs Goitzsche Festpotentiale definiert (Dirichlet-Randbedingung bzw. Randbedingung 1. Art), die aus der bereits erwähnten Grundwasseroberfläche (Stand: Mitte 2002) abgeleitet wurden. Da sowohl der nördliche als auch der südliche Rand der Modelle nahezu parallel zur Hauptströmungsrichtung orientiert sind, konnten diese Grenzen als geschlossen bzw. als so genannte *No-Flow Boundaries* definiert werden (Sonderfall der Neumann-Randbedingung mit $Q=0$ bzw. Randbedingung 2. Art).

Sämtlichen aktiven Zellen der hydrogeologischen Modelle wurde als Anfangsbedingung ein initiales Druckpotential zugewiesen, welches ebenfalls auf der genannten Grundwasseroberfläche basiert. Wie unter anderem in REILLY & HARBAUGH (2004) beschrieben, beeinflussen bei stationären Modellen die initial definierten Druckhöhen zwar die Effizienz der Matrix-Lösung, jedoch ist das resultierende Ergebnis nicht von deren Wert abhängig.

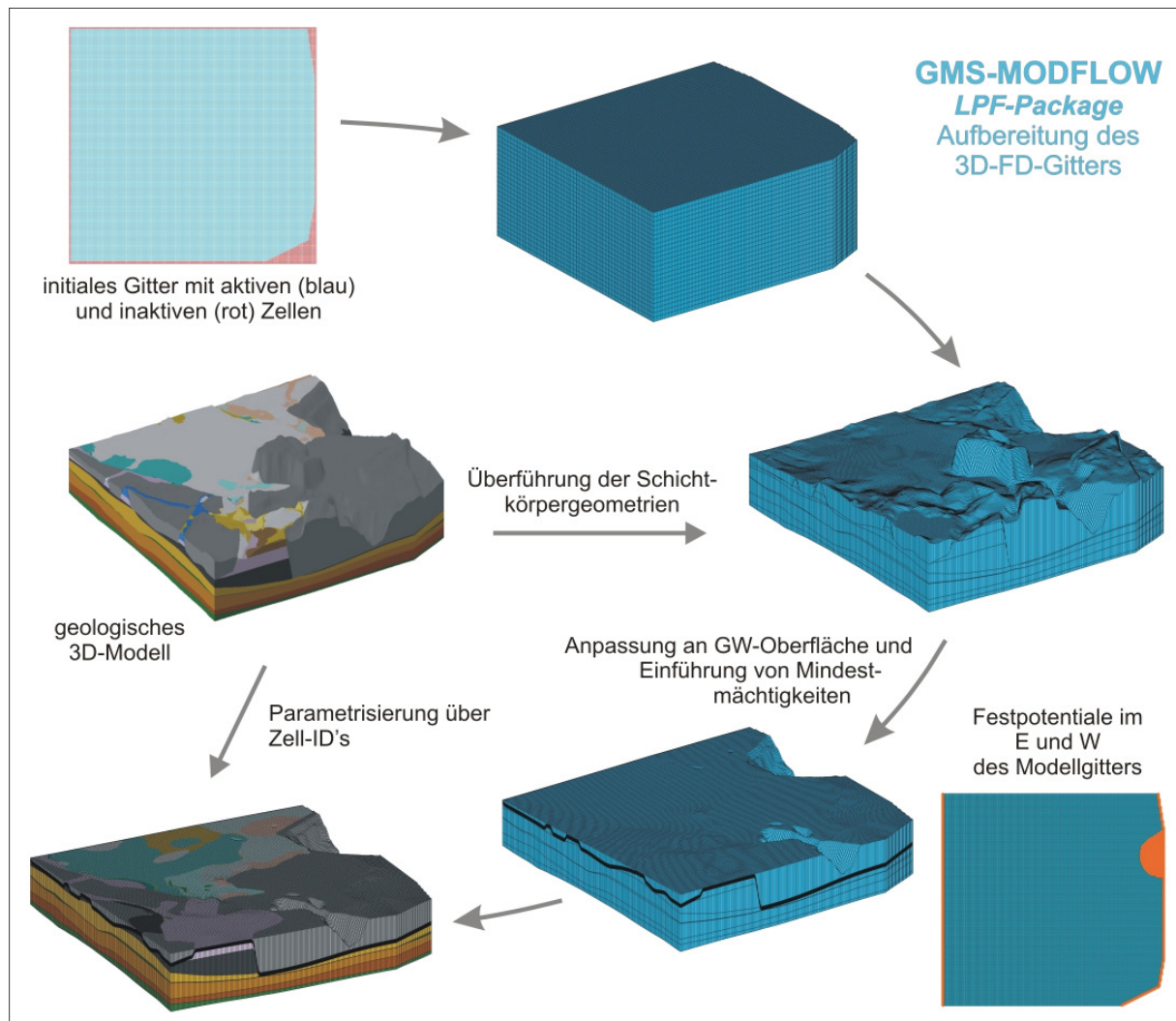


Abb. 6.1: Schematische Darstellung zur Erstellung, Anpassung und Parametrisierung des 3D-Gitters für die hydrogeologische Modellierung. Sowohl die Dimensionierung des Gitters als auch die Geometrie der hydrogeologischen Einheiten und ihre Parametrisierung basieren auf den Strukturen der geologischen 3D-Modelle.

6.2 Modelltechnische Umsetzung – Strukturen und Parameter

6.2.1 Überführung der Schichtkörpergeometrien

Die Schichtkörpergeometrien der geologischen 3D-Modelle wurden jeweils in mehreren Stufen unter GMS in ein 3D-Gitter (MODFLOW-Grid; *cell centered*) für die numerische Strömungsmodellierung überführt. Ziel hierbei war eine möglichst verlustfreie Übertragung der Informationen aus den geologischen Modellen in das hydrogeologische Modellgitter. Um dies zu gewährleisten, wurde zunächst ein 3D-Gitter definiert, welches eine horizontale Diskreti-

sierung von 20 x 20 m besitzt. Die vertikale Auflösung entspricht mit 24 Zellen der Anzahl der modellierten Schichtkörper in den geologischen Modellen. Da es sich bei dem verwendeten 3D-Gitter zur Strömungsmodellierung um ein regelmäßiges Rechteck-Gitter handelt, wurde allen Zellen, die sich außerhalb des eigentlichen Modellraumes befinden, der Status „inaktiv“ zugewiesen (vgl. Abb. 6.1). Im weiteren Verlauf wurden die Geometrien der Schichtflächen mittels linearer Interpolation auf das hydrogeologische 3D-Gitter übertragen. Diese Methode gewährleistet einen möglichst exakten Transfer der Geometrien, selbst wenn die Stützpunkte des geologischen und hydrogeologischen Modell-Gitters in der XY-Ebene nicht genau deckungsgleich sind.

Im nächsten Schritt erfolgte die „Beschneidung“ der hydrogeologischen Modell-Gitter mit der Grundwasseroberfläche (vgl. Kap. 6.1.1). Ausgehend vom DGM wurden sukzessive sämtliche Schichtunterkanten an die Geometrie dieser Fläche angepasst. In diesem Arbeitsschritt wurden ebenfalls die für die numerische Stabilität notwendigen Mindestmächtigkeiten von 0,2 m definiert. Bei dem gewählten Verfahren werden alle Schichtgrenzen in jenen Bereichen nach unten korrigiert, in denen die vorgegebene Mindestmächtigkeit unterschritten wird. Alle anderen Bereiche bleiben von der Korrektur unberührt. Die Einführung von Mindestmächtigkeiten kann jedoch zur Folge haben, dass eine Schicht, die zuvor das Kriterium der Mindestmächtigkeit erfüllt hat, durch die Anpassung der überlagernden Schichtenfolge ebenfalls korrigiert werden muss, um im finalen 3D-Gitter die Bedingung der Mindestmächtigkeit zu erfüllen. In Abbildung 6.2 ist das Phänomen schematisch dargestellt.

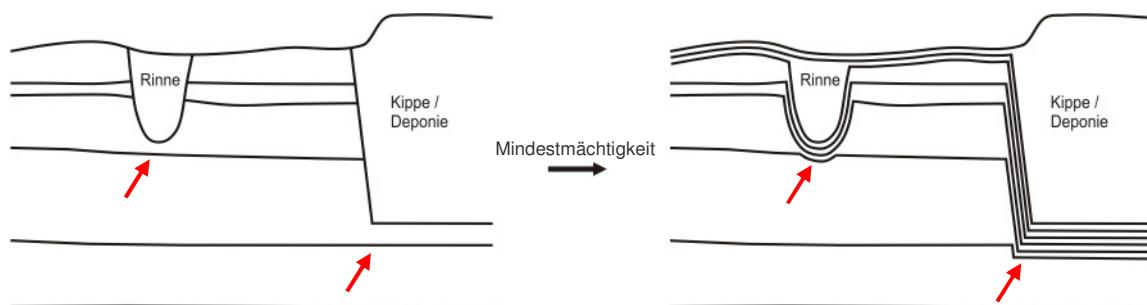


Abb. 6.2: Die Einführung von Mindestmächtigkeiten kann unter Umständen dazu führen, dass ebenfalls Schichtgrenzen angepasst werden müssen, die vor einer entsprechenden Korrektur der überlagernden Schichtenfolge die Bedingung der Mindestmächtigkeit bereits erfüllten (rote Pfeile).

6.2.2 Parametrisierung

Die Einführung von Mindestmächtigkeiten macht die einfache Parameterzuweisung über Zell-Indizes problematisch. Die Anpassung der Schichtflächen zum Zweck der Erfüllung des Kriteriums der Mindestmächtigkeit führte dazu, dass den einzelnen hydrogeologischen Einheiten keine homogenen Parameter zugewiesen werden konnten.

Durch die Vorgabe einer Mindestmächtigkeit wurden zahlreiche Bereiche einzelner Einheiten in Tiefen verlagert, in denen gemäß dem geologischen Modell andere Schichtglieder mit an-

deren hydrogeologischen Eigenschaften verbreitet sind (vgl. Abb. 6.2). Die einfache Vergabe von einheitlichen, schichtbezogenen *Material-ID*'s war deshalb für den Großteil der hydrogeologischen Einheiten nicht durchführbar.

Die hydrogeologischen Schichtkörper mussten entsprechend der ursprünglichen Verbreitung der Einheiten in den geologischen Modellen mit Parametern bzw. Zell-Indizes besetzt werden. Dabei konnten allen Bereichen, in denen eine Fläche nicht korrigiert wurde, die hydrogeologischen Eigenschaften des entsprechenden Schichtkörpers aus dem geologischen 3D-Modell zugewiesen werden. Sämtlichen Bereichen bzw. Zellen, die von der Anpassung an eine Mindestmächtigkeit betroffen waren, wurden die hydraulischen Parameter der an dieser Stelle verbreiteten geologischen Schichtglieder zugewiesen.

Die Zuweisung von *Material-ID*'s erfolgte auf Basis einer Schichtflächenverrechnung, die es selbst bei komplexen geologischen Verhältnissen ermöglicht, einem hydrogeologischen 3D-Gitter Parameter gemäß den Strukturen des geologischen Modells zuzuordnen. Hierbei werden die Z-Werte der originalen Schichtunterkanten mit den Z-Werten des Zellen-Zentrums der angepassten hydrogeologischen Einheiten verglichen: Liegt das Zentrum einer Zelle oberhalb des Z-Wertes einer geologischen Schichtgrenze, dann bekommt sie die ID des entsprechenden Schichtkörpers zugewiesen. Wird dieses Kriterium nicht erfüllt, erfolgt ein Vergleich mit der hierarchisch nächst tiefer eingestuft geologischen Einheit. Da die hydrogeologischen Schichten im Zuge der Anpassung an die Mindestmächtigkeit ausnahmslos nach unten korrigiert wurden, war der sukzessive Abgleich ebenfalls ausschließlich in dieser Richtung durchzuführen. Der Vergleich mit den Z-Werten des Zellen-Zentrums dient in „Grenzfällen“ der Beurteilung, ob sich der größere Anteil der betreffenden Zelle im über- oder unterlagernden Schichtkörper befindet. Eine Zelle bekommt dabei immer die ID jenes Schichtkörpers zugewiesen, in welchem sich ihr Mittelpunkt – und damit ihr größter Anteil – befindet. Abbildung 6.3 verdeutlicht das Prinzip der Parameterzuweisung über Zell-Indizes.

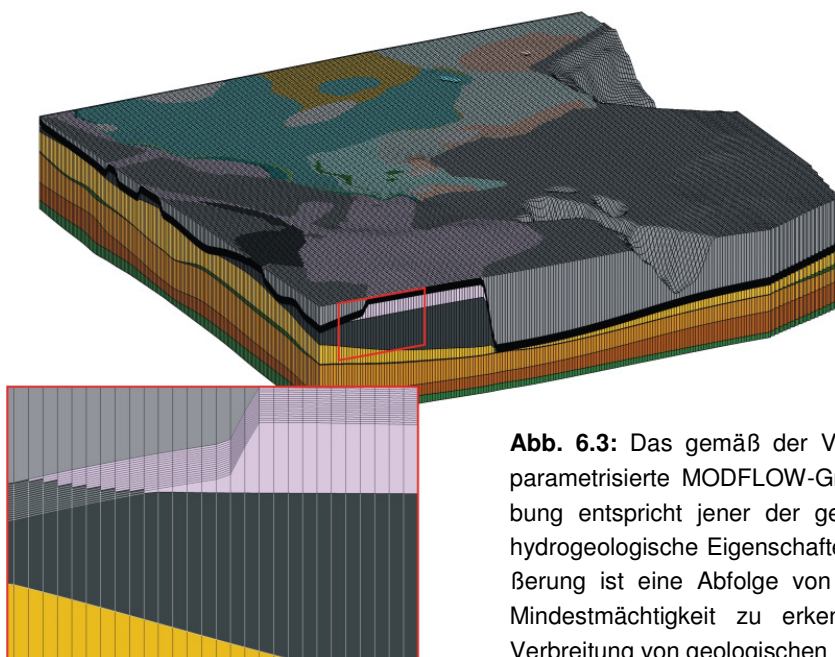


Abb. 6.3: Das gemäß der Verbreitung geologischer Einheiten parametrisierte MODFLOW-Grid, 15fach überhöht. Die Farbgebung entspricht jener der geologischen Schichtkörper, denen hydrogeologische Eigenschaften zugeordnet sind. In der Vergrößerung ist eine Abfolge von hydrogeologischen Einheiten mit Mindestmächtigkeit zu erkennen, welche entsprechend der Verbreitung von geologischen Einheiten parametrisiert ist.

7. Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung dargestellt. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf einer Betrachtung der Beziehungen zu den Strukturen, welche mittels unterschiedlicher modelltechnischer Ansätze in den geologischen 3D-Modellen erfasst wurden. Für den Vergleich wurden wiederum die Ergebnisse, die auf dem von FABRI TIUS (2002) unter einem konstruktiven, profilschnittgestützten Ansatz entwickelten geologischen 3D-Modell beruhen, als Referenz genutzt. Neben hydraulischen Druckhöhen mit ihrer räumlichen Verteilung sowie den errechneten Differenzen zum Referenzmodell werden für die vergleichenden Betrachtungen ebenfalls Bahnlinien (*Pathlines*) herangezogen.

7.1 Hydraulische Druckhöhen

In den Abbildungen 7.1 bis 7.4 ist die Verteilung der Isohypsen in den hydrogeologischen Modellen exemplarisch für jeweils zwei verschiedene horizontale Schnittebenen (70 mNN und 60 mNN) im Vergleich zum Referenzmodell dargestellt. Um die Beziehungen zu den geologischen Strukturen zu verdeutlichen, sind die über ID's parametrisierten Zellen (vgl. Kap. 6) farblich der geologischen Situation angepasst (vgl. Anhang 3).

Die horizontalen Schnittebenen durchqueren in allen Modellen mehrere hydrogeologische Einheiten (*Layer*). Dabei wird der Übergang von einem zum anderen *Layer* jeweils durch eine dünne, schwarze Linie markiert.

Im unteren Teil der Abbildungen sind die Differenzen der Druckhöhen zwischen Referenzmodell und Vergleichsmodell für die jeweilige Schnittebene dargestellt. Die zugehörige Legende ist auf den Wertebereich sämtlicher Differenzpläne normiert.

Alle vergleichenden Darstellungen lassen erkennen, dass sich die größten Unterschiede zum Vergleichsmodell im Wesentlichen auf den westlichen und südwestlichen Bereich des Modellgebietes sowie die nahe Umgebung des Tagebaurestlochs Goitzsche im E beschränken. Die Ursachen hierfür sind hauptsächlich auf Unterschiede in der räumlichen Ausdehnung bzw. Verbreitung von Grundwassergeringleitern zurückzuführen. Dieses Phänomen hängt unter anderem mit der in MODFLOW verwendeten harmonischen Mittelwertbildung zusammen, welche grundsätzlich eine Betonung von geringdurchlässigen Schichten bewirkt.

Im Gegensatz dazu wirken sich Abweichungen in der Gestalt und Verbreitung der unterschiedlichen, insbesondere quartären Grundwasserleiter (einschließlich der fluviatilen Rinne) nur unwesentlich auf das Verteilungsbild der hydraulischen Druckhöhen aus. Die Abfolge der quartären Grundwasserleiter ist überwiegend im nördlichen und zentralen Bereich des Modellgebietes verbreitet. Sie bildet trotz Einschaltungen von lateral begrenzten und geringmächtigen Grundwassergeringleitern im hydrogeologischen Sinn eine mehr oder weniger zusammenhängende Einheit. Hierdurch wirken sich innerhalb dieses Schichtpaketes Geometrieunterschiede zwischen den einzelnen lithostratigraphischen Einheiten kaum in veränderten hydraulischen Druckhöhen aus. Im Bereich der entsprechenden Verbreitung zeigen die Differenzpläne deshalb in allen Modellen die geringsten Abweichungen zum Referenzmodell.

Das generell von W nach E gerichtete Gefälle des hydraulischen Druckpotentials impliziert eine ebenfalls in diese Richtung orientierte Grundwasserströmung. Während die Grundwassergeringleiter, wie der Bitterfelder Decktonkomplex und der Flözkomplex Bitterfeld, durch eng gescharte Isohypsen und damit ein vergleichsweise hohes Gefälle des Druckpotentials gekennzeichnet sind, zeigen die Isohypsen im N des Modellgebietes, im Bereich der quartären Grundwasserleiter, ein geringes Druckgefälle an.

Demzufolge sind die größten Differenzen der hydraulischen Druckhöhen an Geometrieunterschiede zwischen den Grundwassergeringleitern gebunden: Hier können bereits kleinste Variationen hinsichtlich Geometrie und Verbreitung in größeren Unterschieden der (lokalen) Druckpotentiale resultieren. So ist beispielsweise der Bitterfelder Decktonkomplex in allen geologischen Modellen, die auf Basis des interpolativen Ansatzes erstellt wurden (MVS, RockWorks und GMS), im NW des Modellgebietes deutlich weiter verbreitet als im Referenzmodell. Bei einer Subtraktion der errechneten hydraulischen Druckhöhen resultiert dies in einem ausgedehnten Bereich negativer Differenzen (Abb. 7.2 bis 7.4).

Die im Vergleich zum Referenzmodell errechneten Abweichungen treten generell bei einer Verschiebung des Übergangs zwischen hydraulisch gut leitfähigen Schichten (A) und Schichten mit vergleichsweise schlechterer hydraulischer Leitfähigkeit (B) bzw. umgekehrt auf und lassen dabei folgendes Muster erkennen:

- ist der Übergang zwischen B und A im Vergleich zum Referenzmodell in Grundwasserfließrichtung verschoben, liegen die gebildeten Differenzen im negativen Wertebereich,
- ist der Übergang zwischen B und A im Vergleich zum Referenzmodell entgegen der Grundwasserfließrichtung verschoben, liegen die gebildeten Differenzen im positiven Wertebereich,
- ist der Übergang von A zu B im Vergleich zum Referenzmodell in Grundwasserfließrichtung verschoben, liegen die gebildeten Differenzen im negativen Wertebereich,
- ist der Übergang von A zu B im Vergleich zum Referenzmodell entgegen der Grundwasserfließrichtung verschoben, liegen die gebildeten Differenzen im positiven Wertebereich.

Wie den Abbildungen 7.1 bis 7.4 zu entnehmen ist, wirken sich diese Effekte nicht ausschließlich auf jene Bereiche aus, die direkt von deutlichen Unterschieden in der geologischen Situation betroffen sind. So zeigt die Verteilung der Isohypsen auch in tieferen Bereichen (z. B. Schnittebene bei 60 mNN) eine deutliche Beeinflussung durch die überlagernde Schichtenfolge, was ebenfalls in den berechneten Differenzen zum Ausdruck kommt. Dieser Effekt verringert sich jedoch mit zunehmender Tiefe: Mit Erreichen der tiefer lokalisierten, homogenen und flächenhaft verbreiteten tertiären Bitterfelder Glimmer- und Glaukonitsande zeigen die Isohypsen in allen Modellen über das gesamte Modellgebiet hinweg einen ruhigen Verlauf sowie eine gleichmäßige Verteilung.

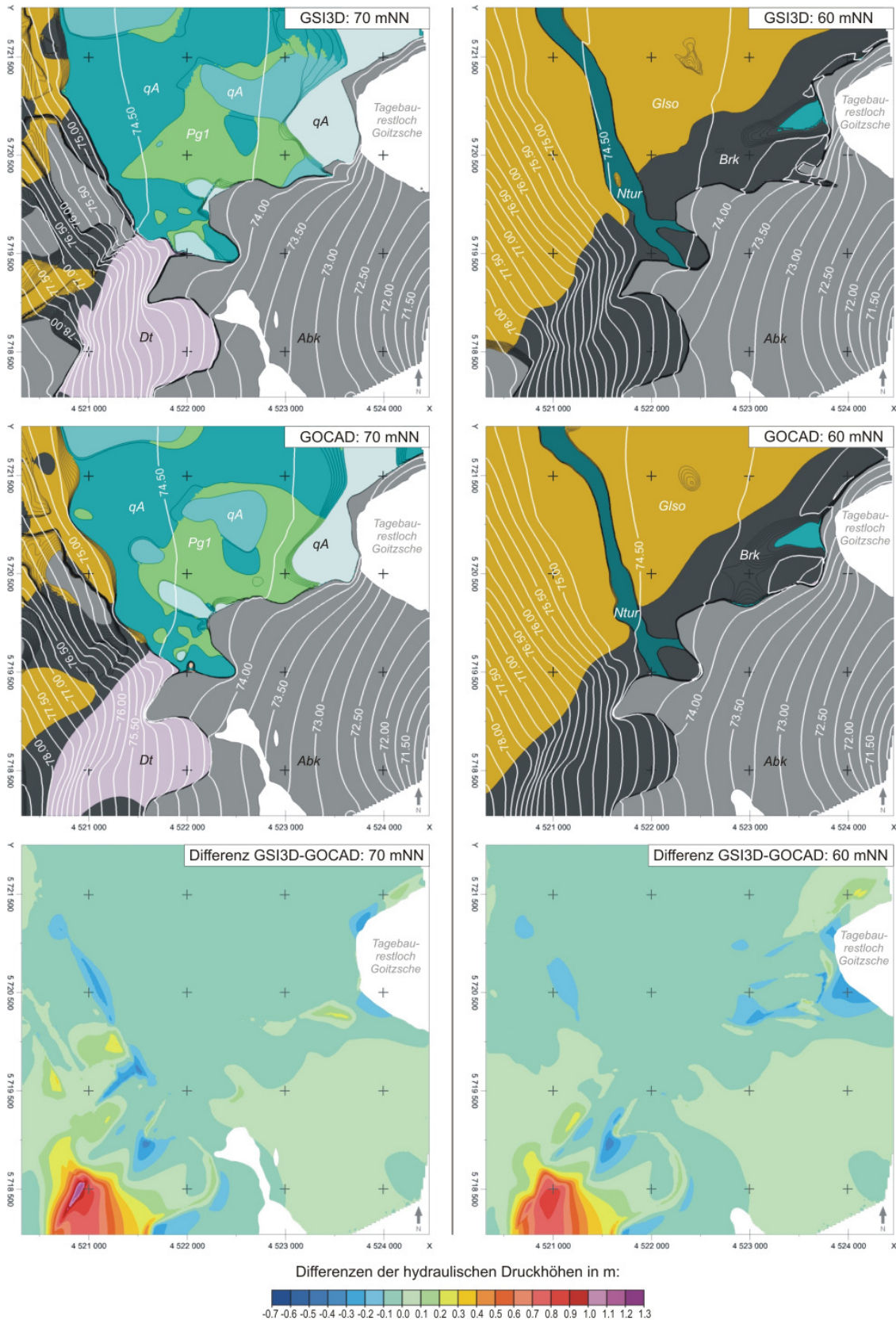


Abb. 7.1: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und GOCAD erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Glso – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil.

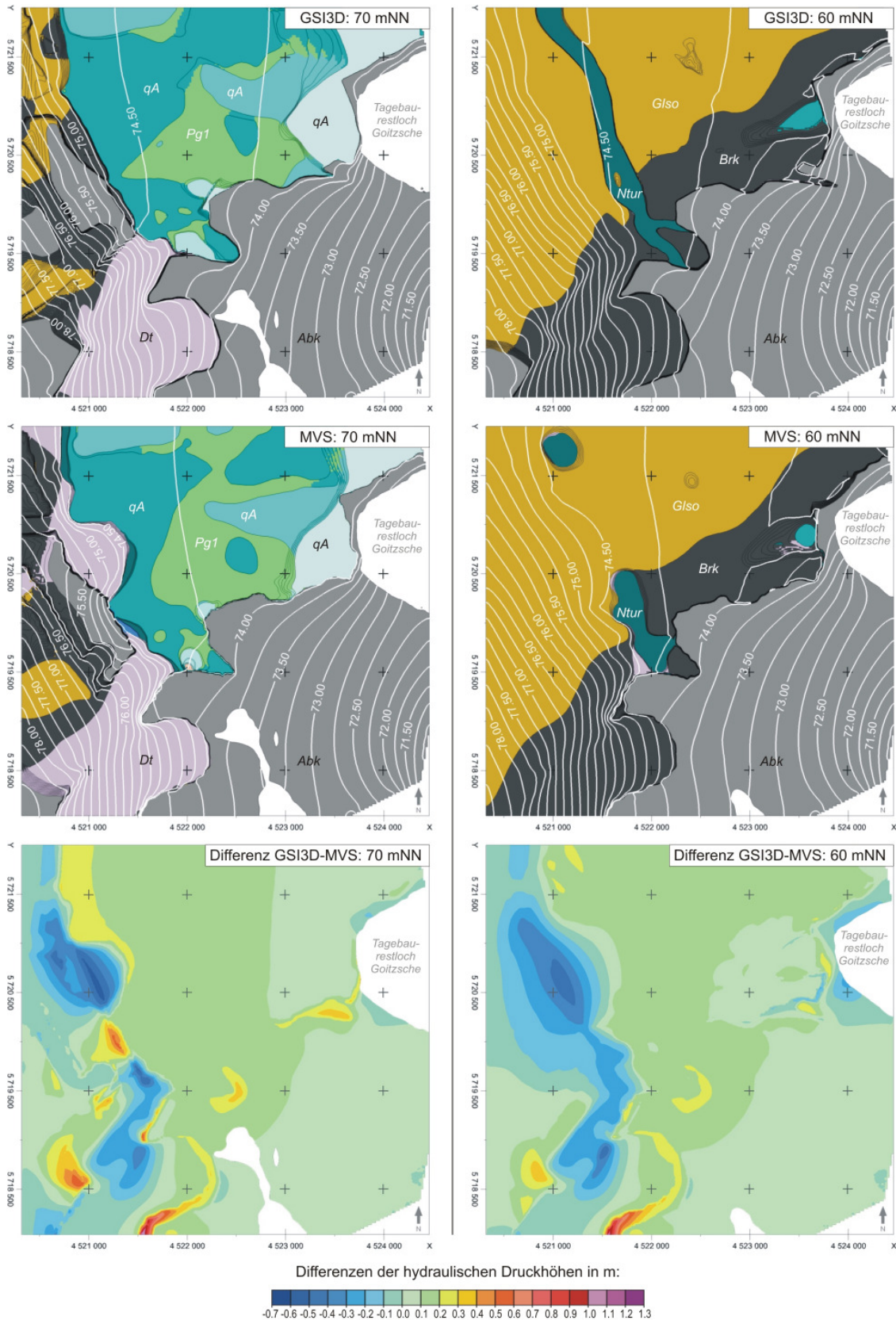


Abb. 7.2: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und MVS erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Gls – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil.

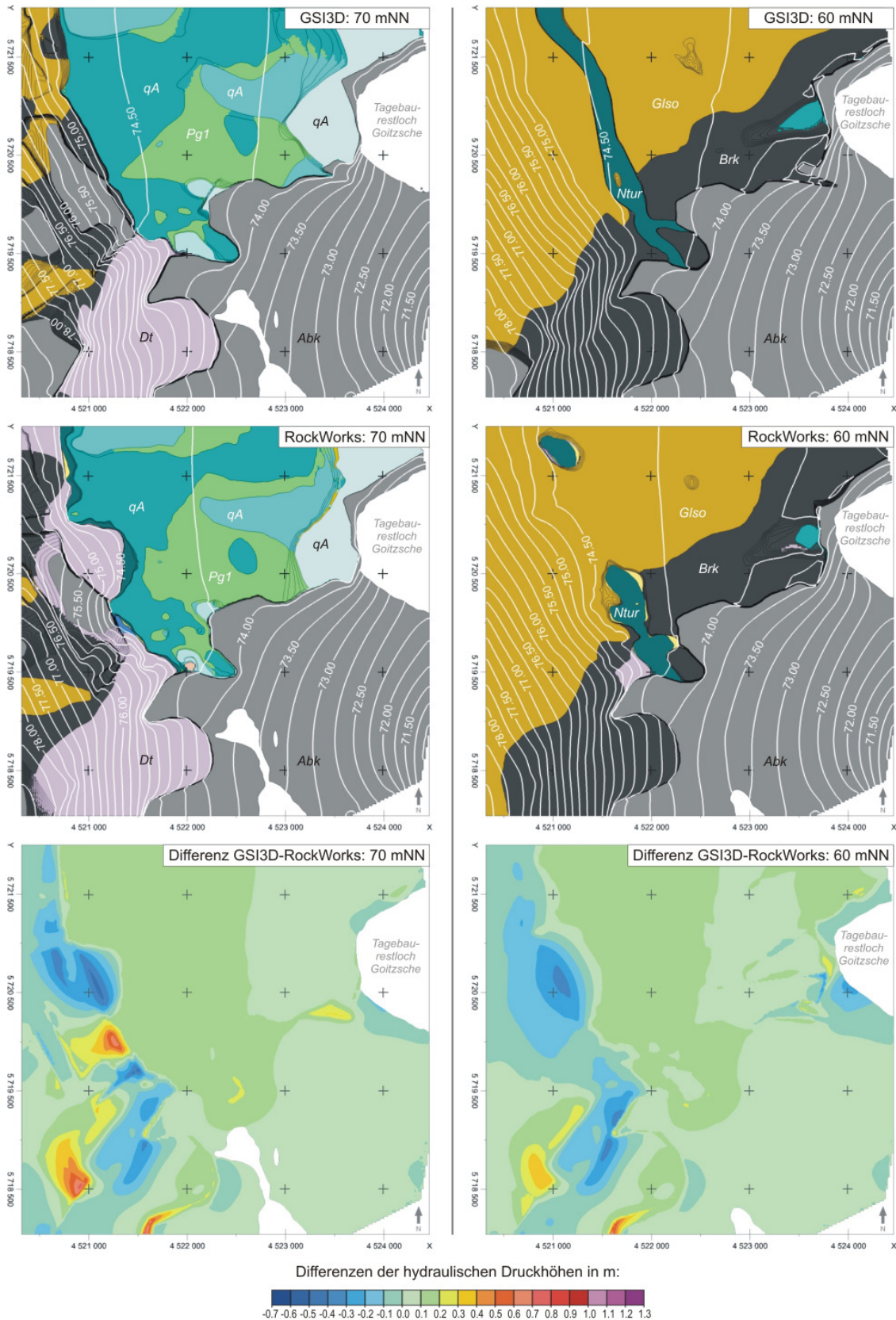


Abb. 7.3: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und RockWorks erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Gls – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil.

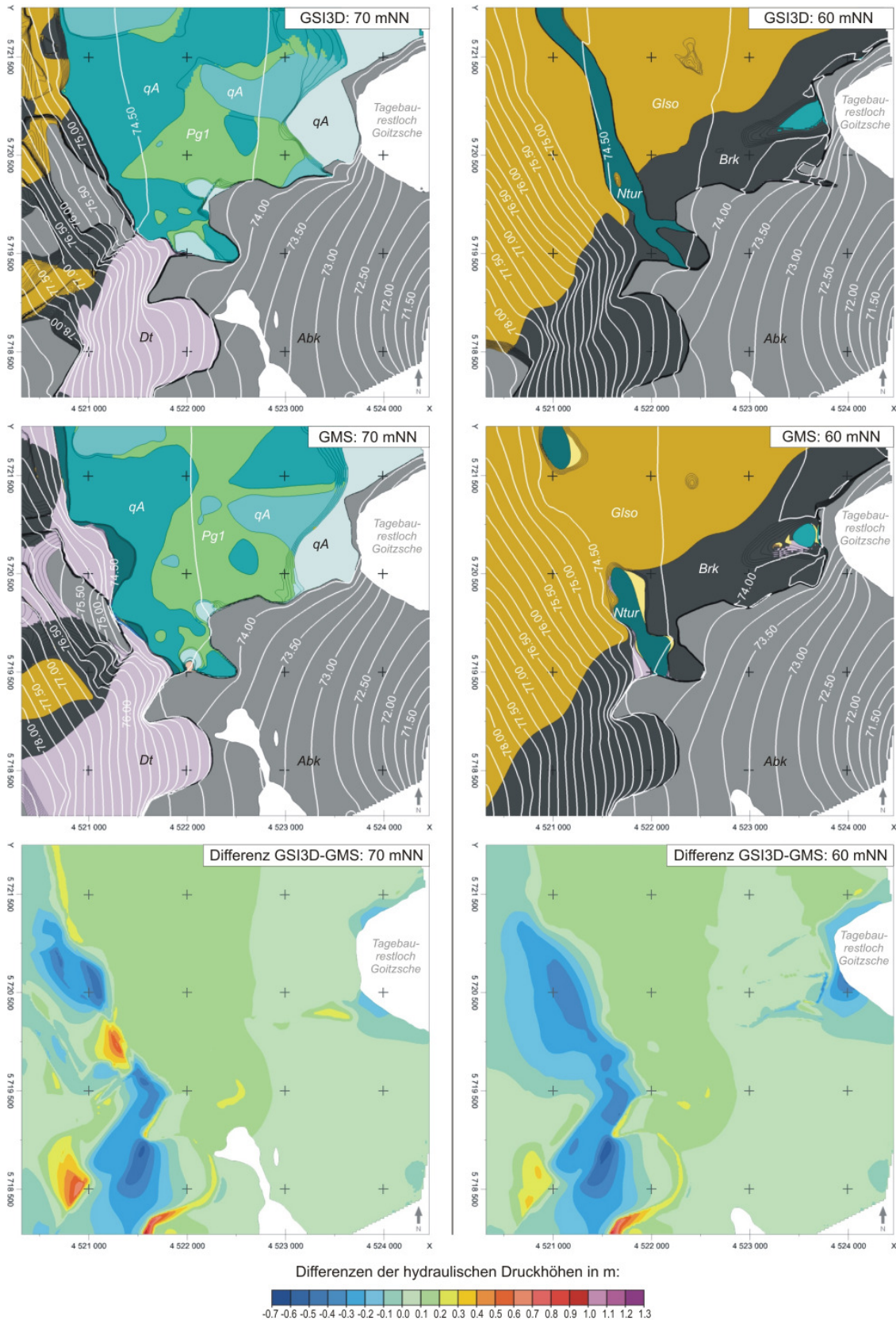


Abb. 7.4: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Grundwassermodellierung, welche auf den unter GeoObject/GSI3D und GMS erstellten geologischen 3D-Modellen basiert. Die Darstellungen zeigen die Unterschiede bezüglich Isohypsen, geologischer Situation und errechneter Differenz der hydraulischen Druckpotentiale zwischen Referenz- und Vergleichsmodell entlang von zwei horizontalen Schnittebenen. Abk – Bergbaukippen; qA – quartärer Aquifer; Pg1 – Periglazialhorizont 1; Ntur – fluviale Rinne; Dt – Bitterfelder Decktonkomplex; Brk – Flözkomplex Bitterfeld; Gls0 – Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil.

7.2 Bahnlinien

Das im Zuge der hydrogeologischen Modellierung unter dem Kontinuumsansatz errechnete Strömungsregime wird durch ein dreidimensionales Feld von Geschwindigkeitsvektoren charakterisiert. Auf Grundlage dieser Vektoren können verschiedene, das Strömungsfeld beschreibende Linien generiert werden. Zu den bekanntesten und meistgenutzten (Feld-) Linien zählen hierbei Stromlinien (*Streamlines*) und Bahnlinien (*Pathlines*). Stromlinien stellen den Strömungszustand während eines definierten Zeitpunktes dar. Sie sind an jeder Stelle stets tangential zum Geschwindigkeitsfeld orientiert. Dagegen spiegeln Bahnlinien die Bewegungsbahn eines (Wasser-) Teilchens über die Zeit wider. Kommt es bei instationären Strömungsverhältnissen zu zeitlichen Veränderungen im Geschwindigkeitsfeld, wirkt sich dies unmittelbar auf den Verlauf der Bahnlinien aus. Eine Bahnlinie beschreibt also den Ort, an dem sich ein Teilchen zu einem bestimmten Zeitpunkt in Abhängigkeit zum aktuellen Geschwindigkeitsfeld befindet. Bei stationären Strömungsverhältnissen sind Strom- und Bahnlinien identisch.

Die entsprechenden (Feld-) Linien sind dabei jedoch als eine „Mittelung“ der realen Bewegungsbahnen zu verstehen, da der zellenbasierte Kontinuumsansatz die räumliche Aufteilung in Korn- und Porenraum nicht berücksichtigt. Es handelt sich somit also vielmehr um die dreidimensionale Darstellung der Bewegungsbahn eines repräsentativen Elementarvolumens (REV) als um die Abbildung des Weges eines Wasserteilchens durch eine Korn-Poren-Matrix.

Bei allen im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit erstellten hydrogeologischen Modellen handelt es sich um stationäre Strömungsmodelle. Aus diesem Grund wird im Folgenden ausschließlich der Begriff Bahnlinie verwendet. Er ist jedoch in diesem Fall mit dem Begriff der Stromlinie gleichzusetzen.

In Abbildung 7.5 ist der Verlauf der Bahnlinien aus den verschiedenen hydrogeologischen Modellen für die XY-Ebene dargestellt. Diese Art der Darstellung kann jedoch nur als vereinfachte Form zur Charakterisierung der Bahnlinien angesehen werden, da Veränderungen in Z-Richtung nicht berücksichtigt werden.

Die Berechnung der Bahnlinien erfolgte unter Verwendung von MODPATH, einem Programm, welches wie MODFLOW vom USGS entwickelt worden ist. Es handelt sich hierbei um einen Code zum *forward/backward Particle Tracking*, welcher die Bewegungsbahnen von (Wasser-) Teilchen auf der Grundlage des unter MODFLOW errechneten Strömungsfeldes über die Zeit ermittelt.

Entsprechend der von W nach E gerichteten Hauptströmungsrichtung wurden die Startpunkte für die vorwärts gerichtete Berechnung der Bahnlinien jeweils im W der Modelle positioniert. Für jedes hydrogeologische Modell wurden dabei insgesamt 40 verschiedene Startpunkte definiert. Bei identischer X-Koordinate erfolgte die Platzierung der Startpunkte in Y-Richtung alle 500 m. Für die entsprechenden XY-Koordinaten wurden für den Tiefenbereich zwischen 75 mNN und 35 mNN jeweils 5 Startpunkte mit einem Abstand von 10 m in Z-Richtung vor-

gegeben. Dabei sind die in Abbildung 7.5 dargestellten Bahnlinien gemäß der Tiefenlage ihrer Startpunkte koloriert. Es ist jedoch zu beachten, dass sich die Farbgebung ausschließlich auf die vertikale Position der gewählten Startpunkte bezieht. Variationen bezüglich des Verlaufes der Bahnlinien in Z-Richtung können den Darstellungen nicht entnommen werden. Dennoch ermöglichen die Abbildungen grundlegende Aussagen im Hinblick auf die Beziehungen zwischen geologischem Modell und den Ergebnissen der hydrogeologischen Modellierung. Zum besseren Verständnis ist den Darstellungen zum Bahnlinienverlauf die bereits in den Abbildungen 7.1 bis 7.4 dargestellte Schnittebene bei 70 mNN mit der anstehenden geologischen Situation und den errechneten Isohypsen unterlagert. Da die horizontalen Schnittebenen jedoch nur einen flächenhaften Ausschnitt entlang einer definierten Z-Koordinate repräsentieren, können sie hier nur orientierenden Charakter haben.

Grundsätzlich lässt sich feststellen, dass die Strömungsfelder der auf verschiedenen geologischen Strukturmodellen basierenden hydrogeologischen Modelle in Bahnlinien mit ähnlichem Verlauf resultieren. Dabei ist der überwiegende Anteil der Bahnlinien mit Startpunkten nördlich der Y-Koordinate 5719000 zunächst durch einen Verlauf in Richtung NE charakterisiert, welcher weiter östlich in eine östliche und schließlich südöstliche Richtung umschwenkt. Dagegen queren die Bahnlinien mit Startpunkten südlich der Y-Koordinate 5719000 das Modellgebiet überwiegend in W-E-Richtung.

Bei genauerer Betrachtung wird deutlich, dass Veränderungen im Verlauf der Bahnlinien, analog zu den beobachteten Unterschieden der hydraulischen Druckpotentiale, überwiegend an Übergängen zwischen Schichten mit unterschiedlicher hydraulischer Leitfähigkeit gebunden sind. Während jedoch eine Verschiebung eines solchen Übergangs im Fall der hydraulischen Druckhöhen zu mehr oder weniger lokal begrenzten Unterschieden des Druckpotentials führt (Abb. 7.1 bis 7.4), kann eine solche geometrische Abweichung auf den Verlauf der Bahnlinien einen wesentlich größeren Einfluss haben. Hier können bereits geringe Unterschiede in den Schichtkörpergeometrien in einem deutlich abgewandelten Verlauf der betroffenen Bahnlinien resultieren. Ursache hierfür ist, dass bereits eine geringfügige und lokal sehr begrenzte (Richtungs-) Änderung im Feld der Geschwindigkeitsvektoren einen unmittelbaren Einfluss auf den weiteren Verlauf einer Bahnlinie hat.

So ist es nicht weiter erstaunlich, dass die in Abbildung 7.5 dargestellten Bahnlinien aus den einzelnen hydrogeologischen Modellen teilweise deutlich in ihrem Verlauf voneinander abweichen. In Bezug zum Referenzmodell sind senkrecht zur Hauptströmungsrichtung zum Teil Unterschiede von mehreren hundert Metern zu beobachten. Die Pfeile in Abbildung 7.5 markieren beispielhaft äquivalente Bahnlinien, deren Verlauf durch besonders große Abweichungen zum Referenzmodell charakterisiert ist.

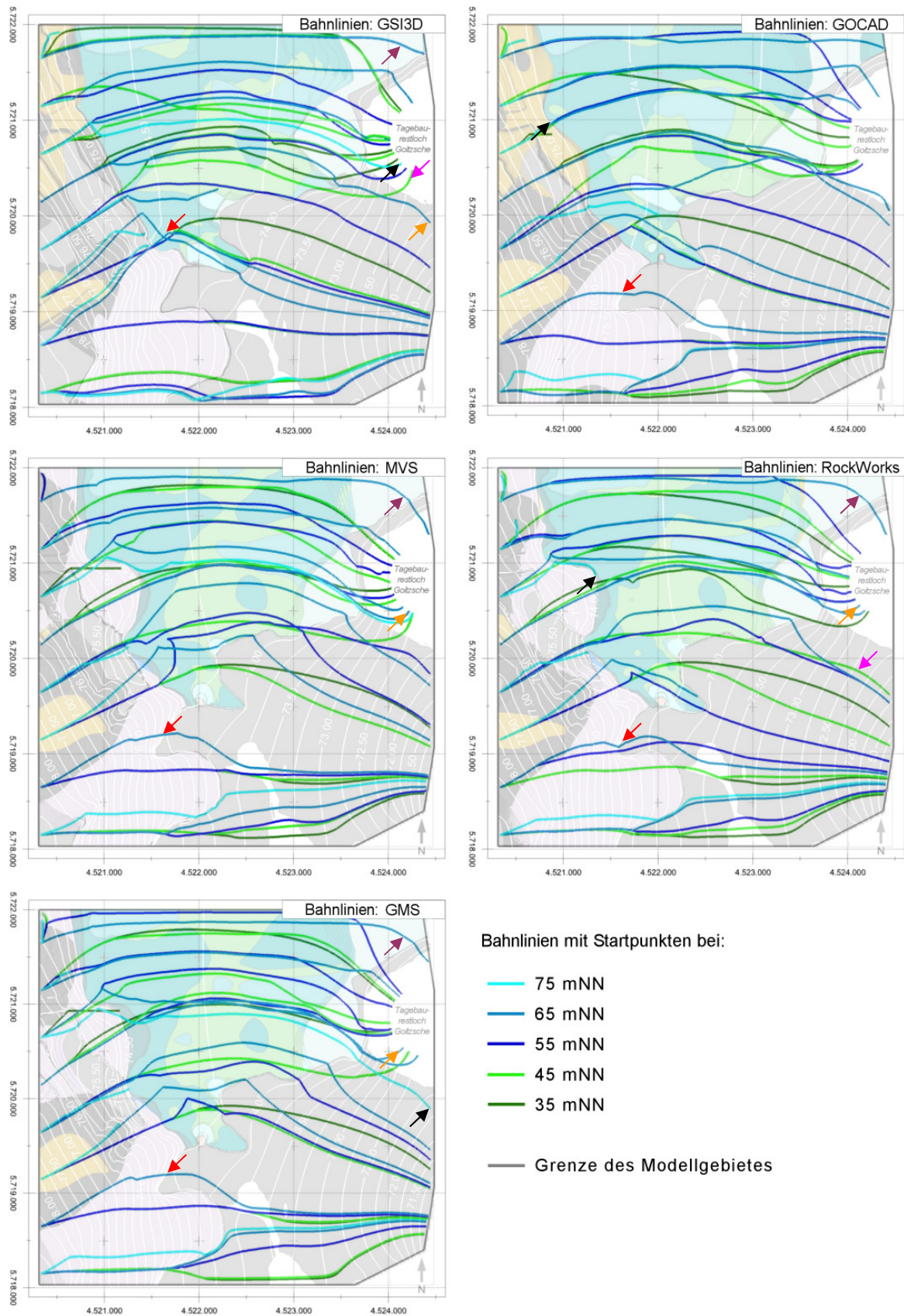


Abb. 7.5: Bahnlinien der verschiedenen hydrogeologischen Modelle, welche auf den unter GeoObject/GSI3D (Referenz), GOCAD, MVS, RockWorks und GMS erstellten geologischen Strukturmodellen basieren. Zur Orientierung sind die bereits in den Abbildungen 7.1 bis 7.4 dargestellten Schnittebenen mit geologischer Situation und Isohypsen bei 70 mNN unterlagert. Die Pfeile markieren ausgewählte, äquivalente Bahnlinien, deren Verlauf durch besonders große Abweichungen zum Referenzmodell charakterisiert ist.

8. Zusammenfassende Bemerkungen

8.1 Geologische 3D-Modellierung

Die unter den Begriffen „Halbautomatische Verfahren“ und „Automatisierte Verfahren“ zusammengefassten Ansätze und Konzepte zur geologischen 3D-Modellierung liefern unterschiedliche Möglichkeiten, Daten in den Modellierprozess einzubinden sowie den Prozess der Modellerstellung durch die Implementierung von Expertenwissen und interaktive Interpretationsarbeit zu beeinflussen. Neben diesen Aspekten haben zudem das zugrunde liegende Datenmodell, die Art und Weise der räumlichen Diskretisierung sowie die zur Verfügung stehenden Verfahren zur Regionalisierung einen erheblichen Einfluss auf die Ergebnisse einer geologischen 3D-Modellierung (vgl. Kap. 5).

Während in einigen Modellierwerkzeugen nur ein einziger methodischer Ansatz implementiert ist, unterstützen andere Softwarelösungen auch mehrere Ansätze bzw. Herangehensweisen oder lassen sogar deren Kombination zu. Oft entscheidet somit die Verfügbarkeit von entsprechender Software darüber, welche methodischen Konzepte bei der Modellerstellung zur Anwendung kommen. Ungeachtet dessen sollte die Wahl des Ansatzes zur geologischen 3D-Modellierung jedoch in erster Linie von den Anforderungen an das zu erstellende Modell sowie von der Heterogenität der zu modellierenden geologischen Situation abhängig sein. Denn die Ergebnisse einer geologischen 3D-Modellierung hängen nicht nur von der Qualität und dem Umfang der Datenbasis sowie den Fähigkeiten und dem Verständnis des Modellierers ab. Wie die Ergebnisse der vorangegangenen Kapitel zeigen, werden sie ebenfalls ganz entscheidend vom eingesetzten Modellierwerkzeug und noch viel stärker vom implementierten Ansatz zur Modellerstellung beeinflusst.

Im Folgenden sollen deshalb die wesentlichen Merkmale der im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit vorgestellten Konzepte im Hinblick auf die Modellierung oberflächennaher, heterogener Schichtenfolgen nochmals kurz zusammengefasst sowie ihre Vor- und Nachteile benannt werden.

Iterative, profilschnittgestützte Modellierung

Im Regelfall können unter diesem Ansatz neben Bohrdaten auch zusätzliche Informationen zur Beschreibung der geologischen Situation in den Modellierprozess eingebunden werden (z. B. digitalisierte thematische Karten, Informationen über die laterale Ausdehnung von Schichtkörpern, Profilschnitte, ...). Damit kann der eindimensionale Informationsgehalt von Bohrungen erheblich erweitert werden. Darüber hinaus setzt dieser Ansatz die Bereitstellung und die Einbindung von geologischem Hintergrundwissen durch den Modellierer voraus. Damit ist die Möglichkeit zur Implementierung von Expertenwissen gegeben. Durch die manuelle, iterative Konstruktion von Profilschnitten bzw. Profilschnittnetzen kann die ursprüngliche Datenbasis um dieses Wissen erweitert werden. Die Vernetzung der Profilschnitte erlaubt in Verbindung mit der Erstellung von Schichtflächen eine fortlaufende Plausibilitäts- und Konsistenzprüfung.

Es ist jedoch herauszustellen, dass der konstruierte Verlauf von Schichtgrenzen innerhalb eines Profilschnittes zwischen den einzelnen Bohrungen nicht belegt ist und somit ein ausgesprochen hoher interpretativer Anteil in die Datengrundlage der Modellerstellung einfließt. Damit kommt dem geologischen Verständnis des Modellierers sowie seiner Kenntnisse zur geologischen Situation im Bearbeitungsgebiet eine tragende Rolle zu. Demzufolge stehen auch die Modellergebnisse sowie ihre Zuverlässigkeit in enger Beziehung zur fachlichen Kompetenz des Modellierers.

Die vergleichenden Betrachtungen in Kapitel 5 zeigen auf, dass sich dieser modelltechnische Ansatz besonders für die Modellierung komplexer geologischer Strukturen mit hoher räumlicher Variabilität eignet. So lassen sich zum Beispiel quartäre Rinnen oder Strukturen, die durch anthropogenes Wirken entstanden oder verändert worden sind, unter diesem Ansatz modelltechnisch gut erfassen. Zudem können unter entsprechendem Aufwand ebenfalls kleinräumige Strukturen detailliert in die Modellebene überführt werden. Die Modellerstellung erweist sich jedoch in der Regel als sehr zeitaufwändig und erfordert ein hohes Maß an Interaktion. Auch die Aktualisierung bereits bestehender Modelle bei Informationszuwachs, beispielsweise durch später abgeteufte Bohrungen, gestaltet sich meist sehr zeitaufwändig und schwierig, da unter Umständen ein Großteil des Profilschnittnetzes überarbeitet werden muss. Den wohl bedeutendsten Nachteil dieses Ansatzes stellt aber die oft fehlende Reproduzierbarkeit der Modellergebnisse dar – ein Faktum, das dem hohen Anteil an Interpretationsarbeit im Prozess der Modellerstellung geschuldet ist.

Iterative Modellierung über definierbare Kontrollelemente und -bedingungen

Von den im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit betrachteten Konzepten zur geologischen 3D-Modellierung bietet dieser modelltechnische Ansatz in Verbindung mit echter 3D-Fähigkeit die flexibelsten Möglichkeiten, ein geologisches Strukturmodell aufzubauen.

Das Konzept erlaubt es, nahezu alle verfügbaren Daten, mit denen der geologische Untergrund beschrieben werden kann, in den Modellierprozess einzubinden. Dabei werden die verschiedenen Basisdaten entsprechend ihrer Art und Relevanz als Kontrollelemente bzw. -bedingungen (Randbedingungen) für die Interpolation definiert. Die verschiedenen Randbedingungen können zudem mit einer Wichtung versehen werden. Von den vorgestellten Modellierungskonzepten bietet dieser Ansatz damit als einziger die Möglichkeit, „harte“ und „weiche“ Daten in gewissem Umfang zu differenzieren und ihnen im Prozess der Modellerstellung eine unterschiedliche Bedeutung zuzuweisen.

Die Modellierung komplexer Strukturen besitzt ebenfalls einen iterativen Charakter: Zwischen einzelnen Interpolationsschritten können die Kontrollelemente angepasst, erweitert oder reduziert werden, wodurch es möglich ist, nahezu jede Strukturgeometrie in die Modellebene zu überführen.

Als entscheidender Faktor für die ausgesprochen hohe Flexibilität dieses Ansatzes ist die variable Definierbarkeit von Kontrollelementen direkt am 3D-Objekt herauszustellen. Damit verbunden ist ebenfalls die Möglichkeit, geologisches Hintergrundwissen und begründete

Annahmen in die Modellierung einfließen zu lassen. Zudem können Plausibilität und Konsistenz bereits während der Modellerstellung fortlaufend im 3D-Raum beurteilt werden.

Wie im Falle der iterativen, profilschnittgestützten Modellierung, erfordert auch dieser Ansatz ein hohes Maß an Interaktion.

Die Aktualisierung eines bestehenden Modells ist bei Informationszuwachs in der Regel durch Anpassung bzw. Erweiterung der definierten Kontrollelemente gut möglich. Dagegen ist die Reproduzierbarkeit der Modellergebnisse auch unter diesem Ansatz problematisch. Dies trifft insbesondere für Strukturen zu, deren Geometrie iterativ mit Hilfe einer schrittweisen Interpolation und variierenden Randbedingungen entwickelt worden ist. Die Definition von Kontrollelementen zwischen einzelnen Interpolationsschritten liegt allein im Ermessen des Modellierers und kann von Dritten im Nachhinein nur schwer nachvollzogen werden.

Generell ist dieser Ansatz ebenfalls gut geeignet, um Strukturen mit hoher räumlicher Variabilität modelltechnisch zu erfassen und abzubilden. Die außerordentlich umfassenden und komplexen Möglichkeiten zur Vergabe von verschiedensten Kontrollelementen sowie die umfangreichen Optionen für den Anwender, in den Modellierprozess einzugreifen, erfordern im Hinblick auf die modelltechnische Umsetzung jedoch ein recht hohes Maß an Erfahrung.

Interpolative Modellierung

Auch unter dem Ansatz der interpolativen Modellierung stellen Bohrdaten für die Erfassung oberflächennaher Schichtenfolgen die wichtigste Informationsquelle dar. In einigen Fällen ist es jedoch nur schwer möglich, zusätzliche, die Geologie beschreibende Informationen in den Modellierprozess einzubinden. Auch die Implementierung von geologischem Hintergrundwissen und Erkenntnissen, die sich im Laufe der Modellierung ergeben, ist oft nur schwer bis gar nicht möglich. In diesen Fällen basieren modellierte Schichtgrenzen allein auf eindimensionalen Bohrinformationen, und eine adäquate Beschreibung des Modellraumes ist häufig nur auf Basis eines Datensatzes mit vergleichsweise sehr hoher Datendichte möglich.

Da in den entsprechenden Softwarelösungen oftmals eine Fülle von Interpolationsverfahren implementiert ist, muss der Anwender die mathematischen Grundlagen dieser Verfahren verstehen sowie die Bedeutung und Auswirkung von veränderbaren Interpolationsparametern kennen.

Unter allen betrachteten Softwarelösungen, die diesen Ansatz implementiert haben, werden sämtliche Schichtgrenzen ungeachtet der lateralen Verbreitung der zugehörigen Schichtkörper über das gesamte Modellgebiet hinweg modelliert. Die resultierende Schichtkörperverbreitung ist dabei allein von der Geometrie zweier, in der Hierarchie aufeinander folgender Schichtgrenzen abhängig und damit eine Funktion der vertikalen Mächtigkeit. Ist ein Schichtkörper an einer Stelle im Modellgebiet nicht verbreitet, besitzt er an dieser Lokation eine Mächtigkeit von 0 m. Die entsprechende Modellschicht ist dabei, wenn auch teilweise ohne eine vertikale Mächtigkeit, über die gesamte Fläche des Modellgebietes verbreitet.

Die betrachteten Modellierwerkzeuge bieten unter diesem Ansatz kaum oder nur unzureichende Möglichkeiten, die laterale Verbreitung von Schichtkörpern manuell einzugrenzen bzw. zu fixieren. Neben der Datenbasis beeinflusst somit das verwendete Interpolationsverfahren mit den entsprechenden, vom Modellierer definierten Parametern maßgeblich die Ausdehnung und die Gestalt der Schichtkörper. Oft ist während der eigentlichen Modellerstellung eine Konsistenz- und Plausibilitätsprüfung nicht möglich. Die Einbeziehung einer regionalen Modellhierarchie stellt jedoch zumindest die Konsistenz des resultierenden Modells sicher.

Im Zusammenhang mit einer stark differenzierten und kleinräumig variierenden geologischen Situation ist die Anwendung eines automatisierten Verfahrens, welches ausschließlich auf der Grundlage einer Interpolation von Bohrinformationen beruht, ungeeignet und führt trotz einer relativ hohen Datendichte nicht zu akzeptablen Ergebnissen. Schwachstellen besitzt dieser Ansatz vor allem im Hinblick auf eine detailgetreue und realitätsnahe Abbildung von kleinräumigen Strukturen. Diese können oftmals mit der vorhandenen Aufschluss- bzw. Informationsdichte und ohne die Möglichkeit der Einbindung zusätzlicher Informationen nicht ausreichend beschrieben und eingegrenzt werden. In diesem Zusammenhang erwies sich insbesondere die durchgängige, flächendeckende Modellierung von Schichtgrenzen als problematisch.

Wie unter den Kapiteln 4 und 5 beschrieben, können jedoch auch unter dem Ansatz einer interpolativen Modellierung plausible und verwertbare Ergebnisse erzielt werden. Voraussetzung hierfür ist die Entwicklung eines zweckorientierten, methodischen Konzeptes zur modelltechnischen Umsetzung. Im Fall Bitterfeld-Süd konnten die Ergebnisse so durch eine hierarchisch orientierte, schichtflächenbezogene Selektion und Einbindung von zusätzlichen Informationen aus dem DGM deutlich verbessert werden.

Generell darf das Potential eines weitestgehend automatisierten Ansatzes zur Modellerstellung jedoch nicht unterschätzt werden. Besonders wenn es um die Erfassung und Modellierung von weniger komplexen Lagerungsverhältnissen geht, kann die Anwendung dieses Ansatzes durchaus zu plausiblen Ergebnissen führen. Auch bei großräumigen, unter einem regionalen Maßstab angelegten Modellierungen, bei denen lokale und kleinräumig auftretende Besonderheiten weniger ins Gewicht fallen, kann die Verwendung dieses Ansatzes zur effektiven und schnellen Modellerstellung beitragen. Als weitere Vorteile sind die einfache und schnelle Aktualisierbarkeit vorhandener Modelle sowie die in der Regel recht gute Reproduzierbarkeit der Modellergebnisse herauszustellen.

8.2 Hydrogeologische Modellierung

Wie unter Kapitel 7 aufgezeigt, beeinflussen die unterschiedlichen Ergebnisse, welche mit den verschiedenen Ansätzen zur geologischen 3D-Modellierung erreicht wurden, das im Zuge der hydrogeologischen Modellierung errechnete Strömungsfeld maßgeblich.

Die eher lokalen Unterschiede in der Verteilung der hydraulischen Druckhöhen haben ihren Ursprung in der unterschiedlichen Lage von Übergängen zwischen Schichtkörpern mit verschiedenen hydraulischen Eigenschaften. Dagegen resultieren strukturelle Abweichungen

bezüglich der Übergänge zwischen Schichtkörpern mit ähnlichen hydraulischen Eigenschaften nur in geringen Unterschieden der hydraulischen Druckhöhen.

Die auffälligsten Abweichungen werden somit durch Geometrieunterschiede zwischen den Grundwassergeringleitern der verschiedenen geologischen 3D-Modelle hervorgerufen. In diesem Zusammenhang sei auch auf die unterschiedlichen Verfahren verwiesen, die bei der Modellierung der Flankenwinkel der Bergbaukippen zur Anwendung kamen. Während im Referenzmodell die Böschungswinkel der Kippenkörper mit Hilfe von Profilschnitten realitätsnah abgebildet worden sind, konnten diese in allen anderen Modellen nur in generalisierter Form erfasst werden. Obwohl die Kippenkörper in nahezu allen Modellen eine identische Verbreitung besitzen, resultieren bereits geringfügige Unterschiede zwischen den Böschungswinkeln in Differenzen der hydraulischen Druckhöhen, welche zwar lokal begrenzt, jedoch recht ausgeprägt sind.

Auch die beobachteten Unterschiede im Verlauf der Bahnlinien sind an die zuvor beschriebenen strukturellen Abweichungen gebunden. Im Gegensatz zu den eher lokal auftretenden Differenzen zwischen den hydraulischen Druckhöhen, können strukturelle Unterschiede auf den Verlauf von Bahnlinien deutlich größere Auswirkungen haben. Dabei ist es möglich, dass bereits geringe geometrische Abweichungen in einem veränderten Feld von Geschwindigkeitsvektoren resultieren. Auch wenn diese Änderungen nur gering ausfallen und lokal begrenzt im Strömungsfeld auftreten, können sie den gesamten nachfolgenden Verlauf der Bahnlinien beeinflussen. Dieser Aspekt ist besonders bei der Bearbeitung von umweltgeologischen Fragestellungen, die neben einem hydrogeologischen Modell ebenfalls auf Ergebnisse einer Transportmodellierung angewiesen sind, zu berücksichtigen.

Die Ergebnisse der hydrogeologischen Modellierung zeigen weiter, dass bereits kleinräumige, heterogene geologische Strukturen die lokalen Strömungsverhältnisse deutlich beeinflussen können. Dies impliziert, dass bereits im Vorfeld einer geologischen Strukturmodellierung festzulegen ist, welche Ziele mit dem erstellten Modell verfolgt werden sollen und welches Maß an Detailauflösung hierfür benötigt wird.

Dies bedeutet im Rückschluss auf die Belange einer belastbaren geologischen 3D-Modellierung, dass die Auswahl des methodischen Ansatzes für die modelltechnische Umsetzung und somit auch die Wahl des entsprechenden Modellierwerkzeuges unter Berücksichtigung der folgenden Faktoren stattfinden sollte:

- Ziel und Zweck der Modellierung (inklusive Weiterverwendung der Ergebnisse),
- Art und Umfang der Datenbasis,
- Komplexität der darzustellenden geologischen Situation und
- benötigte Auflösung bzw. erforderlicher Detaillierungsgrad des Modells.

9. Literatur

- AKIN, H. & SIEMES, H. (1988): *Praktische Geostatistik*. Springer, Berlin Heidelberg; 304 S.
- ALTERMANN, M. & RUSKE, R. (1997): Die Region Leipzig-Halle-Bitterfeld: Geologie und Böden. In: FELDMANN, R., HENLE, K., AUGE, H., FLACHOWSKI, J., KLOTZ, S. & KRÖNERT, R. (Hrsg.): *Regeneration und nachhaltige Landnutzung – Konzepte für belastete Regionen*. Springer, Berlin Heidelberg; 8-12.
- BERG, R. C., RUSSELL, H. A. J. & THORLEIFSON, L. H. (2007): Introduction to a Special Issue on Three-dimensional Geological Mapping for Groundwater Applications. *Journal of Maps*, v2007; 211-218.
- BERG, R. C. & KEEFER, D. A. (2004): Commentary – Three-dimensional Geologic Modeling: Challenging our Terminology and our Understanding of Geologic Maps. In: BERG, R. C., RUSSELL, H. & THORLEIFSON, L. H. (Hrsg.): *Three-Dimensional Geological Mapping for Groundwater Applications: Workshop Extended Abstracts*. Illinois State Geological Survey, Open File Series 2004-8; 1-6.
- BERG, R. C. & THORLEIFSON, L. H. (2001): Geologic Models for Groundwater Flow Modeling: Workshop Extended Abstracts. Illinois State Geological Survey, Open File Series 2001-1; 62 S.
- BERLIOUX, A. (2001): Building models with GOCAD. Stanford Exploration Project - Report 80 (SEP-80); 587-607.
- BEUTLER, G. (2001): Tektonische Übersichtskarte von Sachsen-Anhalt 1 : 500.000. Saxoni-scher Strukturbau. Landesamt für Geologie und Bergwesen Sachsen-Anhalt (Hrsg.), Halle (Saale).
- BILL, R. & FRITSCH, D. (1997): *Grundlagen der Geo-Informationssysteme*. Band 1, 3. Auflage. Wichmann, Heidelberg; 415 S.
- BISTACCHI, A., MASSIRONI, M., DAL PIAZ, G. V., DAL PIAZ, G., MONOPOLI, B., SCHIAVO, A. & TOFFOLON, G. (2008): 3D fold and fault reconstruction with an uncertainty model: An example from an Alpine tunnel case study. *Computers & Geosciences*, 34 (4); 351-372.
- BLÖSCHL, G. (2006): Geostatistische Methoden bei der hydrologischen Regionalisierung. In: GUTKNECHT, D. (Hrsg.): *Methoden der hydrologischen Regionalisierung*. Wiener Mitteilun-gen, Band 197; 21-40.
- BLUMENSTENGEL, H., KRUTZSCH, W. & VOLLAND, L., mit Beiträgen von KNOTH, W. & KNUTH, G. (1996): Revidierte Stratigraphie tertiärer Ablagerungen im südlichen Sach-sen-Anhalt – Teil 1: Raum Halle-Merseburg. *Hallesches Jahrbuch für Geowissenschaften*, Reihe B, Beiheft 1; 1-16.
- BREUNIG, M. (2005): Räumliche Repräsentationen. In: COORS, V. & ZIPF, A. (Hrsg.): *3D-Geoinformationssysteme – Grundlagen und Anwendungen*. Wichmann, Heidelberg; 40-55.

- BUCHHOLZ, O. (2001): Hydrologische Modelle - Theorie der Modellbildung und Beschreibungssystematik. Lehrstuhl und Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, Mitteilungen 122. Verlag Mainz, Wissenschaftsverlag Aachen; 300 S.
- BURNET, P. (1992): 3D-Structures for the Encoding of Geometry and Internal Properties. In: TURNER, A. K. (Hrsg.): Three Dimensional Modelling with Geoscientific Information Systems. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht; 159-188.
- CALÖRTSCHER, M. & KERSTEN, T. (1998): Hochauflösende Orthophotos in der Planungs- und Ingenieurpraxis. VPK – Vermessung Photogrammetrie und Kulturtechnik, 9; 470-477.
- CATTANI, M., FIORINI, A. & RONDELLI, B. (2004): Computer applications for a reconstruction of archaeological stratigraphy as a predictive model in urban and territorial contexts. In: AUSSERER, K. F., BÖRNER, W., GORIANY, M. & KARLHUBER-VÖCKL L. (Hrsg.): Enter the Past: the E-way into the Four dimensions of Cultural Heritage CAA 03, Computer Applications and Quantitative Methods in Archaeology. Proceedings of the 31st Conference, Vienna, April 2003; 299-303.
- CAUMON, G., LÉVY, B., CASTANIÉ, L. & PAUL, J.-C. (2005): Visualization of grids conforming to geological structures: a topological approach. Computers & Geosciences, 31; 671-680.
- CAUMON, G., LEPAGE, F., SWORD, C. H. & MALLET, J.-L. (2004): Building and Editing a Sealed Geological Model. Mathematical Geology, 36 (4); 405-424.
- CHILÈS, J.-P. & DELFINER, P. (1999): Geostatistics – Modeling Spatial Uncertainty. John Wiley & Sons, New York; 695 S.
- CRESSIE, N. A. C. (1993): Statistics for Spatial Data. John Wiley & Sons, New York; 900 S.
- CULSHAW, M. G. (2005): From concept towards reality: developing the attributed 3D geological model of the shallow subsurface. Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology, 38 (3); 231-284.
- CULSHAW, M. (2003): Bridging the gap between geoscience providers and the user community. In: ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction. Springer, Berlin Heidelberg; 7-26.
- DAVIS, J. C. (1986): Statistics and Data Analysis in Geology. John Wiley & Sons, New York; 646 S.
- DE DONATIS, M., BORRACCINI, F. & SUSINI, S. (2009): Sheet 280 – Fosombrone 3D: A study project for a new geological map of Italy in three dimensions. Computers & Geosciences, 35 (1); 19-32.
- DEUTSCH, C. V. & JOURNAL, A. G. (1998): GSLIB – Geostatistical Software Library and User's Guide. Second Edition. Oxford University Press, New York Oxford; 369 S.
- DUNSTAN, S. P. & MILL, A. J. B. (1989): Spatial Indexing of Geological Models Using Linear Octrees. Computers & Geosciences, 15 (8); 1291-1301.

- EHLING, B.-C. (2008): Halle-Wittenberg-Scholle. In: BACHMANN, G. H., EHLING, B.-C., EICHNER, R. & SCHWAB, M. (Hrsg.): Geologie von Sachsen-Anhalt. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart; 375-385.
- EISERMANN, D. (2005): Multi-Spezies-Modellierung sanierungsrelevanter Fragestellungen für einen heterogenen Feldstandort: SAFIRA-Bitterfeld. UFZ Dissertation 17/2005; 214 S.
- EISSMANN, L. (1997): Das quartäre Eiszeitalter in Sachsen und Nordostthüringen. Landschaftswandel am Südrand des skandinavischen Vereisungsgebietes. Altenbg. nat. wiss. Forsch. - Altenburg 8; 1-98.
- EISSMANN, L. (1995): Abriss der Quartärgeologie des Saale-Elbe-Raums. Mitteilungen der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft 77; 13-22.
- EISSMANN, L. (1994a): Leitfaden der Geologie des Präquartärs im Saale-Elbe-Gebiet. Altenbg. nat. wiss. Forsch. - Altenburg 7; 11-53.
- EISSMANN, L. (1994b): Grundzüge der Quartärgeologie Mitteldeutschlands (Sachsen, Sachsen-Anhalt, Süd-Brandenburg, Thüringen). DEUQUA-Tagung in Leipzig 1994. Altenbg. nat. wiss. Forsch. - Altenburg 7; 55-135.
- EISSMANN, L. & LITT, T. (1994): Klassische Quartärfolge Mitteldeutschlands von der Elsterzeit bis zum Holozän unter besonderer Berücksichtigung der Stratigraphie, Paläoökologie und Vorgeschichte. DEUQUA-Tagung in Leipzig 1994. Altenbg. nat. wiss. Forsch. - Altenburg 7; 250-337.
- ELFERS, H., BOMBIEN, H., FRANK, H., SPÖRLEIN, T., KRENTZ, O., RAPPSILBER, I., SIMON, A. & SCHWEIZER, R. (2004): Wege zur 3D-Geologie. Personenkreis 3D der BIS (BodenInformationsSystem) Steuerungsgruppe, Krefeld; 14 S.
- EVANS, R. (2003): Current themes, issues and challenges concerning the prediction of subsurface conditions. In: ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction. Springer, Berlin Heidelberg; 359-378.
- FABRITIUS, H. (2002): Entwicklung eines digitalen geologischen Raummodells im Raum Bitterfeld-Süd. Diplomarbeit, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 126 S.
- FAUPL, P. (1997): Historische Geologie. WUV-Universitätsverlag, Wien; 270 S.
- FELTRIN, L., MCLELLAN, J. G. & OLIVER, N. H. S. (2009): Modelling the giant Zn-Pb-Ag Century deposit, Queensland, Australia. Computers & Geosciences, 35 (1); 108-133.
- FISHER, T. R. & WALES, R. Q. (1992): Three-dimensional solid modeling of geological objects using non-uniform rational B-splines (NURBS). In: TURNER, A. K. (Hrsg.): Three Dimensional Modelling with Geoscientific Information Systems. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht; 85-105.
- FRANKE, D. (2009): Regionale Geologie von Ostdeutschland – Ein Wörterbuch. www.regionalgeologie-ost.de

- GALERA, C., BENNIS, C., MORETTI, I. & MALLET, J.-L. (2003): Construction of coherent 3D geological blocks. *Computers & Geosciences*, 29; 971-984.
- GAU, CH. (2005): Geostatistische Simulationsverfahren als Werkzeug der Quantifizierung der Unsicherheit geologischer Untergrundmodelle für die Stadtplanung. In: SCHRENK, M. (Hrsg.): *Proceedings - 10th International Conference on Information & Communication Technologies (ICT) in Urban Planning and Spatial Development and Impacts of ICT on Physical Space*. Im Selbstverlag des Instituts für EDV-gestützte Methoden in Architektur und Raumplanung der TU Wien; 623-630.
- GÖRNE, S., KRENTZ, O., HORNA, F., BLOCK, C. & HÜBSCHMANN, M. (2006): 3D-Modellierung mit Gocad auf dem Weg zur routinemäßigen Anwendung im LfUG. In: MERKEL, B., SCHAEBEN, H., WOLKERSDORFER, CH. & HASCHE-BERGER, A. (Hrsg.): *Behandlungstechnologien für bergbaubeeinflusste Wässer, GIS - Geowissenschaftliche Anwendungen und Entwicklungen*. *Wissenschaftliche Mitteilungen*, 31, TU Bergakademie Freiberg, Institut für Geologie; 317-324.
- GOSSEL, W. (2008): *Schnittstellen bei der Kopplung von Modellierungssystemen der Hydrogeologie*. Habilitationsschrift, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, ULB Sachsen-Anhalt; 150 S.
- GRENDÖRFFER, G. (1994): *Digitale Orthophotos und Geo-Informationssysteme: neue Werkzeuge in der Umweltplanung*. *Rostocker Agrar- und Umweltwissenschaftliche Beiträge*, 2; 113-127.
- HARBAUGH, A. W., BANTA, E. R., HILL, M. C. & McDONALD, M. G. (2000): *MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model - User Guide to Modularization Concepts and the Ground-Water Flow Process*. U.S. Geological Survey Open-File Report 00-92, Reston, Virginia; 121 S.
- HARTMANN, B. (2005): *Die Genese des stofflichen Inventars des Braunkohlenflözes Bruckdorf (Obereozän) zwischen Halle und Bitterfeld, Sachsen-Anhalt*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, ULB Sachsen-Anhalt; 130 S.
- HEIDRICH, S., SCHIRMER, M., WEIB, H., WYCISK, P., GROßMANN, J. & KASCHL, A. (2004): Regionally contaminated aquifers – toxicological relevance and remediation options (Bitterfeld Case Study). *Toxicology*, 205; 143-155.
- HELMBOLD, F. (1988): *Funktioneller Zusammenhang von Durchlässigkeit und Entwässerbarem Porenraum in den Sanden des Mitteldeutschen Braunkohlereviere*. Unveröffentlichte Notiz; 2 S. [zitiert in: LANGGUTH, H.-R. & VOIGT, R. (2004): *Hydrogeologische Methoden*, 2. Auflage. Springer, Berlin Heidelberg; 1005 S.]
- HEROLD, M. (2003): *Kartierung einer stark industrie- und bergbaugeprägten Region am Beispiel Bitterfeld/Wolfen*. Diplomkartierung, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 113 S.
- HILLER, A., LITT, T. & EISSMANN, L. (1991): Zur Entwicklung der jungquartären Tieflandstäler im Saale-Elbe-Raum unter besonderer Berücksichtigung von ¹⁴C-Daten. *Eiszeitalter und Gegenwart* 41; 26-46.

- HINZE, C., SOBISCH, H.-G. & VOß, H.-H. (1999): Spatial Modelling in Geology and its Practical Use. *Mathematische Geologie*, 4; 51-60.
- HINZE, C., JERZ, H., MENKE, B. & STAUDE, H. (1989): Geogenetische Definitionen quartärer Lockergesteine für die Geologische Karte 1 : 25.000 (GK 25). *Geologisches Jahrbuch, Reihe A*, 112; 243 S.
- HOLLAND, J. P. & RICHARDS, D. R. (1998): Use of the DoD Groundwater Modeling System in Site Cleanup. *Proceedings of the 1998 Conference on Hazardous Waste Research*; 273-279.
- HUBERT, T. (2005): Vergleichende 3D-Modellierung eines geologischen Strukturmodells am Beispiel einer industrie- und bergbaugeprägten Region – Bitterfeld. Diplomarbeit, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 136 S.
- JESSELL, M. (2001): Three-dimensional geological modelling of potential-field data. *Computers & Geosciences*, 27; 455-465.
- JOURNAL, A. G. & HUIJBREGTS, CH. J. (1993): *Mining Geostatistics*. Academic Press, London; 600 S.
- KASTENS, U. & KLEINE BÜNING, H. (2005): *Modellierung - Grundlagen und formale Methoden*. Carl Hanser, München Wien; 256 S.
- KAUFMANN, O. & MARTIN, T. (2008): 3D geological modelling from boreholes, cross-sections and geological maps, application over former natural gas storages in coal mines. *Computers & Geosciences*, 34; 278-290.
- KELLER, G., MATILE, G., THORLEIFSON, H. & MALOLEPSZY, Z. (2005): 3D Geological Model of the Red River Valley, Central North America. In: RUSSELL, H., BERG, R. C. & THORLEIFSON, H. (Hrsg.): *Three-Dimensional Geologic Mapping for Groundwater Applications: Workshop Extended Abstracts*. Geological Survey of Canada, Open File 5048; 35-38.
- KESSLER, H. (2006): Tools for building and delivering 3D models - Perspectives by the BGS. GGIPAC Workshop Geoscience Australia, Canberra 29th November 2006. (http://www.geoscience.gov.au/workshop_ggipac.jsp)
- KESSLER, H., MATHERS, S., LELLIOTT, M., HUGHES, A. & MACDONALD, D. (2007): Rigorous 3D Geological Models as the Basis for Groundwater Modelling. In: THORLEIFSON, L. H., BERG, R. C. & RUSSELL, H. A. J. (Hrsg.): *Three-dimensional geologic mapping for groundwater applications: Minnesota Geological Survey, Open-File Report 07-4*; 90 S.
- KESSLER, H., LELLIOTT, M., BRIDGE, D., FORD, J., SOBISCH, H.-G., MATHERS, S., PRICE, S., MERRITT, J. & ROYSE, K. (2005): 3D Geoscience Models and their Delivery to Customers. In: RUSSELL, H., BERG, R. C. & THORLEIFSON, L. H. (Hrsg.): *Three-Dimensional Geologic Mapping for Groundwater Applications: Workshop Extended Abstracts*. Geological Survey of Canada, Open File 5048; 39-42.

- KESSLER, H. & MATHERS, S. J. (2004): From geological maps to models. *Geoscientist*, 14 (10); 4-6.
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995): Grundwassermodellierung. Bornträger, Berlin Stuttgart; 283 S.
- KNOTH, W. (1995): Sachsen-Anhalt. In: BENDA, L. (Hrsg.): Das Quartär Deutschlands. Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung, Hannover – in Gemeinschaft mit den Geologischen Diensten der BRD zum 14. Kongress der Internationalen Quartärvereinigung (INQUA) in Berlin 1995. Bornträger, Berlin Stuttgart; 148-170.
- KNOTH, W., KRIEBEL, U., RADZINSKI, K.-H. & THOMAE, M. (1998): Die geologischen Verhältnisse von Halle und Umgebung. *Hallesches Jahrbuch für Geowissenschaften*, Reihe B, Beiheft 4; 7-34.
- KNOTH, W. & SCHWAB, M. (1972): Abgrenzung und Bau der Halle-Wittenberger Scholle. *Geologie* 21 (10); 1153-1172.
- KRAPP, L. & RUSKE, R. (1992): Geologische Verhältnisse von Bitterfeld und ihre Relevanz zu Kontaminationen des Grundwassers und Bodens. In: HILLE, J., RUSKE, R., SCHOLZ, J. & WALKOW, F. (Hrsg.): Modellhafte ökologische Bestandsaufnahme einer kontaminierten Industrieregion – Beiträge der 1. Bitterfelder Umweltkonferenz. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Berlin; 85-92.
- LÄHNE, R. (in Vorbereitung): Hydrodynamische Modellierung eines Talraum-Aquifers unter Berücksichtigung der Stofftransportdynamik. Dissertation, in Vorbereitung, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- LE CARLIER DE VESLUD, CH., CUNEY, M., LORILLEUX, G., ROYER, J.-J. & JÉBRAK, M. (2009): 3D modeling of uranium-bearing solution-collapse breccias in Proterozoic sandstones (Athabasca Basin, Canada). *Metallogenic interpretations. Computers & Geosciences*, 35 (1); 92-107.
- LELLIOTT, M. R., BRIDGE, D., KESSLER, H., PRICE, S. J. & SEYMOUR, K. J. (2006): The application of 3D geological modelling to aquifer recharge assessments in an urban environment. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, 39; 293-302.
- LEMON, A. M. & JONES, N. L. (2003): Building solid models from boreholes and user-defined cross-sections. *Computers & Geosciences*, 29 (5); 547-555.
- MALLET, J.-L. (2002): *Geomodeling. Applied Geostatistics Series.* Oxford University Press, New York; 599 S.
- MAROTZ, G. (1968): Technische Grundlagen einer Wasserspeicherung im natürlichen Untergrund. *Mitteilungen Institut für Wasserwirtschaft, Grundbau und Wasserbau*, 9; 228 S.
- MARTIKLOS, G., BEUTLER, G. & EHLING, B.-C. (2001): Geologische Übersichtskarte von Sachsen-Anhalt 1 : 400.000. Karte ohne känozoische Bildungen. Landesamt für Geologie und Bergwesen Sachsen-Anhalt (Hrsg.), Halle (Saale).

- MATHERS, S. J. & KESSLER, H. (2008): GSI3D – The software and methodology to build systematic near-surface 3-D geological models - Version 2.6. British Geological Survey, Open Report OR/08/064; 129 S.
- MERRITT, J., MONAGHAN, A., ENTWISLE, D., HUGHES, A., CAMPBELL, D. & BROWNE, M. (2007): 3D attributed models for addressing environmental and engineering geoscience problems in areas of urban regeneration – a case study in Glasgow, UK. *First Break*, 25; 79-84.
- NEEF, O. (2002): Aspekte numerischer Modellierungen in der Hydrogeologie am Beispiel einer industriell beeinflussten Bergbaufolgelandschaft im Mitteldeutschen Braunkohlerevier. Diplomarbeit, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 75 S.
- POHLERT, M. (2005): Digitale 3D-Kartierung der Stadt Halle/Saale. Voraussetzungen und strukturelles Konzept eines GIS-basierten Rauminformationssystems. Diplomkartierung, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 73 S.
- POHLERT, M. (2004): Entwicklung eines digitalen geologischen Raummodells zur Implementierung von Sanierungstechniken an einem Industriestandort. Diplomarbeit, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 106 S.
- RAPER, J. F. (1989): The 3D geoscientific mapping and modelling system: a conceptual design. In: RAPER, J. F. (Hrsg.): *Three-dimensional applications in geographic information systems*. Taylor and Francis, London; 11-19.
- RAPPSILBER, I. (2003): Struktur und Entwicklung des nördlichen Saale-Beckens (Sachsen-Anhalt): Geophysik und Geologie. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, ULB Sachsen-Anhalt; 118 S.
- REILLY, T. E. & HARBAUGH, A. W. (2004): Guidelines for Evaluating Ground-Water Flow Models. U.S. Geological Survey Scientific Investigation Report 2004-5038, Reston, Virginia; 30 S.
- REINSDORFF, S. (2003): Ein dreidimensionales hydrogeologisches Modell des Sonwendstein/Semmering (Österreich). *Beiträge zur Hydrogeologie*, 54; 79-96.
- REUTTER, E. (2005): Hydrostratigrafische Gliederung Niedersachsens. *Geofakten*, 21; LBEG Hannover; 10 S.
- ROSENBAUM, M. (2003): Characterisation of the shallow subsurface: implications for urban infrastructure and environmental assessment. In: ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): *New Paradigms in Subsurface Prediction*. Springer, Berlin Heidelberg; 3-6.
- ROSS, M., MARTEL, R., PARENT, G. & SMIRNOFF, A. (2007): Geomodels as a Key Component of Environmental Impact Assessments of Military Training Ranges in Canada. In: THORLEIFSON, L. H., BERG, R. C. & RUSSELL, H. A. J. (Hrsg.): *Three-dimensional geologic mapping for groundwater applications: Minnesota Geological Survey, Open-File Report 07-4*; 90 S.

- ROYER, J.-J. (2004): 3D Modeling and Visualization. Proceedings for the 19th International CODATA Conference: The Information Society - New Horizons for Science, Berlin (Germany) 7-10 November 2004; 9 S.
- RUSKE, R., HÜBNER, J., BÖHME, O. & FALKE, P. (1997): Ergebnisse der geologisch-hydrogeologisch-geotechnischen Standorterkundung. In: WEIß, H., TEUTSCH, G. & DAUS, B. (Hrsg.): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFI-RA), Bericht zur Machbarkeitsstudie für den Modellstandort Bitterfeld. UFZ Bericht 27/97; 14-17.
- RUSSELL, H. A. J., THORLEIFSON, L. H. & BERG, R. C. (2005): Three-Dimensional Geological Mapping for Groundwater Applications: Recent Activities. In: SOLLER, D. R. (Hrsg.) Digital Mapping Techniques '05 - Workshop Proceedings, Baton Rouge, Louisiana, April 24-27, 2005. U.S. Geological Survey Open-File Report 2005-1428; 67-76.
- SAKSA, P., HELLÄ, P. & NUMMELA, J. (2003): Analysing uncertainty when modelling geological structures. In: ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Sub-surface Prediction. Springer, Berlin Heidelberg; 331-340.
- SCHLESIER, D. (2006): Geologische 3D-Kartierung des Stadtgebietes Halle (Saale) – Multimediale Umsetzung und wissenschaftliche Visualisierung geologischer Daten. Diplomarbeit, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 105 S.
- SCHLÜTER, M. (1996): Einführung in geomathematische Verfahren und deren Programmierung. Enke, Stuttgart; 326 S.
- SEFELNASR, A. M. (2007): Development of Groundwater Flow Model for Water Resources Management in the Development Areas of the Western Desert, Egypt. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, ULB Sachsen-Anhalt; 171 S.
- SIDES, E. J. (1997): Geological modelling of mineral deposits for prediction in mining. Geologische Rundschau, 86; 342-353.
- SMITH, I. F. (2005): Digital Geoscience Spatial Model Project - Final Report. British Geological Survey Occasional Publication, 9; 56 S.
- SOBISCH, H.-G. (2000): Ein digitales räumliches Modell des Quartärs der GK 25 Blatt 3508 Nordhorn auf der Basis vernetzter Profilschnitte. Shaker, Aachen; 113 S.
- SOBISCH, H.-G. & BOMBIEN, H. (2003): Regional subsurface models and their practical usage. In: ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): New Paradigms in Subsurface Prediction. Springer, Berlin Heidelberg; 129-134.
- SOMMERWERK, K. (2003): Die Recherche der industriehistorischen Entwicklung der Region Bitterfeld-Wolfen als Voraussetzung für ein effektives Umweltmonitoring. In: ZABEL, H.-U. (Hrsg.): Theoretische Grundlagen und Ansätze einer nachhaltigen Umweltwirtschaft. UZU-Schriftenreihe, Neue Folge, Band 6, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Universitätszentrum für Umweltwissenschaften (UZU); 111-130.

- SPRAGUE, K. B. & DE KEMP, E. A. (2005): Interpretive Tools for 3-D Structural Geological Modelling Part II: Surface Design from Sparse Spatial Data. *GeoInformatica*, 9 (1); 5-32.
- STACHOWIAK, H. (1973): *Allgemeine Modelltheorie*. Springer, Wien; 494 S.
- STEINBORN, H., KRENTZ, O. & FELIX, M. (2004): Aktueller Stand zur Einführung der 3D-Modellierungssoftware Gocad im LfUG am Beispiel von Zwickau-Schedewitz. In: MERKEL, B., SCHAE BEN, H., WOLKERSDORFER, CH. & HASCHE, A. (Hrsg.): *GIS - Geoscience Applications and Development, Treatment Technologies for Mining Impacted Water*. Wissenschaftliche Mitteilungen 25, TU Bergakademie Freiberg, Institut für Geologie; 53-59.
- STEINBUCH, K. (1977): Denken in Modellen. In: SCHÄFER, G., TROMMER, G. & WENK, K. (Hrsg.): *Denken in Modellen*. Westermann, Braunschweig; 10-17.
- THIEKEN, A. H. (2001): *Schadstoffmuster in der regionalen Grundwasserkontamination der mitteldeutschen Industrie- und Bergbauregion Bitterfeld-Wolfen*. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, ULB Sachsen-Anhalt; 214 S.
- THOMSEN, A., BREUNING, M., BÄR, W., CREMERS, B. & SIEHL, A. (2005): Datenbankunterstützung für geologische Anwendungen. In: COORS, V. & ZIPF, A. (Hrsg.): *3D-Geoinformationssysteme – Grundlagen und Anwendungen*. Wichmann, Heidelberg; 354-375.
- TONINI, A., GUASTALDI, E. & MECCHERI, M. (2009): Three-dimensional reconstruction of the Carrara Syncline (Aquane Alps, Italy): an approach to reconstruct and control a geological model using only field survey data. *Computers & Geosciences*, 35 (1); 33-48.
- TURNER, A. K. (2006): Challenges and trends for geological modelling and visualisation. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, 65 (2); 109-127.
- TURNER, A. K. (2003a): Definition of the modelling technologies. In: ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): *New Paradigms in Subsurface Prediction*. Springer, Berlin Heidelberg; 27-40.
- TURNER, A. K. (2003b): Putting the user first: implications for subsurface characterisation. In: ROSENBAUM, M. S. & TURNER, A. K. (Hrsg.): *New Paradigms in Subsurface Prediction*. Springer, Berlin Heidelberg; 61-68.
- WALTER, R. (1992): *Geologie von Mitteleuropa*. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart; 516 S.
- WEBB, E. K. & DAVIS, J. M. (1998): Simulation of the Spatial Heterogeneity of Geologic Properties: An Overview. In: FRASER, G. S. & DAVIS, J. M. (Hrsg.): *Hydrogeologic Models of Sedimentary Aquifers*. SEPM (Society for Sedimentary Geology), Tulsa, Oklahoma; 1-24.
- WEIß, H., TEUTSCH, G. & DAUS, B. (2004a): *Zusammenfassender Abschlussbericht - Projektverbund SAFIRA*. UFZ-Bericht 13/2004, Leipzig; 366 S.

- WEIß, H., RÜCKERT, M., GROSSMANN, J. & PETER, H. (2004b): Hochwasserinduzierte Änderungen des Grundwasserfließregimes und der Grundwasserkontamination im Raum Bitterfeld/Wolfen. In: GELLER, W., OCKENFELD, K., BÖHME, M. & KÖCHEL, A. (Hrsg.): Schadstoffbelastung nach dem Elbehochwasser 2002 – Ad-hoc-Projekt Schadstoffuntersuchungen nach dem Hochwasser vom August 2002 zur Ermittlung der Gefährdungspotentiale an Elbe und Mulde. Abschlussbericht des BMBF-Verbundvorhabens, Magdeburg; 348-361.
- WEIß, H., SCHIRMER, M., TEUTSCH, G. & MERKEL, P. (2002): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA) – 2. Projektüberblick und Pilotanlage. Grundwasser, Heft 3, Bd. 7; 135-139.
- WEIß, H., TEUTSCH, G., FRITZ, P., DAUS, B., DAHMKE, A., GRATHWOHL, P., TRABITZSCH, R., FEIST, B., RUSKE, R., BÖHME, O. & SCHIRMER, M. (2001): Sanierungsforschung in regional kontaminierten Aquiferen (SAFIRA) – 1. Information zum Forschungsschwerpunkt am Standort Bitterfeld. Grundwasser, Heft 3, Bd. 6; 113-122.
- WEIß, H. & TEUTSCH, G. (1999): Das Projekt SAFIRA und der Einsatz reaktiver Zonen zur in situ-Grundwassersanierung. In: WEIß, H., DAUS, B. & TEUTSCH, G. (Hrsg.): SAFIRA - 2. Statusbericht. Modellstandort, Mobile Testeinheit, Pilotanlage. UFZ-Bericht 17/1999, Leipzig; 7-14.
- WIMMER, R. & SPANGENBERG, R. (1997): Hydrogeologische und hydrochemische Verhältnisse im Raum Bitterfeld, vorgestellt am Beispiel des Testgebietes Goitzsche. In: GBL-Gemeinschaftsvorhaben, Heft Nr. 4, Vortragsband des 3. GBL-Kolloquiums vom 19.-21. Februar 1997 in Halle (Saale), Ergebnisse und Empfehlungen; 64-72.
- WOLLMANN, A. (2004): Geologische Bearbeitung einer ehemaligen Bergbau- und Industriefolgelandschaft Bitterfeld/Wolfen. Diplomarbeit/Diplomkartierung, Geowissenschaftliche Fakultät, FG Umweltgeologie, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) [unveröffentlicht]; 132 S.
- WU, L. (2004): Topological relations embodied in a generalized tri-prism (GTP) model for a 3D geoscience modeling system. Computers & Geosciences, 30; 405-418.
- WYCISK, P., HUBERT, T., GOSSEL, W. & NEUMANN, CH. (2009): High-resolution 3D spatial modelling of complex geological structures for an environmental risk assessment of abundant mining and industrial megasites. Computers & Geosciences, 35 (1); 165-182.
- WYCISK, P., HUBERT, T., STEINMETZ, T. & GOSSEL, W. (2008): 3D Modelling of Complex Geological Structures and its Relevance for Numerical Groundwater Models – A Case Study. REPOS SAFE 2007, International Conference on Radioactive Waste Disposal in Geological Formations, Braunschweig (“City of Science 2007”) 6-9 November 2007, Proceedings. Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) und Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH; 285-295.
- WYCISK, P., GOSSEL, W. & FABRITIUS, H. (2005a): Geologische 3D-Modellierung und ihre Anwendungsmöglichkeiten in Bergbau- und Industriefolgelandschaften. In: MERKEL, B., SCHAEBEN, H., WOLKERSDORFER, CH. & HASCHE, A. (Hrsg.): Behandlungstechnologien für bergbaubeeinflusste Wässer / GIS – Geowissenschaftliche Anwendungen und Entwicklungen. Proceedingsband zu den Workshops am Geologischen Institut der TU

- Bergakademie Freiberg am 17. Juni 2005. Wissenschaftliche Mitteilungen 28, TU Bergakademie Freiberg; 163-170.
- WYCISK, P., NEUMANN, CH. & GOSSEL, W. (2005b): Flooding induced effects from the mining lake Goitzsche on groundwater and land-use in the Bitterfeld area. *Acta Hydrochimica et Hydrobiologica* 33 (5); 507-518.
- WYCISK, P., NEUMANN, C., FLECK, G. & GOSSEL, W. (2004a): Ermittlung räumlicher Risikobereiche und Auswirkungen auf die Landnutzung als Grundlage einer maßnahmeorientierten Schadensvorsorge im Bereich Bitterfeld/Wolfen – Risikobereiche und Landnutzung. In: GELLER, W., OCKENFELD, K., BÖHME, M. & KÖCHEL, A. (Hrsg.): Schadstoffbelastung nach dem Elbehochwasser 2002 – Ad-hoc-Projekt Schadstoffuntersuchungen nach dem Hochwasser vom August 2002 zur Ermittlung der Gefährdungspotentiale an Elbe und Mulde. Abschlussbericht des BMBF-Verbundvorhabens, Magdeburg; 363-382.
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., THIEKEN, A., NEEF, O., SOMMERWERK, K. & SCHNABEL, S. (2004b): Analyse der Raumauswirkung mittels digitaler Raummodelle in der Sanierungsforschung – SAFIRA I Bitterfeld. In: WEIß, H., TEUTSCH, G. & DAUS, B. (2004): Zusammenfassender Abschlussbericht - Projektverbund SAFIRA. UFZ-Bericht 13/2004, Leipzig; 317-347.
- WYCISK, P., WEIß, H., KASCHL, A., HEIDRICH, S. & SOMMERWERK, K. (2003a): Groundwater pollution and remediation options for multisource contaminated aquifers (Bitterfeld/Wolfen, Germany). *Toxicology Letters* 140-141; 343-351.
- WYCISK, P., SOMMERWERK, K. & FRANKE, B. (2003b): SAFIRA Teilprojekt E 1.1 Bewertungsansätze zur Raumauswirkung – Entwicklung modellhafter Bewertungsansätze zur Raumauswirkung von Sanierungsvorhaben. Textband. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg; 335 S.
- WYCISK, P., FABRITIUS, H., RUSKE, R. & WEIß, H. (2002): Das digitale geologische Strukturmodell Bitterfeld als neuer Baustein in der Sanierungsforschung. *Grundwasser*, Bd. 7 (3); 165-171.
- YU, C., LOUREIRO, C., CHENG, J.-J., JONES, L. G., WANG, Y. Y., CHIA, Y. P. & FAILLACE, E. (1993): Data Collection Handbook to Support Modeling Impacts of Radioactive Material in Soil. Environmental Assessment and Information Sciences Division, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois; 158 S.
- ZANCHI, A., SALVI, F., ZANCHETTA, S., STERLACCHINI, S. & GUERRA, G. (2009): 3D reconstruction of complex geological bodies: Examples from the Alps. *Computers & Geosciences*, 35 (1); 49-69.
- ZHONG, D., LI, M. & LIU, J. (2007): 3D integrated modeling approach to geo-engineering objects of hydraulic and hydroelectric projects. *Science in China Series E: Technological Sciences*, 50 (3); 329-342.

Internet:

FRANKE, D. (2009): Regionale Geologie von Ostdeutschland – Ein Wörterbuch.
www.regionalgeologie-ost.de

GABLE, C., Los Alamos National Laboratory (LANL); www.ees.lanl.gov

Anhang

Anhang 1 – Lithologische Beschaffenheit der modellierten Schichtenfolge

Anhang 2 – Übersicht und Merkmale der verwendeten Modellierwerkzeuge

Anhang 3 – Legende der modellierten Schichtenfolge

Anhang 4 – Übersicht k_f -Werte

Anhang 5 – Übersicht nutzbare Porositäten

| Stratigraphie | Modellschicht | Schicht-kürzel | Schichteigenschaften zusammengestellt nach: KRAPP & RUSKE (1992); EISSMANN (1994a, b, 1995); KNOTH (1995); WIMMER & SPANGENBERG (1997); KNOTH et al. (1998); WEIß et al. (2001); FABRITIUS (2002); WYCISK et al. (2002); WOLLMANN (2004) | | |
|-----------------------------------|--|---|---|-----------------|---|
| | | | Lithologie / Beschaffenheit | GW-Geringleiter | |
| | | | | GW-Leiter | |
| Holozän (qh) | Bergbaukippen | Abk | Abraumverkipfung in Tagebaurestlöchern; sehr heterogenes Gemenge aus quartären und tertiären Deckschichten der Braunkohle (Kiese, Sande, Schluffe, Tone, Kohlestücke, rezente Holz- und Pflanzenreste); stark variierende Korngrößen und hydraulische Leitfähigkeiten | x | x |
| | Auffülle | A | im Zuge von Baumaßnahmen aufgetragenes Material oder umgelagerte, anstehende Schichten; z. T. kleinflächige, verfüllte Tagebaue zur Kies-, Ton- und Torfgewinnung; oft heterogene Mischung von Sand, Kies, Schluff; weiter Bauschutt, Ziegelreste, Aschen, Schlackereste, Abfälle, Steine, Pflanzen- und Wurzelreste, Betonfundamente; locker bis mitteldicht, selten fest; $k_f: \sim 5 \cdot 10^{-6}$ m/s | x | |
| | Auenlehm | Lf | Variationen von sandig-schluffigem Ton, feinsandigem Schluff, Feinsand und Schwemmlöß; überwiegend lockere Lagerung; im Raum Bitterfeld im Durchschnitt 1 bis 2 m mächtig | | x |
| | Holozän-Terrasse der Mulde | Qhg | meist mittelkörnige Kiese; zusätzlich mittel- bis grobkörnige Sande, selten Schluffe; reich an Holzbruchstücken; Frostmarken fehlen; oft gradiert an der Basis; lockere bis mitteldichte Lagerung; im Schnitt 6 bis 8 m, max. 12 m mächtig; $k_f: 10^{-3}$ bis 10^{-4} m/s | x | |
| Pleistozän: Weichsel-Komplex (qw) | Sandlöss und Löss | Sl | äolisch abgelagerter, kalkhaltiger Schluff; wechselnder Gehalt an toniger und sandiger Fraktion; durchgehend feste Lagerung; im Raum Bitterfeld meist zwischen 0,05 und 3 m mächtig | | x |
| | Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (1) | Ntos1 | schräg geschichtete, kiesige Fein- bis Mittelsande mit einzelnen Kalkgeröllen; wechselnde Schluffanteile; z. T. aufgearbeitetes, schlecht sortiertes Grundmoränenmaterial; überwiegend mitteldichte Lagerung, selten locker; $k_f: 10^{-5}$ bis 10^{-4} m/s | x | |
| | Schluffhorizont in der Niederterrasse des Strengbach | Pl | fein- bis mittelsandige, kalkhaltige Schluffe; steife Lagerung; $k_f: 4 \cdot 10^{-6}$ bis $3 \cdot 10^{-7}$ m/s | | x |
| | Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (2) | Ntos2 | dicht gelagerte, engständig schräg geschichtete, teilweise wechselhaft kiesige Fein- und Mittelsande; vereinzelte Kalkgerölle; $k_f: 10^{-5}$ bis 10^{-4} m/s | x | |
| | Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde | Ntom1 | feinkiesige Grobsande bis sandige Mittelkiese; seltener Feinsande mit variablen Nebengemengteilen; kalkfrei; lockere bis mitteldichte Lagerung; mehrere Generationen von Kryoturbationen und Eiskeilpseudomorphosen; $k_f: 10^{-3}$ und 10^{-4} m/s | x | |
| | Periglazialhorizont 1 | Pg1 | Schluffhorizont, periglazial überprägt; z. T. tonig-sandig und kiesig; $k_f: 10^{-7}$ bis 10^{-9} m/s | | x |
| | Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (1) | Ntum1 | zyklische Wechsellagerung von kiesigen Sanden und stark sandigen Kiesen in mitteldichter bis dichter Lagerung; zur Basis hin locker gelagert; $k_f: 10^{-3}$ bis 10^{-4} m/s | x | |
| | Periglazialhorizont 2 | Pg2 | steifer, stark feinsandiger bis mittelsandiger Schluff | | x |
| | Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (2) | Ntum2 | vgl. Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (1) | x | |
| fluviatile Rinne | Ntur | mit Niederterrassenmaterial der Mulde und Umlagerungen von Deckton, Kohle und Glimmersand verfüllt; Kohlebröckchen sind charakteristisch; $k_f: \sim 10^{-3}$ m/s | x | | |

| Stratigraphie | Modellschicht | Schichtkürzel | Schichteigenschaften zusammengestellt nach: KRAPP & RUSKE (1992); EISSMANN (1994a, b, 1995); KNOTH (1995); WIMMER & SPANGENBERG (1997); KNOTH et al. (1998); WEIß et al. (2001); FABRITIUS (2002); WYCISK et al. (2002); WOLLMANN (2004) | | |
|--------------------------------|--|---------------|---|-----------------|---|
| | | | Lithologie / Beschaffenheit | GW-Geringleiter | |
| | | | | GW-Leiter | |
| Pleistozän: Saale-Komplex (qs) | glazifluviatile Kiese und Sande | Qsgs | gelbliche bis graue, schwach schluffige bis schwach tonige, geröllführende Sande | x | |
| | Grundmoräne der Saale-Kaltzeit | Qsgm | stark lehmiger Mittelsand und stark toniger Mergel | | x |
| | Hauptterrasse der Mulde | Qsht | fluviatile Schotter; locker gelagerte Grobsande und schwach kiesige Mittel- bis Grobsande; $k_f: \sim 10^{-3}$ m/s | x | |
| Neogen: Miozän (tmi) | Bitterfelder Decktonkomplex | Dt | Serie von fetten, braunen bis grauen Tonen, kohligen Schluffen, geringmächtigen Sanden und sandig-kiesigen Anteilen; an der Basis Pyritkonkretionen und Ansammlungen von Xylit sowie kohligen Einlagerungen | | x |
| | Flözkomplex Bitterfeld | Brk | mehrere Flözbänke mit tonig-schluffigen und sandigen Zwischenmitteln; Braunkohle ist rein bis sandig mit variierenden Pyrit- und Xylitanteilen; halbfest bis fest, aber auch erdig-mulmig, krümelig, kleinstückig, knorpelig bis bröckelig; stellenweise bankige Ausbildung; an der Basis feingrusig bis grusig; kalkfrei und locker bis mitteldicht gelagert; $k_f: 2 \cdot 10^{-7}$ bis $5 \cdot 10^{-5}$ m/s | | x |
| Paläogen: Oligozän (tol) | Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil | Glso | Fein- bis Mittelsande mit wechselnden Gehalten an Grobsand, Schluff und Feinkies; Ton nur in geringen Mengen vorhanden; stellenweise Kohlepartikel und Bernstein; schwankender Glimmergehalt; locker bis mitteldicht gelagert; kalkfrei; $k_f\text{-h}: 10^{-4}$ bis 10^{-5} m/s; $k_f\text{-v}: \sim 10^{-6}$ m/s | x | |
| | Breitenfelder Horizont | Bth | Wechselfolge von kohligen Schluffen und Tonen sowie Mittel- bis Grobsanden; z. T. bernsteinführend und reich an Glimmer; kalkfrei; sehr wechselhafter, überwiegend schluffiger Charakter; weiche bis steife Konsistenz; locker bis mitteldicht gelagert; $k_f: \sim 10^{-8}$ m/s | | x |
| | Bitterfelder Glimmersand, unterer Teil | Glsu | relativ homogene, schluffige Feinsande; hoher Feinkornanteil, oft in dünnen Lagen; schwankender Glimmergehalt; lokal Kohlepartikel, an der Basis Glaukonitkörner; locker bis dicht gelagert und teilweise klebrig-lehmig ausgebildet; $k_f\text{-h}: 10^{-5}$ bis 10^{-6} m/s; $k_f\text{-v}: \sim 10^{-8}$ m/s | x | |
| | Glaukonitsand | Gks | Feinsand mit wechselnden Anteilen an Schluff, Ton und Mittelsand; glimmer- und glaukonitführend; Schmitzen, Schlieren sowie Quarziteinlagerungen; selten fein verteilte Kohlesubstanz; lockere bis mitteldichte Lagerung | | x |
| | Glaukonitschluff | Gku | feinsandige bis stark feinsandige, mehr oder minder tonige Schluffe im Wechsel mit schluffigen bis stark schluffigen Feinsanden; selten Mittelsande, Feinkiese und Quarziteinlagerungen; stellenweise fette Tone im Wechsel mit Feinsanden; bisweilen enge, parallele bis laminare Schichtung mit Glaukonitnestern und Pyritkonkretionen; stellenweise glimmerführend; steife bis halbfeste Konsistenz; $k_f: 10^{-11}$ bis 10^{-9} m/s | | x |

| | GSi3D 1.5 | MVS 8.0 | RockWorks 2004 | GMS 6.0 | GOCAD 2.1.4 |
|--|--|---|---|---|---|
| Allgemeine Informationen | | | | | |
| Anbieter | Lithosphere - applied 3D geological surveying Ltd. & Co KG / BGS | C TECH Development Corp. | RockWare, Inc. – Earth Science & GIS Software | EMS-I, Environmental Modeling Systems, Inc. | Earth Decision Sciences / Paradigm Ltd. |
| Fokussierte Anwendungsgebiete | 3D-Modellierung von ungestörten Lockergesteinsbereichen | geologische 3D-Modellierung, Geophysik, Geochemie, Umweltgeologie, Risk Assessment, Geotechnik, Bergbau | geologische 3D-Modellierung, Strukturgeologie, Geophysik, (Hydro-) Geochemie, Umweltgeologie, Geotechnik, Bergbau, Petrologie, Mineralogie, (Hydrogeologie) | geologische 3D-Modellierung, Hydrogeologie, Hydrochemie, hydrogeologische Modellierung, Transportmodellierung, Umweltgeologie, Risk Assessment, | geologische 3D-Strukturmodellierung, Reservoir Modellierung, Geophysik, Geochemie |
| Verfügbare Interpolationsverfahren | Triangulation | Kriging, Indikator-Kriging, Splining, (IDW) | Closest Point (Nearest Neighbour), IDW, Kriging, Multiple Linear Regression, Triangulation, Hybrid-Gridding, u.a. | Linear, IDW, Clough Tocher, Natural Neighbour, Kriging, Gaussian Field Generator, T-PROGS (Indikator Kriging) | DSI (Discrete Smooth Interpolation), Kriging |
| Besonderheiten | Bohrungskorrelation ausschließlich als 2D-Korrelation – Anbindung an DGM*; Konstruktion vernetzter Profilschnitte im System*; Quelltext zugänglich*; konstruktive, profilschnittgestützte Modellierung | ausschließlich durch Interpolation der Eingangsdaten gestützte Modellierung | ausschließlich durch Interpolation der Eingangsdaten gestützte Modellierung | Bohrungskorrelation in 2D und 3D möglich – Anbindung an DGM; Konstruktion vernetzter Profilschnitte im System; konstruktive, profilschnittgestützte Modellierung ist nur bedingt einsetzbar; verfügt ebenso über automatisierte Verfahren; Randbedingungen über konzeptionelle Modelle integrierbar | interpolationsgestützte Modellierung mit Hilfe des DSI-Algorithmus; durch Definition von Constraints (Randbedingungen) kann das Interpolationsergebnis beeinflusst werden |
| Eingangsdaten für die geologische 3D-Modellierung | Bohrdaten, DGM, thematische Karten (Schichtverbreitungen, ...), evtl. analoge Profilschnitte | Bohrdaten, (DGM-Informationen), Scatter-Points | Bohrdaten, (DGM-Informationen), Scatter-Points | Bohrdaten, DGM, thematische Karten (Schichtverbreitungen, ...), evtl. analoge Profilschnitte, Scatter-Points | Bohrdaten, DGM, thematische Informationen, Scatter-Points, evtl. analoge Profilschnitte, Geophysik |
| Integration von oberflächigen Schichtverbreitungen und Verbreitungspolygonen | ja | bedingt über DGM-Informationen, nicht direkt | bedingt über DGM-Informationen, nicht direkt | ja | ja |
| Modellierung quartärgeologischer Strukturelemente (Linsen, Schuppen, Rinnen, etc.) | ja | Linsen: ja Rinnen: problematisch | Linsen: ja Rinnen: problematisch | Linsen: ja Rinnen: problematisch unter automatisierten Verfahren | ja |
| Modellierung tektonischer Elemente | nein | ja | bedingt | bedingt | ja |
| Modellierung von Materialeigenschaften | bedingt | ja | ja | ja | ja |
| Aktualisierbarkeit der Modelle | ja, aber aufwändig | ja | ja | ja | ja |

* ELFERS et al. (2004)

**http://www.lithosphere.de/media/download/lithosphere_de.pdf

| | GSI3D 1.5 | MVS 8.0 | RockWorks 2004 | GMS 6.0 | GOCAD 2.1.4 |
|---|---|---|--|---|---|
| Datenmodell | | | | | |
| Art des 3D-Modells | (TIN), Gitter | Gitter, Hexaeder, (Tetraeder) | Gitter, Voxel | TIN, Gitter, Pentaeder, Hexaeder | Gitter, TIN, Tetraeder, Voxel, u. a. |
| Art der Datenhaltung | systemdefiniertes ASCII, XML | binär, systemdefinierte ASCII-Files, ASCII-ZIP-Files, | binär, systemdefinierte ASCII-Files, XML (Projekt-Datei) | binär | binär, systemdefinierte ASCII-Files, XML in Vorbereitung* |
| 3D-Topologie | keine 3D-Topologie, jedoch Modellhierarchie | keine 3D-Topologie, jedoch Modellhierarchie | keine 3D-Topologie, Hierarchie nur z. T. definierbar | keine 3D-Topologie, jedoch Modellhierarchie | ja - topologischer Kern* |
| Konsistenzprüfung / Fixierung von Schichtgrenzen an Eingangsdaten | visuell über manuelle Konstruktion - keine automatische Snapfunktion* | ja | ja | ja | ja, steuerbar |

| | | | | | |
|---|-------|---|--|---|-----|
| Modellierung | | | | | |
| Erzeugung von Trendflächen | nein* | nein | ja | ja | ja* |
| Glättung von Flächen | nein | (ja) - nur über Interpolationsparameter | ja - über Filter; über Interpolationsparameter | ja - über „Subdivide“; über Interpolationsparameter | ja* |
| interaktive Veränderungsmöglichkeit (Stützpunkte von TINs, Grids) | ja | nein | ja - eingeschränkt über Grideditor | ja | ja |
| Mathematische Operationen an TINs, Grids | nein | ja | ja | ja | ja |

| | | | | | |
|---|-------------------------------------|---|--|--|----|
| direkte Auswertungsmöglichkeiten | | | | | |
| 3D-Viewer | ja | ja | ja | ja | ja |
| virtuelle Bohrungen | ja und Subsurface Viewer | ja | ja | ja | ja |
| virtuelle Profilschnitte | ja und Subsurface Viewer | ja | ja | ja | ja |
| virtuelle Horizontalschnitte | ja und Subsurface Viewer | ja | ja | ja | ? |
| Isoliniendarstellungen | nur über GIS oder Subsurface Viewer | ja | ja | ja | ja |
| Darstellung von Iso-Volumina | nein | ja | ja - nur im Voxelmodell (Solid) | ja | ? |
| Beschneidung der Modelle mit Polygonen | nein - nicht im Nachhinein | ja | über Filterfunktionen nur im Voxelmodell (Solid) oder einzelne Grids | nein - nicht im Nachhinein | ? |
| Berechnung von Volumina | ja - direkt | ja - direkt | ja - indirekt über Mächtigkeiten-Grids | ja - direkt (fehlerhaft bei „Horizons to Solids“ aus TINs) | ja |
| Berechnung von Schichtverbreitungen | ja - direkt | ja - direkt | ja - indirekt über Mächtigkeiten-Grids und Grid-Report | nein | ja |
| 3D-Animationen | einfache Rotationen | verschiedenste Animationen programmierbar | einfache Rotationen | verschiedenste Animationen programmierbar | ? |

* ELFERS et al. (2004)

**http://www.lithosphere.de/media/download/lithosphere_de.pdf

| | GSI3D 1.5 | MVS 8.0 | RockWorks 2004 | GMS 6.0 | GOCAD 2.1.4 |
|--|--|--|--|--|---|
| Import | | | | | |
| Datenbankanbindung | nein | MS Access Anbindung für die Erstellung von systemdefinierten ASCII-Files | Import von DBF-Files möglich | ja - Verbindung zu Datenbank und SQL-Abfrage möglich | MS Access, Oracle* |
| Bohrdaten | ASCII (Schichtunterkanten) | ASCII (Schichtunterkanten) | MS Excel, ASCII (Schichtober- und Schichtunterkanten) | ASCII (Schichtoberkanten) | ASCII (Well), relationale DB (Oracle) mit Attributen* |
| Flächendaten (Karten) | ESRI-Shape | ESRI-Shape, DXF | RockPlot3D: DXF RockPlot2D: AGL (ASCII Graphics Language), DLG (Digital Line Graph (USGS)), DXF, ESRI E00, ESRI-Shape (nur für Visualisierung, für 3D-Modellierung nicht nutzbar) | ESRI-Shape, DXF | ASCII (Surface) über ArcInfo*, DXF, ESRI-Shape, SeisWorks Cultural Data File (ASCII) |
| Punktdaten | XYZ-ASCII | XYZ-ASCII (je nach Datei-Typ Attribute möglich) | ASCII, MS Excel, DBF (Attribute möglich), (DXF XYZ) | XYZ-ASCII (Attribute möglich), SQL-Datenbankabfrage | XYZ-ASCII (Attribute möglich)* |
| vorhandene 3D-Modelldaten | TIN, ESRI-Grid, Surfer-Grid, GeoObject-Grid, XML* | MVS-Field (ASCII und binär), Surfer-Grid, GMS-Konverter und VisualModflow-Konverter optional | XML, ASCII-Solid, ASCII-Grid, GXF (Grid eXchange File), ESRI-Grid (ASCII), Surfer-Grid (ASCII oder binär) | GMS-Projekt (binär), ESRI-Grid (ASCII), Surfer-Grid (ASCII), GRASS-Grid (ASCII), GMS-Solids (ASCII), TIN (ASCII) | ASCII (Model 3D) aus GOCAD*, ASCII 2D-Grid, diverse weitere Grid-Files (ASCII, binär), TIN |
| Raster- und Bilddaten | ASC, RST, JPG*, GIF | PNG, BMP, JPG, GIF, TGA, TIFF, XPM, BAY, FLC, PCX, PNM, RAS, RGB | RockPlot2D: BMP, JPG, PNG, TIFF, WMF, EMF, GIF, TGA, PCX ReportWorks: BMP, JPG, TIFF, World-Files | TIFF, JPG, PNG, SID | BMP, JPEG, PBM, PGM, PNG, PPN, RGB, TIFF, XBM, XPM |
| Isoliniendarstellungen / Tiefenlinienpläne | ESRI-Shape (2D) | ESRI-Shape (2D/3D), DXF, ASCII-Lines (ELF) | ESRI-Shape, DXF | ESRI-Shape (2D/3D), DXF | ASCII (Curve) über ArcInfo*, ESRI-Shape |
| Profilschnitte | XML* | DXF, ESRI-Shape, MVS-Field | DXF, XML | DXF, ESRI-Shape, GMS-Projekt | DXF, GeoSec Cross Section File, Locace File, ASCII (X-Section)* GeoDIN mit Einschränkung* (ESRI-Shape) |
| Geophysik | Visualisierung geophysikalischer Profilschnitte** | nicht direkt - evtl. über Attribute | Bohrlogs, Seismik, (Fractures) | Bohrlogs - über Borehole Sample Data | Seismik, Bohrlogs* |
| sonstige Parameter | interne ASCII-Struktur* Visualisierung von Punktdaten zur Geochemie und Ingenieurgeologie** | interne ASCII-Struktur (Geochemie, Grundwasserchemie, Chemie/Zeit, Geotechnik, ...) | interne ASCII-Struktur (Intervall- und Punktdaten, Geochemie, Grundwasserchemie, Geotechnik, ...) | interne ASCII-Struktur (Geochemie, jegliche Art von Punktdaten, Intervalldaten, Zeitdaten, Brunnenendaten, Pumpdaten, ...) | interne ASCII-Struktur |

* ELFERS et al. (2004)

**http://www.lithosphere.de/media/download/lithosphere_de.pdf

| | GSI3D 1.5 | MVS 8.0 | RockWorks 2004 | GMS 6.0 | GOCAD 2.1.4 |
|-----------------------------|---|--|--|--|--|
| Export | | | | | |
| Export von Modell- daten | TIN, ESRI-Grid, Surfer-Grid, Geo- Object-Grid, (XML)* ASCII | ASCII (system- und benutzerdefiniert), 3D-Shapefile, DXF, VRML, Groundwa- ter Vistas | Solids: ASCII, NOeSYS, Slicer Dicer, Voxel Ana- lyst Grids: ASCII (XYZ) oder Matrix, DXF Matrix, ESRI ASCII Grid, GeoSoft GXF, Ohio Automation ENZ, RockWare RTM, Surfer ASCII und binär, Vistapro weitere Formate: MS Excel, DBF | ASCII (GMS-TINs, GMS-Solids, Point- sets, ...), ESRI- Shape, DXF, ArcInfo & ArcView Grid, GRASS Grid, interne Anbindung an MODFLOW 2000, MT3DMS, SEAM3D, MO- DAEM, SEEP2D, PEST, T-PROGS, MODPATH, RT3D, ART3D, FEMWA- TER, UTCHEM, UCODE | ASCII, XML, VRML, Rescue Simulation: FEFLOW, CMG, Eclipse, Vip Seismik: Avf, SEP, SEG-Y, VoxelGEO weitere Formate: DXF, IRAP, ZMap, FastEdit, MS Excel* |
| Raster- und Bilddaten | JPEG, TIFF* | PNG, BMP, TGA, JPG, TIF | BMP, JPG, PNG, TIFF, WMF, EMF | BMP, JPG, PNG, TIF | ? |
| Animationen | nein | PNG, 4D, HAV, AVI | AVI | AVI | ? |
| Isoliniendarstellungen | ja - über VirGIL*/ ArcView und Sub- surface Viewer | ja - ASCII, ESRI 3D-Shape, DXF, VRML, Grafik | nur als Grafik (2D- Aufsicht) | nur als Grafik | ja* |
| frei wählbare Schnitte | ja - über VirGIL*/ ArcView und Sub- surface Viewer | ja - ASCII, ESRI Shape (3D), DXF, VRML, Grafik | ja - XML, Grafik | nur als Grafik | ja* |
| Themenkarten in 2D | ja - über VirGIL*/ ArcView und Sub- surface Viewer | nur als Grafik | nur als Grafik | ESRI-Shape (Cove- rages), Grafik | ja* |
| virtuelle Bohrungen | ja - über VirGIL*/ ArcView und Sub- surface Viewer | ja - ASCII, ESRI Shape (3D), DXF, VRML, Grafik | ja - XML, ESRI- Shape (3D), Grafik | ASCII, Grafik | ja* |

* ELFERS et al. (2004)

**http://www.lithosphere.de/media/download/lithosphere_de.pdf

**Legende:
Modellraum Bitterfeld-Süd**

| | |
|--|--|
|  | Bergbaukippen |
|  | Auffülle |
|  | Auenlehm |
|  | Holozän-Terrasse der Mulde |
|  | Sandlöss und Löss |
|  | Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (1) |
|  | Schluffhorizont |
|  | Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (2) |
|  | Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde |
|  | Periglazialhorizont 1 |
|  | Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (1) |
|  | Periglazialhorizont 2 |
|  | Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (2) |
|  | fluviatile Rinne |
|  | glazifluviatile Kiese und Sande |
|  | Grundmoräne der Saale-Kaltzeit |
|  | Hauptterrasse der Mulde |
|  | Bitterfelder Decktonkomplex |
|  | Flözkomplex Bitterfeld |
|  | Bitterfelder Glimmer- sand, oberer Teil |
|  | Breitenfelder Horizont |
|  | Bitterfelder Glimmer- sand, unterer Teil |
|  | Glaukonitsand |
|  | Glaukonitschluff |

| Schichtkörper | $k_f - h$ [m/s] | $k_f - v$ [m/s] | Quelle | k_f - Werte Modell [m/s] / [m/d] | |
|---|---|---|---|------------------------------------|-------------------------------------|
| | | | | $k_f - h$ | $k_f - v$ |
| Bergbaukippen | 10^{-7} bis 10^{-8} (westlich von Bitterfeld) | | WYCISK et al., 2002 | $5 \cdot 10^{-5}$ / 4,32 | $5 \cdot 10^{-6}$ / 0,432 |
| | $5 \cdot 10^{-6}$ | $5 \cdot 10^{-6}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| Auffülle | $5 \cdot 10^{-6}$ | $5 \cdot 10^{-6}$ | EISERMANN, 2005 | $5 \cdot 10^{-4}$ / 43,2 | $5 \cdot 10^{-5}$ / 4,32 |
| Auenlehm | | | abgeschätzt | $1 \cdot 10^{-6}$ / 0,0864 | $1 \cdot 10^{-7}$ / 0,00864 |
| Holozän-Terrasse der Mulde | 10^{-3} bis 10^{-4} | | WYCISK et al., 2003b WYCISK et al., 2002 | $3 \cdot 10^{-3}$ / 259,2 | $3 \cdot 10^{-4}$ / 25,92 |
| Sandlöss und Löss | | | abgeschätzt | $5 \cdot 10^{-6}$ / 0,432 | $5 \cdot 10^{-7}$ / 0,0432 |
| Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (1)/(2) | 10^{-4} bis 10^{-5} (Flowmeter) (mittlere Terrassenschotter) | | WEIß et al., 2001 | $1 \cdot 10^{-3}$ / 86,4 | $1 \cdot 10^{-4}$ / 8,64 |
| | $8 \cdot 10^{-4}$ (Niederterrasse) | $8 \cdot 10^{-4}$ (Nieder- terrasse) | EISERMANN, 2005 | | |
| Schluffhorizont | $4 \cdot 10^{-6}$ bis $3 \cdot 10^{-7}$ (oberer Schluffhorizont) | | WEIß et al., 2001 WYCISK et al., 2003b | $1 \cdot 10^{-6}$ / 0,0864 | $1 \cdot 10^{-7}$ / 0,00864 |
| Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde | 10^{-3} bis 10^{-4} | | RUSKE et al., 1997 WYCISK et al., 2002 | $3 \cdot 10^{-3}$ / 259,2 | $3 \cdot 10^{-4}$ / 25,92 |
| | 10^{-4} bis 10^{-5} (Flowmeter) (mittlere Terrassenschotter) | | WEIß et al., 2001 | | |
| | $8 \cdot 10^{-4}$ (Niederterrasse) | $8 \cdot 10^{-4}$ (Nieder- terrasse) | EISERMANN, 2005 | | |
| Periglazialhorizont 1/2 | 10^{-7} bis 10^{-9} | | WYCISK et al., 2002 | $1 \cdot 10^{-6}$ / 0,0864 | $1 \cdot 10^{-7}$ / 0,00864 |
| | $4 \cdot 10^{-5}$ bis $8 \cdot 10^{-9}$ (unterer Schluffhorizont) | | WEIß et al., 2001 | | |
| Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (1)/(2) | 10^{-3} bis 10^{-4} | | RUSKE et al., 1997 WYCISK et al., 2002 | $3 \cdot 10^{-3}$ / 259,2 | $3 \cdot 10^{-4}$ / 25,92 |
| | $2 \cdot 10^{-2}$ bis $7 \cdot 10^{-4}$ (untere Terrassenschotter) | | WEIß et al., 2001 | | |
| | $8 \cdot 10^{-4}$ (Niederterrasse) | $8 \cdot 10^{-4}$ (Nieder- terrasse) | EISERMANN, 2005 | | |
| fluviatile Rinne | 10^{-3} | | WYCISK et al., 2003b WYCISK et al., 2002 | $1 \cdot 10^{-3}$ / 86,4 | $1 \cdot 10^{-4}$ / 8,64 |
| | $1,5 \cdot 10^{-3}$ | $1,5 \cdot 10^{-3}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| glazifluviatile Kiese und Sande | | | abgeschätzt | $5 \cdot 10^{-4}$ / 43,2 | $5 \cdot 10^{-5}$ / 4,32 |
| Grundmoräne der Saale-Kaltzeit | | | abgeschätzt | $5 \cdot 10^{-6}$ / 0,432 | $5 \cdot 10^{-7}$ / 0,0432 |
| Hauptterrasse der Mulde | $\sim 10^{-3}$ | | KRAPP & RUSKE, 1992 | $1 \cdot 10^{-3}$ / 86,4 | $1 \cdot 10^{-4}$ / 8,64 |
| Bitterfelder Deck- tonkomplex | | | abgeschätzt | $1 \cdot 10^{-7}$ / 0,00864 | $1 \cdot 10^{-8}$ / 0,000864 |
| Flözkomplex Bitter- feld | $5 \cdot 10^{-5}$ bis $7 \cdot 10^{-6}$ (Feld) 1 bis $2 \cdot 10^{-7}$ (Labor) | | RUSKE et al., 1997 | $2 \cdot 10^{-7}$ / 0,01728 | $2 \cdot 10^{-8}$ / 0,001728 |
| | $5 \cdot 10^{-5}$ bis $1 \cdot 10^{-7}$ | | WEIß et al., 2001 | | |
| | $1 \cdot 10^{-6}$ | $5 \cdot 10^{-7}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| Bitterfelder Glim- mersand, oberer Teil | 10^{-4} bis 10^{-5} | $1 \cdot 10^{-6}$ | WYCISK et al., 2002 | $1 \cdot 10^{-4}$ / 8,64 | $1 \cdot 10^{-5}$ / 0,864 |
| | $\sim 10^{-4}$ bis 10^{-5} | | KRAPP & RUSKE, 1992 | | |
| | $1,7$ bis $3,4 \cdot 10^{-5}$ | | RUSKE et al., 1997 | | |
| | $0,5 \cdot 10^{-5}$ bis $5 \cdot 10^{-4}$ | | WEIß et al., 2001 | | |
| | $1,2 \cdot 10^{-4}$ | $3 \cdot 10^{-5}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| Breitenfelder Hori- zont | bis 10^{-8} | | WYCISK et al., 2002 | $1 \cdot 10^{-8}$ / 0,000864 | $1 \cdot 10^{-9}$ / 0,0000864 |
| | $5 \cdot 10^{-5}$ | $1 \cdot 10^{-6}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| Bitterfelder Glim- mersand, unterer Teil | 10^{-6} bis 10^{-5} | $1 \cdot 10^{-8}$ | WYCISK et al., 2002 | $2 \cdot 10^{-5}$ / 1,728 | $2 \cdot 10^{-6}$ / 0,1728 |
| | $\sim 10^{-4}$ bis 10^{-5} | | KRAPP & RUSKE, 1992 | | |
| | $1,7$ bis $3,4 \cdot 10^{-5}$ | | RUSKE et al., 1997 | | |
| | $0,5 \cdot 10^{-5}$ bis $5 \cdot 10^{-4}$ | | WEIß et al., 2001 | | |
| | $1 \cdot 10^{-5}$ | $1 \cdot 10^{-6}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| Glaukonitsand | 10^{-6} bis 10^{-5} | $1 \cdot 10^{-8}$ | WYCISK et al., 2002 | $2 \cdot 10^{-5}$ / 1,728 | $2 \cdot 10^{-6}$ / 0,1728 |
| | $5 \cdot 10^{-6}$ | $5 \cdot 10^{-6}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| Glaukonitschluff | 10^{-9} bis 10^{-11} | | WYCISK et al., 2002 | $1 \cdot 10^{-10}$ / 0,00000864 | $1 \cdot 10^{-11}$ / 0,000000864 |
| | $1 \cdot 10^{-6}$ | $1 \cdot 10^{-6}$ | EISERMANN, 2005 | | |
| Rupelton | $< 1 \cdot 10^{-12}$ | | WYCISK et al., 2002 | - | - |
| | 10^{-9} bis 10^{-11} | | WYCISK et al., 2003b | | |
| | 10^{-9} bis 10^{-11} | | KRAPP & RUSKE, 1992 | | |

| Schichtkörper | Nutzbare Porositäten | Bemerkungen |
|---|----------------------|---|
| Bergbaukippen | 0,18 | abgeschätzt aus Lithologie |
| Auffülle | 0,20 | abgeschätzt aus Lithologie |
| Auenlehm | 0,13 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Holozän-Terrasse der Mulde | 0,16 | aus Laboruntersuchungen* gemittelt |
| Sandlöss und Löss | 0,15 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (1) | 0,14 | übernommen von Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde |
| Schluffhorizont | 0,12 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Niederterrasse (oberer Teil) - Strengbach (2) | 0,14 | übernommen von Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde |
| Niederterrasse (oberer Teil) - Mulde | 0,14 | aus Laboruntersuchungen* gemittelt |
| Periglazialhorizont 1 | 0,13 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (1) | 0,16 | aus Laboruntersuchungen* gemittelt |
| Periglazialhorizont 2 | 0,13 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Niederterrasse (unterer Teil) - Mulde (2) | 0,16 | aus Laboruntersuchungen* gemittelt |
| fluviatile Rinne | 0,16 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| glazifluviatile Kiese und Sande | 0,20 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Grundmoräne der Saale-Kaltzeit | 0,10 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Hauptterrasse der Mulde | 0,22 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Bitterfelder Decktonkomplex | 0,08 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Flözkomplex Bitterfeld | 0,12 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Bitterfelder Glimmersand, oberer Teil | 0,17 | aus Laboruntersuchungen* gemittelt |
| Breitenfelder Horizont | 0,12 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |
| Bitterfelder Glimmersand, unterer Teil | 0,15 | aus Laboruntersuchungen* gemittelt |
| Glaukonitsand | 0,15 | aus Laboruntersuchungen* gemittelt |
| Glaukonitschluff | 0,08 | abgeschätzt aus Lithologie / YU et al., 1993 |

* freundliche Bereitstellung durch DR. RUSKE, Halle (Saale)

Lebenslauf

Persönliche Daten

| | |
|---------------------|---------------|
| Vor- und Zuname | Tobias Hubert |
| Geburtsdatum | 03.08.1977 |
| Geburtsort | Halle (Saale) |
| Staatsangehörigkeit | deutsch |
| Familienstand | ledig, 1 Sohn |

Beruflicher Werdegang

| | |
|-------------|--|
| seit 2008 | RWE Dea AG, Hamburg: Sachgebietsleiter Systemunterstützung mit Schwerpunkt der Betreuung von E&P Software aus den Bereichen Seismische Interpretation, Strukturmodellierung, Geologische Modellierung, Reservoir-Modellierung, Reservoir-Simulation und Produktion |
| 2007 – 2008 | Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg – Universitätszentrum für Umweltwissenschaften: wissenschaftliche Hilfskraft mit Hochschulabschluss |

Hochschulstudium

| | |
|-------------|---|
| 2005 – 2010 | Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Promotionsstudium Studienfach: Geologie/Paläontologie Fachgebiet der Promotion: Hydro- und Umweltgeologie |
| 1998 – 2005 | Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Studienfach: Geologie/Paläontologie Abschluss: Diplom |
| 1997 – 1998 | Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg Studienfach: Umwelttechnik |

Wehrdienst

1996 - 1997

Schulbildung

| | |
|-------------|--|
| 1991 – 1996 | Trotha-Gymnasium „Hanns Eisler“, Halle (Saale) Abschluss: Allgemeine Hochschulreife |
| 1984 – 1991 | Oberschule Wallwitz |

Halle (Saale), 18. Januar 2011

Tobias Hubert